

# 有機反応で分子を組み立てる

忍久保 洋 大学院工学研究科教授

高校化学の有機化学に退屈な暗記科目というイメージをもつ人は多いでしょう。そういう人にとっては「亀の甲」と言われるベンゼンの構造は見るのもいやかもしれません。大学の有機化学でも化合物名や反応名など覚えることがあるので、残念ながら化学を専攻する学生の中にも有機化学嫌いが存在します。しかし、反応を操りあたかもプラモデルを組み立てるかのように、部品となる化合物をつなぎ合わせ、様々な化合物を作り出せるのが有機化学の醍醐味です。分子を組み立てた後、構造解析により分子構造が見える瞬間は、作品を完成させた瞬間に似ています。自分たちが生み出した化合物を美しいと感じ、部品となるベンゼン環は愛らしいとさえ感じるようになるのです。

私達のグループでは、 $\pi$ 電子化合物をターゲットとして分子を組み立てる有機合成を行なっています。 $\pi$ 電子化合物は多彩な光機能や電子的機能をもっており、次世代を担う新しい材料として期待されています。その用途は、有機ELや有機半

導体、有機太陽電池など多方面に広がっています。 $\pi$ 電子化合物は、適切な分子設計によりその物性をコントロールすることが可能で、軽量、デバイス作成が容易などの特徴と相まって近年活発に研究されています。同時に、その美しい構造が化合物を組み立てるモチベーションとなっています。

最近完成した分子を1つ紹介しましょう。名前をノルコロールといい五角形の部品（ピロール）をつなぎ合わせることによって組みあげています（図1）[1]。部品の結合の各段階にどのような反応を選択するかが腕の見せ所です。この分子はこれまで不安定であるとされてきました。私達もそのことは知っていたので、最初はこれを合成するつもりではなく、実は別のものを作る計画でした。つまり、ノルコロールは予期せずできてしまったのです。このような予期しない発見があるのも研究の面白いところです。この分子は対称性の高い美しい構造（図2）をもつ一方、予想に反して実は安定な分子であり容易に合成できることが分かってきました。

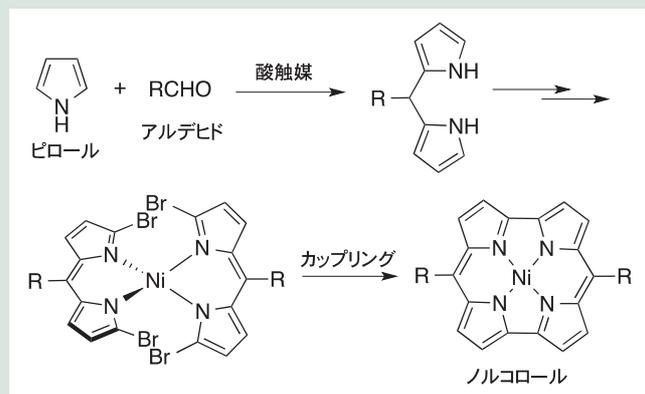


図1 ノルコロールの合成方法（炭素上の水素は省略）

ベンゼンは6個の $\pi$ 電子をもつため「芳香族性」をもちます（図3）。「芳香族性」とは平面分子が $(4n+2)$ 個の $\pi$ 電子をもつときに発現する性質で、分子を安定化する作用があります。一方、ノルコロールの基本骨格となっている[16]アニユレンは16個の $\pi$ 電子をもつため「反芳香族性」をもちます。「反芳香族性」は「芳香族性」とは反対に分子を不安定にするとされています。反芳香族化合物は不安定で容易に入手できるものがなかったため、社会的に意義ある応用は見つかっていないのが現状です。これはべ

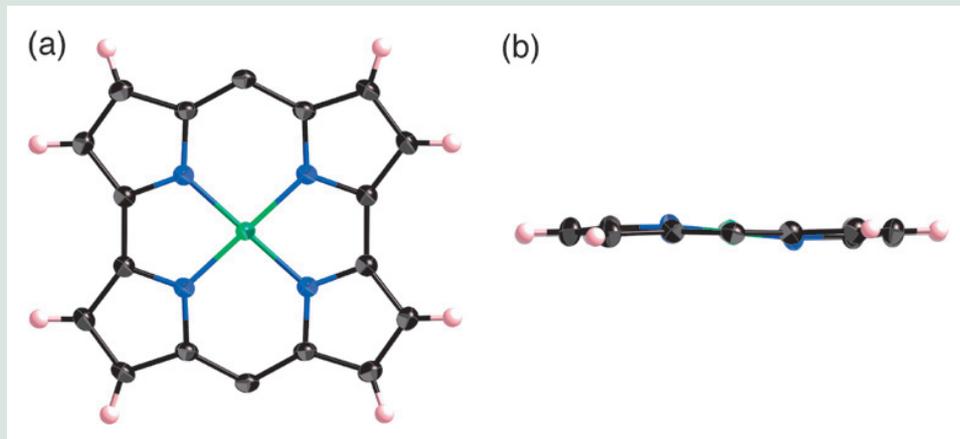


図2 単結晶 X 線構造解析によって得られたノルコロールの構造。(a) は上から (b) は横から見た図 (簡単化のため置換基を省略)。黒は炭素原子、青は窒素原子、ピンクは水素原子、緑はニッケル原子を示す。

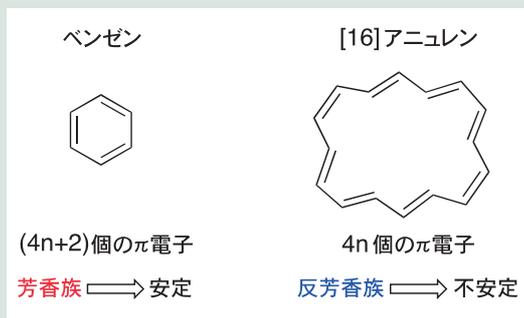


図3 芳香族化合物と反芳香族化合物 (炭素上の水素は省略)。1つの二重結合あたり2つのπ電子が存在している。

ベンゼンなどの芳香族性化合物がプラスチック・医薬品など身の回りにあふれているのと対照的です。しかし、反芳香族化合物には電子を出し入れしやすいなど興味深い性質があります。私達が合成したノルコロールは安定で容易に得られるため

「反芳香族性」についてさらに詳しく研究するための素材として適しています。反芳香族化合物の性質をもっと明らかにして、芳香族化合物とは異なる独自の応用に結びつけていきたいと考えています。

私達の研究は、実用性を追求していく研究とは一線を画しています。実用だけを求めるのであれば、簡便に合成できる性質もよく分かった既知物質を用いる方が合理的でしょう。しかし、私達は自分たちオリジナルの新しい分子を組み立てて完成させるという喜びを味わいたいのです。試行錯誤して組み立てた自分の分子にこそ真に新しい性質が潜んでいると信じ、日夜実験室にこもっています。今後も、世界を驚かすような分子を組み立てて行きたいと思います。

[1] T. Ito *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2012, **51**, 8542.

1969年京都市生まれ。1995年京都大学大学院工学研究科博士後期課程中退、1995年京都大学工学部助手、2003年京都大学大学院理学研究科助教授、2008年より現職。その間、1999～2000年マサチューセッツ工科大学客員研究員、2003～2007年科学技術振興機構さきかけ研究者。モットー：研究室メンバーとともに成長すること。趣味は料理・音楽鑑賞。

しのぼ ひろし

