

平成27年度 トピックス

分子・物質合成プラットフォームにおける利用成果

バナジウム含有ハロゲン化酵素の反応機構解明を目的とした
モデル錯体合成とその反応性^a愛知工業大学, ^b名古屋工業大学梶田裕二^{a, b}

【目的】

有機物をハロゲン化するバナジウム含有ハロゲン化酵素 (VHPO) は、 H_2O_2 、ハライド、および H^+ を用いて次亜ハロゲン酸を生成するが、その際、水素結合が重要な役割を果たしていると考えられている。そこで今回は、水素結合部位を持たせたニッケル錯体の合成を目的とした。

【成果】

既にバナジウムを中心金属とする錯体の合成に成功している、配位子PyiPr₄ (図1) とNiCl₂とを反応させ、ニッケル錯体を合成した。得られたニッケル錯体については、X線結晶構造解析に適した結晶を得ることができたため、単結晶X線結晶構造解析によってその構造を決定した。その結果、得られた錯体は、ニッケル(Ni)に配位子PyiPr₄が配位し、さらに2つのCl⁻とH₂Oが配位した六配位八面体構造をとっていた (図2)。

また、この錯体を単位格子としてみると、配位子PyiPr₄がもつ2つの水酸基とCl⁻との水素結合 (図3青色点線) によって、もう一つのNi錯体 (ユニット2) と結合し、三核錯体を形成していることが判った。従って、この錯体は、分子内に高度な水素結合ネットワークを有しており、水素結合がハライドの活性化に重要な影響を及ぼしていると考えられているVHPOのモデルとなり得ることが判った。

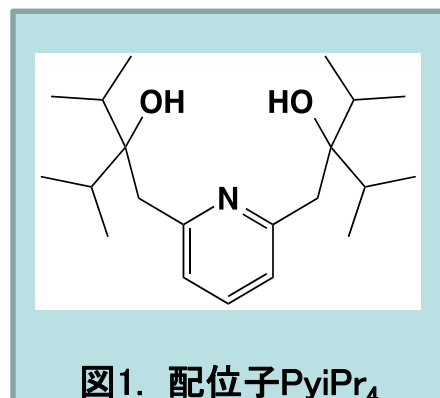
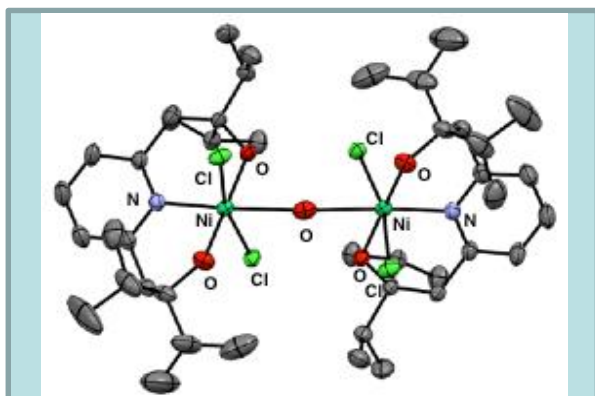
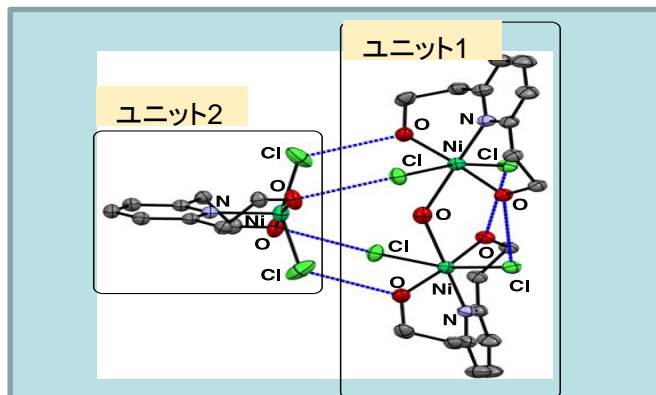
図1. 配位子PyiPr₄

図2. ユニット1の構造

図3. Ni錯体の単位格子あたりの構造
(末端のアルキル基は見易くするために省略)