

4P056

植物系バイオマスを用いたピロン誘導体の合成と物性

(法政大学院理工学研究科¹, 法政大学マイクロ・ナノテクノロジー研究センター², 森林総研³)

○蛭子 絵野¹, 桑名 良明¹, 高橋 りえ¹, 井上 和美¹, 稲見 栄一², 大塚 祐一郎³, 中村 雅哉³,
緒方 啓典^{1,2}

Synthesis and solid state properties of the pyrone derivatives with a plant-based biomass

(Grad. Sch. Sci. and Engin., Hosei Univ.¹, Research Center for Micro-Nano Technol., Hosei Univ.²,
Forestry and Forest Products Research Institute³) ○Kaino Hiruko¹, Yoshiaki Kuwana¹, Rie Takahashi¹,
Kazumi Inoue¹, Eiichi Inami², Yuichiro Otsuka³, Masaya Nakamura³ and Hironori Ogata^{1,2}

【序】

現在、資源の循環的・効率的利用を進め、環境に優しい経済社会を築いていくことが課題となっている。このような社会を築いていくためのひとつの方法として、木質バイオマスの活用があげられる。木質バイオマスであるリグニンは樹木の木質から得られる生体高分子だが、実用的な利用法が少なく、多くは廃棄されているのが現状である。リグニンを微生物分解して得られる 2-pyrone-4,6-dicarboxylic acid (PDC) は生分解性をはじめ様々な優れた特性を持つことから、PDC を用いた環境に優しい様々な機能性材料の開発が期待されている。

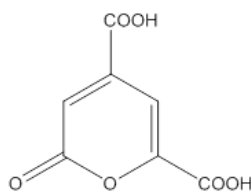


Fig. 1 2-pyrone-4,6-dicarboxylic acid(PDC)の分子構造

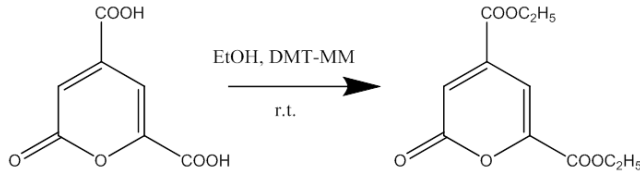
我々は、PDC の特性の一つとして、電子受容性に注目し、各種電荷移動塩の開発を行ってきた。本研究では、PDC のカルボキシ基(COOH 基)を異なる電子吸引基に置換した 2-ピロンの 4,6 位置置換体について、非経験的分子軌道法計算によりエネルギー準位を計算し、電子受容性分子としての適性を検討した。さらに、この計算結果をもとに、より高い電子受容性をもつ PDC 置換体の合成を行い、その物性評価を行った。

【実験方法】

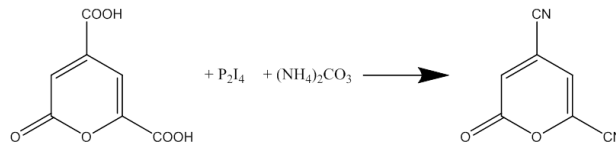
Gaussian09 を用いた分子軌道法計算 (密度汎関数法 : B3LYP/6-311G(d)) により、PDC の-COOH 基を電子求引基であるメトキシカルボニル基(COOCH₃ 基)、エトキシカルボニル基(COOC₂H₅ 基)、シアノ基(CN 基)に置換した分子の HOMO および LUMO のエネルギー準位を計算した。また、以下に示す合成スキームに従い実際に同分子を合成し、その物性について評価を行った。



Scheme1. COOCH₃ 基置換体の合成スキーム



Scheme2. COOC₂H₅ 基置換体の合成スキーム



Scheme3. CN 基置換体の合成スキーム

【結果と考察】

Fig. 2 に各分子の HOMO および LUMO エネルギー準位図を示す。これらの分子の中では CN 置換体が最も高い電子受容性をもつことが分かる。

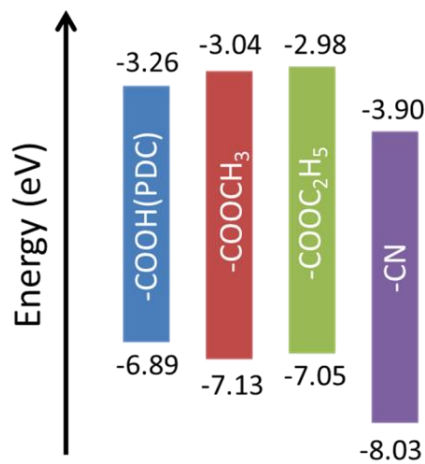


Fig. 2 PDC および同誘導体の HOMO および LUMO エネルギー準位図

実際に合成を行った PDC の各置換体について物性を評価した。本講演では、これらの詳細な実験結果についても報告する。

References

1. Y. Otsuka, M. Nakamura, S. Ohara, Y. Katayama, K. Shigehara, E. Masai, M. Fukuda, J. Environmental Biotechnology, Vol.6, No.2, 93-103, 2006.