

【基盤研究(S)】

生物系 (医歯薬学 I)



研究課題名 次世代芳香族科学に向けた新化学、新骨格、新理論、 新機能、新技術の創出

東京大学・大学院薬学系研究科・教授 うちやまのぶ
内山 真伸

研究分野：有機合成化学、元素化学、理論化学
キーワード：芳香族性、分子変換、材料化学、分光学

【研究の背景・目的】

芳香族とは有機化学における重要な基本概念であり、剛直な平面構造・高い疎水性・置換基の方向規定・低い HOMO-LUMO ギャップなど特有の性質を有しており、医薬品、機能性材料などに広く用いられてきました。様々な特徴を持つ高機能芳香族化合物は、次世代のテクノロジー（記憶媒体、有機半導体、レーザープリンター、癌の光線力学療法、非線形光学物質、分子イメージングなど）には欠かせない材料と考えられています。

本研究課題では、次世代の芳香族科学を開拓することを目的とし、合成化学・元素科学・理論計算・分光学などを結集して、芳香族（芳香族、反芳香族、非芳香族）の原理に立ち返り、全く概念的に新しい金属含有芳香環の創製、極低 HOMO-LUMO ギャップ芳香環の設計・合成法などを切り拓きます。

【研究の方法】

本研究課題では、有機化学・物理化学・理論化学の観点から次世代の芳香環の化学を切り拓くべく以下の4つの課題を中心に取り組みます。

- ① 新しい芳香族反応の開拓（超強酸、超強塩基、触媒、環化反応の開発）
- ② 芳香族（ホモ/メビウス/非ベンゼン系芳香族、反芳香族、非芳香族）の起源にせまる
- ③ 金属含有（有機-無機ハイブリッド型）芳香環の創製
- ④ 太陽電池・分子イメージング・光化学療法を指向した低 HOMO-LUMO ギャップ近赤外芳香族分子の設計と合成

【期待される成果と意義】

本研究課題において期待される成果の一つに、新たな近赤外色素分子の創製が挙げられます。これまでの近赤外色素は、狭い HOMO-LUMO ギャップを実現するために、高い HOMO と低い LUMO が必要とされてきました。しかしながら、この高い HOMO が災いして化合物の安定性に欠ける（酸化に弱い）という欠点が物質としての限界をもたらしていました。本研究課題では、低い HOMO を有する安定な近赤外色素の開発に挑みます。この新たな近赤外色素は、癌の光化学療法や分子イメージングに大変期待されています。近赤外光は、体の奥底まで浸透して細胞の隅々まで届かせることができるからです。次世代有機太陽電池の世界でも、近赤外光を利活用できる分子の創製が求められています。これまで、近

赤外光を利活用できる安定な有機分子が存在しなかったからです。他にも、様々な物性が期待される次世代芳香族化合物の創製と機能創発を目指します。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

1. A. Muranaka, S. Yasuike, C-Y. Liu, J. Kurita, N. Kakusawa, T. Tsuchiya, M. Okuda, N. Kobayashi, Y. Matsumoto, K. Yoshida, D. Hashizume, M. Uchiyama, “Effect of Periodic Replacement of the Heteroatom on the Spectroscopic Properties of Indole and Benzofuran Derivatives”, *J. Phys. Chem. A*, **2009**, *113*, 464-473.
2. A. Muranaka, M. Yonehara, M. Uchiyama, “Azulenocyanine: A New Family of Phthalocyanines with Intense Near-IR Absorption”, *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, *132*, 7844-7845.
3. Y. Yamamoto, Y. Hirata, M. Kodama, T. Yamaguchi, S. Matsukawa, K-Y Akiba, D. Hashizume, F. Iwasaki, A. Muranaka, M. Uchiyama, P. Chen, K. Kadish, N. Kobayashi, “Synthesis, Reactions, and Electronic Properties of 16 π -electron Octaisobutyltetraphenylporphyrin (OiBTPP)”, *J. Am. Chem. Soc.*, **2010**, *132*, 12627-12638.

【研究期間と研究経費】

平成 24 年度－28 年度
167,800 千円

【ホームページ等】

<http://www.f.u-tokyo.ac.jp/~kisoyuki/>