

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	楠本 周平
研究機関名	東京大学
所属部署名	大学院工学系研究科化学生命工学専攻
役職名	講師
研究課題名	π 結合性軌道設計による新規原子軌道混成状態の実現
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

強酸性カルベンである、ホウ素 2 置換カルベン(ジボリルカルベン)の発生と観測に成功した。炭素中心に 2 つのホウ素原子とハロゲン(フッ素もしくは塩素)が結合したアニオンからハロゲン化物を引き抜くことにより、ジボリルカルベン種を溶液中で発生させ、核磁気共鳴分光法、質量測定により観測した。さらに系中で発生したジボリルカルベンをルイス塩基で捕捉することにより、ルイス酸性ジボリルカルベン-ルイス塩基付加体として構造を確認した。ルイス塩基付加体の分光学的測定と、理論計算によりジボリルカルベンのルイス酸性を見積もることで、中性分子として最も強い部類のルイス酸性を有していることを明らかにした。

4 電子供与配位子であるカルボン酸を分子内に 2 つ有する環状ビスカルボジホスホラン配位子を合成し、構造を決定した。さらに 3 塩化ホウ素との反応により、3 配位ホウ素ジカチオン種が生成することを確認し、構造電子状態の解析を行った。得られた 3 配位ホウ素ジカチオン種は配位子による立体的制限によって大きく歪んだ構造を持つ。この構造的歪みとカルボジホスホランの高い電子供与性により、中心ホウ素は 2 配位トリカチオン構造の寄与を持つことも明らかにした。