非対称キレート環を有する N2S3型 NHase モデル錯体の開発

(甲南大 FIRST) ○河野 涼真・藤井 敏司 Development of N₂S₃-Type NHase Model Complex with Asymmetric Chelate Rings (FIRST, Konan University) ○Ryoma Kawano, Satoshi Fujii,

Nitrile hydratase (NHase) is a metalloenzyme capable of converting organic nitriles to organic amides with high yield by hydrolysis reaction. Nonetheless, NHase is susceptible to inactivation under varying reaction conditions and exhibits substrate specificity, thereby restricting the applicability of nitrile substrates. Although many researchers have developed model complexes that mimic NHase, no model complexes have been reported to exhibit catalytic activity to date.

In this study, we synthesized several asymmetric ligands that mimic the coordination environment of NHase to overcome the above problems and developed Co(III)-NHase model complexes by using these ligands. we developed a novel synthetic method and succeeded in developing an N₂S₃-type ligand with an asymmetric chelate ring, which had not been developed before. In the future, we plan to synthesize model complexes by introducing metals to all N₂S₃-type ligands to study their catalytic activity and to obtain structural knowledge of NHase. Keywords: Coordination Chemistry; Enzyme Model Complexes; Artificial Catalysts

ニトリルヒドラターゼ (以下 NHase) は加水分解反応によって有機ニトリル (-RCN) を有機アミド (-RCONH $_2$) へと高収率で変換する金属酵素である。しかし、NHase は触媒として利用する際、反応条件による失活、基質特異性の影響があり、基質となる有機ニトリルが限られるなどの課題がある。以前より NHase を模倣したモデル錯体の開発が行われているが、現在に至るまでに優れた触媒活性を示したモデル錯体の開発は報告されていない。

上記の課題を克服するために NHase の活性中心と同様左右非対称なキレート環を形成する N_2S_3 型配位子を複数合成し、それらの配位子を用いて Co(III)-NHase モデル錯体の開発を行うことにした。本研究では新規合成方法を開発し、これまで開発されていなかった左右非対称キレート環を有する N_2S_2 型配位子の開発に成功した。今後、全ての N_2S_2 型配位子に金属を導入することでモデル錯体を合成し、触媒活性に関する研究及び NHase の構造的知見を獲得していく。