

# 精密分子設計に基づく 有機基トランスファー分子の創出

代表研究者 隅田 有人  
金沢大学 医薬保健研究域 薬学系 助教

## 研究要旨

有機ホウ素化合物は、触媒、反応剤、医薬品、イメージングプローブ、材料など、その利用は多岐にわたる。なかでもビルディングブロックとして極めて重要であり、多くの炭素-炭素結合形成反応に用いられる。しかし、ホウ素試薬は比較的高価であることに加え、変換にしばしば高い反応温度を必要とする。また late-stage での化学修飾や複雑生理活性物質の多様化においては多大なリソースをかけることが必要不可欠であり、改善の余地も残されている。これに対して本研究では、回収・再利用が可能な、あたかも求核剤の「vehicle (乗り物)」として働く有機ホウ素化合物を利用することで、これらの課題の解決を目指した。

○これまでに申請者は、三配位状態では剛直な骨格と高い平面性を有する五環性ホウ素化合物 8,9-dioxa-8a-**borab**enzo[fg]tetracene (以後 boracene) を見出している。今回この「boracene」に、有機リチウム (Li) や Grignard (有機マグネシウム) 試薬を作用させると、大気下や水中でも取り扱い可能な四配位ホウ素アート錯体が得られた。またホウ素アート錯体は、Li, Mg のいずれの場合においても X 線構造解析により確認できた。この boracene から調製したホウ素アート錯体とハロゲン化アリールを用いて (1) パラジウム (Pd) 触媒による鈴木-宮浦カップリング反応や (2) 青色 LED 照射下でのニッケル (Ni) 触媒によるアルキル化反応を行うと、求核剤由来の有機基のみが選択的に反応して、それぞれ対応するクロスカップリング生成物を与えた。本反応は多彩な官能基共存下でも問題なく反応は進行した。また本手法は、単離したホウ素アート錯体を用いても、ワンポットで調製した場合においても反応が効率良く進行することが確認されるとともに、いずれのクロスカップリング反応においても反応後に単離された boracene は収率よく回収され、精製後に再利用できた。本システムは、安価な試薬による短段階かつ汎用性の高い化学変換であるため、大幅なリソース削減と新しい合成基盤技術になると期待される。