

2015年4月17日

報道関係者各位

有機化学反応における重要未解決問題である反応面立体選択性の本質的原理の解明に成功

分子機能研究所 (Institute of Molecular Function、<http://www.molfuction.com/jp/>)

分子機能研究所 (Institute of Molecular Function ; 埼玉県三郷市) 代表、辻一徳 (ツジ モトノリ) が有機化学反応における重要未解決問題である反応面立体選択性の本質的原理の解明に成功し、その成果が2015年3月31日、Asian Journal of Organic Chemistry 誌に受理された。

#### 【背景と成果】

有機化学反応において、試薬との反応が反応点に対してどの方向から優先的に起こるか、という問題は立体選択性問題として知られており、反応点の周囲の立体的条件が等価なケースでも一般に立体選択性が生じる。これまでに反応面立体選択性に関する多くの理論や仮説が提唱されているが、例外的な選択性を示す反応が多く、いずれの理論も単独では説明が不可能であり、反応面立体選択性問題は有機化学の歴史上でも最大級の未解決問題であった。

今回、辻一徳 (東京大学薬学博士、分子機能研究所代表) は包括的なモデル実験と最先端の計算化学・理論有機化学を駆使し、過去に報告されてきたいずれの実験結果とも矛盾しない理論を提唱し、反応面立体選択性問題の本質的原理の解明に成功した。

辻モデルは、1981年にノーベル化学賞を受賞した福井謙一博士のフロンティア軌道理論を拡張する発見として注目に値する。

§速度論支配の有機化学反応

#### 【今後の期待】

本理論によって、有機合成化学を駆使する医薬や農薬といった立体選択性を試行錯誤して開発される薬の構造が設計の段階で予測可能となり、基礎有機化学の発展のみならず産業界に対しても大きく寄与するものと期待される。

#### 【成果の応用】

辻一徳は独自に製品化した創薬支援システム「Homology Modeling Professional for HyperChem」を2005年に国内外に先駆けて発表し、基礎研究分野のみならず社会・産業界にも貢献している。

今回の成果によって、「Homology Modeling Professional for HyperChem」が搭載する「Gaussian Interface for HyperChem」や「ONIOM Interface for Receptor」による革新的薬物設計技術がより一層世界の研究者に普及するものと期待される。

#### 【本件に関するお問い合わせ】

分子機能研究所 (Institute of Molecular Function)

〒341-0037

埼玉県三郷市高州 2-105-14

TEL : 048-956-6985 FAX : 048-956-6985

E-Mail : [support@molfuction.com](mailto:support@molfuction.com)

【関連リンク】

分子機能研究所：

<http://www.molfunction.com/jp/>

[http://www.molfunction.com/tsuji\\_jp/](http://www.molfunction.com/tsuji_jp/)

Wiley Online Library：

[http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)2193-5815](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)2193-5815)