

## 研究成果報告書

(国立情報学研究所民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB	メソイオン液体:蒸留可能なイオン液体の開発				
研究テーマ (欧文) AZ	Mesoionic liquid: A new family of 'distillable' ionic liquids				
研究氏 代 表 名 者	カカナ CC	姓)ヒラシタ	名)ツネヒサ	研究期間 B	2008 ~ 2010 年
	漢字 CB	平下	恒久	報告年度 Y	2010 年
	ローマ字 CZ	Hirashita	Tsunehisa	研究機関名	名古屋工業大学
研究代表者 CD 所属機関・職名	名古屋工業大学大学院工学研究科・助教				
概要 EA (600 字 ~ 800 字程度にまとめてください)	<p>メソイオン化合物とは、共有結合構造や単一の極性構造では満足に表現することができない複素 5 員環化合物であり、環内に 6<math>\pi</math> 電子を有する化合物である。一般にメソイオン化合物は常温常圧では固体として存在する。今回、室温で液体となるテトラゾリウム系新規メソイオンの合成に関して以下の結果を得た。</p> <p>1) メソイオン型イオン液体の合成 多様なアルキル置換基を有する 1, 3-ジアルキルテトラゾリウム-5-オレートにより簡便な合成方法を確立した。アルキルイソチオシアナートとアジ化ナトリウムによる環化反応、続くアルキル化反応と加水分解によって、1 位と 3 位に種々のアルキル基を有するテトラゾリウム系新規メソイオンの合成を行った。アルキル基の炭素数とテトラゾリウム系メソイオンの融点の関係についての知見を得た。また、環外のアニオン性の酸素原子を塩素原子によって置換したクロロテトラゾリウムの合成に成功し、求核剤との反応によって環外原子が窒素原子であるアミドや、硫黄原子であるチオレートも合成した。</p> <p>2) メソイオン型イオン液体の物性評価 1, 3-ジアルキルテトラゾリウム-5-オレートについて各種溶媒との極性評価を行った。このメソイオン液体はエーテルよりも水、水よりも塩化メチレンへと分配される性質を有していることがわかった。溶媒としての極性を誘電率とソルバトクロミズム色素を用いた測定によって評価したところ、既存のイオン液体と同等もしくはそれ以上の極性溶媒であることがわかった。また、汎用されるイオン液体と比較して本メソイオン液体の室温付近の粘度はきわめて低いことを明らかにした。</p> <p>3) メソイオン型イオン液体を用いた有機合成反応 テトラゾリウムメソイオン中で溝呂木-ヘック反応や鈴木カップリングを行い、分液操作によって有機層から収率よくカップリング生成物が得られた。また水槽からは使用したメソイオン液体が回収でき、蒸留によって精製、再利用が可能であることも明らかとした。</p>				
キーワード FA	メソイオン	複素環	イオン液体	反応場	

(以下は記入しないでください)

助成財団コード TA						研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC						シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入して下さい）									
雑誌	論文標題 GB								
	著者名GA		雑誌名GC						
	ページGF	~	発行年GE					巻号 GD	
雑誌	論文標題 GB								
	著者名GA		雑誌名GC						
	ページGF	~	発行年GE					巻号 GD	
雑誌	論文標題 GB								
	著者名GA		雑誌名GC						
	ページGF	~	発行年GE					巻号 GD	
図書	著者名HA								
	書名HC								
	出版者HB		発行年HD					総ページ HE	
図書	著者名HA								
	書名HC								
	出版者HB		発行年HD					総ページ HE	

欧文概要 EZ

A series of 1,3-dialkyltetrazolium-5-olates was prepared from alkyl isothiocyanates and sodium azide, followed by alkylation with dialkyl sulfates and hydrolysis. Some of them are liquid with low viscosity at room temperature and can be purified by distillation under reduced pressure. 1,3-Dialkyltetrazolium-5-olates were converted to the corresponding 5-chloro-1,3-dialkyltetrazolium salts, which were then treated with nucleophiles, such as sodium hydrosulfide and amines, to give the corresponding thiolates and amides. Observation of solvatochromism and the measurement of the dielectric permittivity of 1-butyl-3-methyltetrazolium-5-olate showed a high level of polarity similar to conventional aprotic organic solvents and ionic liquids. This mesoionic liquid serves as a polar solvent for the Mizoroki-Heck reaction and the Miyaura-Suzuki coupling and can be easily recovered and recycled.