

【基盤研究(S)】

生物系 (医歯薬学)



研究課題名 物質と生命を光でつなぐ分子技術の開発

東京大学・大学院薬学系研究科・教授 うちやま まさのぶ
内山 真伸

研究課題番号：17H06173 研究者番号：00271916

研究分野：有機化学、元素化学、理論化学

キーワード：分子変換、材料化学、分光学

【研究の背景・目的】

π 共役系有機分子は、光を利活用する物質科学・生命科学において、重要な基本電子構造を有する分子群です。しかしながら、現在でも π 共役系化合物の合理的設計・合成・置換基導入、ならびに機能（吸光発光特性、量子収率、熱安定性など）の制御には大きな制限があり、生命科学・物質科学への展開が阻まれています。本研究では、代表者らがこれまで培ってきた有機合成化学・理論化学・分光学・元素化学を結集し、光を利活用するための新奇 π 共役系有機化合物の提案と設計・合成法の開発、多様化、ならびに電子と構造・機能の自在制御を目指します。本研究を通じて、物質と生命を光でつなぐ分子技術に挑みます。

本研究課題において目標とする成果の一つに、新たな近赤外有機色素分子の創製が挙げられます。近赤外光とは、可視光線と遠赤外線との領域の光です。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。

【研究の方法】

本研究課題では、有機化学・物理化学・理論化学・分光学・元素化学などを結集して、次世代の生命科学・物質科学研究を光によって切り拓くための分子科学の創製、光応答性 π 分子の創出、応用・展開を目指し、以下の4つの課題を中心に取り組みます。

- (1) 新奇 π 共役系有機化合物の設計・合成・置換基導入のための有機化学・分子技術の創出
- (2) 光を利活用するための分子科学の創成
- (3) 光を利活用するための理論化学の開発
- (4) 光を利活用する応用研究の開拓

【期待される成果と意義】

生体ライブイメージング（診断）、光線力学療法（治療）、有機太陽電池（資源）、電子材料（エネルギー）、など広く生命科学・物質科学に、『光応答性

π 共役有機分子』の需要はますます高まってきています。上記研究における今後の技術進展の障害としては、既存の光応答性 π 有機分子の数の制限であり、限られた分子の中でやりくりしているのが現状です。化合物には固有の性質があり、技術にも個々の必要要件（溶解性、発光波長、発光（蛍光・燐光）収率、三重項収率、熱失効効率、熱安定性など）が存在します。光応答性 π 分子の創出・多様化・ライブラリー構築と電子構造の理論設計を目指す本研究は、我が国の光分子技術の大きなブレークスルーになると確信しています。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- N. Toriumi, A. Muranaka, E. Kayahara, S. Yamago, M. Uchiyama “In-plane Aromaticity in Cycloparaphenylene Dications: A Magnetic Circular Dichroism and Theoretical Study” *J. Am. Chem. Soc.*, **137**, 82-85 (2015)
- D.-Y. Wang, M. Kawahata, Z.-K. Yang, K. Miyamoto, K. Yamaguchi, C. Wang, M. Uchiyama, “Stille Coupling via C-N Bond Cleavage” *Nature. Commun.*, **7**, 12937 (2016)
- N. Tezuka, K. Shimojo, K. Hirano, C. Wang, T. Saito, R. Takita, M. Uchiyama, “Direct Hydroxylation and Amination of Arenes via Deprotonative Cupration” *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 9166-9171 (2016)
- M. Tanioka, S. Kamino, A. Muranaka, Y. Ooyama, H. Ota, Y. Shirasaki, J. Horigome, M. Ueda, M. Uchiyama, D. Sawada, S. Enomoto, “Reversible Near-Infrared/Blue Mechano-fluorochromism of Aminobenzopyranoxanthene” *J. Am. Chem. Soc.*, **137**, 6436-6439 (2015)

【研究期間と研究経費】

平成29年度-33年度 163,300千円

【ホームページ等】

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