

提出日：平成 29 年 5 月 16 日

平成 28 年度 大阪大学蛋白質研究所 拠点事業

(2) 研究成果の概要

課題名	ケンブリッジ結晶学データベースを用いた機能性有機分子化合物に関する研究		
研究代表者	氏名	飯田 拓基	
	所属機関名・部局名	島根大学・大学院総合理工学研究科	
	職名	准教授	
事業名 (該当の事業名の右欄に○)	<input type="radio"/>	共同研究員	
	<input type="radio"/>	超高磁場NMR 共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	クライオ電子顕微鏡共同利用研究課題	
	<input type="radio"/>	客員フェロー	
蛋白研受入担当教員名	中村 春木		
<p>代表者らは、分子認識能や光学・電子特性、有機触媒能などの多彩な機能を有するこれまでに報告例のないπ共役系有機分子や高分子・超分子の合成とその応用について研究を行っている。開発した有機化合物が発現する機能は、その分子構造や高次構造に大きく依存することが予想される。そこで本研究では、ケンブリッジ結晶学データベースを駆使することにより、得られた様々な有機分子化合物の構造を精密に解析するとともに、それらが発現する機能との相関について検討を行った。</p> <p>具体的には生体内でも重要な役割を担うπ共役系有機分子であるリボフラビン（ビタミン B₂）に着目し、その修飾によって、構造の異なるフラビニウム塩である 5-エチルイソアロキサジニウム塩、5-エチルアロキサジニウム塩、1,10-エチレン架橋型アロキサジニウム塩を合成した。これらのフラビニウム塩が発現する物性を詳細に調べ、ケンブリッジ結晶学データベースによりこれまで報告されている類似化合物の X 線結晶構造解析の結果をあわせて検討を行った結果、その構造の相違が発現する酸化還元能や有機分子触媒能に大きな影響を与えることが明らかとなった。これらの知見をもとに、フラビニウム塩の酸化還元触媒能を活用した新しい触媒反応を開発することに成功した。</p> <p>また、天然高分子であるキチンを有機分子触媒の足場として用い、環境負荷の低い不均一系触媒を開発する試みを行った。これまでに報告されているキチンの X 線結晶構造解析データを分析し、その高次構造を触媒設計に活用することにより、良好な触媒能を発現する高分子触媒の開発に成功した。</p>			