

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 電子構造の揺らぎに基づく機能性触媒の創製
2. 研究代表者： 倉橋 拓也（京都大学大学院工学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

○評点:

A 期待通りの成果が得られている

○総合評価コメント:

本研究課題では、CO₂などを炭素源とした有用物質生産への貢献及び不斉炭素-炭素結合形成反応による複雑な分子骨格の自在合成の実現を目的としている。この目的の実現に向けて、ポルフィリン金属錯体の電子構造の揺らぎに着目し、機能性触媒を設計・合成して触媒反応に応用した。

その結果、Ru ポルフィリン錯体を触媒に用いることによるトランス付加型Diels-Alder反応の開発に成功し、天然物などの分子骨格に多く見られる、縮合六員環骨格であるトランス型オクタロンを選択的に構築できる新規触媒反応を見いだした。また、Fe ポルフィリン錯体を設計して触媒に用いることで、従来は達成できなかった形式のアルデヒドとジエンの hetero-Diels-Alder 型環化付加反応が進行することを見いだした。また、磁化率測定や赤外吸収分光、核磁気共鳴分光、XAFS といった分光測定に加えて、量子化学計算を実施することにより、反応機構解析に取り組んでポルフィリン金属錯体のルイス酸触媒機能を解明した。

これらの成果は、ポルフィリン錯体のルイス酸触媒としての基本的な特徴を明らかにするとともに、従来触媒では困難であった反応を実現したものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。今回の成果を通じて、強いルイス酸性と高い触媒生産性の両立の手がかりを得たと認められるが、今後方法論が確立できれば、工業的に様々な展開が考えられるものと期待できる。