

**先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)
実施状況報告書(平成 22 年度)**

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名	エネルギー固定型メカノ反応の開発と余剰動力の直接化学的燃料化
研究機関・ 部局・職名	北海道大学・大学院工学研究院・教授
氏名	伊藤 肇

1. 当該年度の研究目的

メカノ化合物候補体の合成：本研究のきっかけとなる発光性メカノクロミズムの研究で、ある分子が複数の弱い分子間相互作用で結晶化する場合に、安定な状態と機械的刺激によりやや高エネルギーを保った状態をもつことを明らかにしている。相互作用を複数持つ可能性のある化合物を設計、合成する。化合物探索には、コンビナトリアル手法による多様な候補化合物の迅速合成と、スクリーニングの手法を積極的に用いる。本年度は、期間が短いため、準備的な研究として、このような多種類の化合物の合成に絞って研究を遂行する。具体的には、機械的刺激によって構造を誘起される可能性のある特定の基本骨格を慎重にデザインし、これに多種多様な置換基を迅速に導入する合成手法の開発を行う。

2. 研究の実施状況

アリール金イソシアニド錯体は機械的刺激により、その発光性を大きく変化させるメカノクロミズムという興味深い特性を持つ。これは、機械的刺激によりその固体構造が変化するために起こる。本研究の研究目的の一つである、メカノ化合物の開発において、この性質を持つ化合物の研究が端緒となると考えた。アリール金イソシアニド錯体の従来合成ルートでは、アリール金前駆体を一旦合成してから配位子交換によりイソシアニド配位子を導入するという合成方法がとられていたが、この研究では塩化あるいは臭化金イソシアニド錯体を別途合成してから、トランスメタル化法によりアリール基を導入する方法を検討した。その結果、これまでは導入不可能であった種々の官能基を導入することに成功した。この方法を用いて、錯体の系統的合成とその結晶構造の解析を行い、その結果構造と発光性メカノクロミズムの間の明確な相関が観測できた。発光性メカノクロミズムに関しては、固体内で平面型コンフォメーションをとる錯体では明確なメカノクロミズム特性が観察されたのに対し、直交型コンフォメーションをとる錯体においてのみ、メカノクロミズムが観察できなかった。メカノクロミズムは、機械的刺激により、錯体の固体構造にズレが生じ、金原子間相互作用が多数形成される結果、長波長側の発光性が現れたものと考えられる。一方、メカノクロミズムを示さない錯体では、分子間相互作用を形成しにくいコンフォメーションをとり、さらに錯体同士が CH— π 型相互作用で強く固定されているために構造のズレが起こりにくいと推測される。その他、メカニカルな刺激をプロモーターとする反応、触媒反応の検討を並行して行った。

3. 研究発表等

雑誌論文 計 1 件	<p>(掲載済み一査読有り) 計 1 件 Sasaki, Y.; Horita, Y.; Zhong, C.; Sawamura, M.; Ito, H. Copper(I)-Catalyzed Regioselective Monoborylation of 1,3-Enynes with an Internal Triple Bond: Selective Synthesis of 1,3-Dienylboronates and 3-Alkynylboronates <i>Angew. Chem., Int. Ed.</i> 2011, <i>50</i>, 2778. ISSN: 1521-3773, DOI: 10.1002/anie.201007182</p> <p>(掲載済み一査読無し) 計 0 件</p> <p>(未掲載) 計 0 件</p>
会議発表 計 3 件	<p>専門家向け 計 3 件</p> <p>(1) 室本麻衣; 澤村正也; 伊藤肇, 新規アリール金イソシアニド錯体の合成とメカノクロミック発光, 第91日本化学会春季年会, 横浜市, 日本化学会主催, 2011.3.26-29.</p> <p>(2) 宮貴紀; 澤村正也; 伊藤肇, 銅(I)触媒によるジボロンを用いたホウ素化反応の高活性化と簡便化, 第91日本化学会春季年会, 横浜市, 日本化学会主催, 2011.3.26-29.</p> <p>(3) 國井峻; 澤村正也; 伊藤肇, 銅(I)触媒を用いた 1-シリル-2-ボリルシクロブタンの不斉合成, 第91日本化学会春季年会, 横浜市, 日本化学会主催, 2011.3.26-29.</p> <p>一般向け 計 0 件</p>
図書 計 0 件	
産業財産権 出願・取得状況 計 0 件	<p>(取得済み) 計 0 件</p> <p>(出願中) 計 0 件</p>
Webページ (URL)	http://labs.eng.hokudai.ac.jp/labo/organoelement/
国民との科学・技術対話の実施状況	サイエンスカフェの実施等を検討中
新聞・一般雑誌等掲載 計 0 件	
その他	

4. その他特記事項

なし

実施状況報告書(平成22年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されます

1. 助成金の受領状況(累計)

(単位:円)

	①交付決定額	②既受領額 (前年度迄の 累計)	③当該年度受 領額	④(=①-②- ③)未受領額
直接経費	124,000,000	0	68,400,000	55,600,000
間接経費	37,200,000	0	20,520,000	16,680,000
合計	161,200,000	0	88,920,000	72,280,000

2. 当該年度の収支状況

(単位:円)

	①前年度未執 行額	②当該年度受 領額	③当該年度受 取利息等額 (未収利息を 除く)	④(=①+②+ ③)当該年度 合計収入	⑤当該年度 執行額	⑥(=④-⑤) 当該年度未執 行額
直接経費	0	68,400,000	0	68,400,000	1,800,000	66,600,000
間接経費	0	20,520,000	0	20,520,000	540,000	19,980,000
合計	0	88,920,000	0	88,920,000	2,340,000	86,580,000

3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

	金額	備考
物品費	1,800,000	サーモグラフィー、実験試薬、消耗品等
旅費	0	
謝金・人件費等	0	
その他	0	
直接経費計	1,800,000	
間接経費計	540,000	
合計	2,340,000	

4. 当該年度の主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様・型・性能 等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関 名
サーモグラフィ 1ThermoGEAR G120	NEC Avio G120W2-NNU- A01	1	934,500	934,500	2011/3/10	北海道大学
				0		
				0		