

領域略称名：有機分子触媒
領域番号：2304

平成28年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る事後評価報告書

「有機分子触媒による未来型分子変換」

(領域設定期間)

平成23年度～平成27年度

平成28年6月

領域代表者 (東北大学・大学院理学研究科・教授・寺田 眞浩)

目 次



1. 研究領域の目的及び概要	11
2. 研究領域の設定目的の達成度	13
3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	17
4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況	18
5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	20
6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	29
7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況	37
8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	39
9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	43
10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	44
11. 総括班評価者による評価	46

研究組織 (総括：総括班, 計画：総括班以外の計画研究, 公募：公募研究)

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00 総括	23105001 有機分子触媒による未来型分子変換	平成23年度～ 平成27年度	寺田 眞浩	東北大学・大学院理学研究科・教授	10
A01 計画	23105002 水素結合のネットワーク形成に基づく有機分子触媒の制御システム設計開発	平成23年度～ 平成27年度	寺田 眞浩	東北大学・大学院理学研究科・教授	1
A01 計画	23105003 キラルブレステッド酸触媒の理論的制御システム設計	平成23年度～ 平成27年度	秋山 隆彦	学習院大学・理学部・教授	1
A01 計画	23105004 多機能型キラルオニウム塩の設計に基づく高選択的分子変換法の開拓	平成23年度～ 平成27年度	浦口 大輔	名古屋大学・大学院工学研究科・准教授	1
A01 計画	23105005 キラルブレステッド酸触媒による制御システムの理論的研究	平成23年度～ 平成27年度	山中 正浩	立教大学・理学部・教授	2
A02 計画	23105006 レアメタルを用いないカップリング反応による精密合成設計	平成23年度～ 平成27年度	北 泰行	立命館大学・総合科学技術研究機構・招聘研究教授	2
A02 計画	23105007 分子間相互作用ネットワークを駆使した革新的有機分子触媒による新反応開発	平成23年度～ 平成27年度	竹本 佳司	京都大学・大学院薬学研究科・教授	3
A02 計画	23105008 基質認識型有機触媒による位置選択的分子変換	平成23年度～ 平成27年度	川端 猛夫	京都大学・化学研究所・教授	1
A02 計画	23105009 有機触媒芳香族脱プロトン化による分子変換システム開発	平成23年度～ 平成27年度	根東 義則	東北大学・大学院薬学研究科・教授	1
A03 計画	23105010 有機触媒を用いた有用物質の独創的合成	平成23年度～ 平成27年度	林 雄二郎	東北大学・大学院理学研究科・教授	1
A03 計画	23105011 有機分子触媒による高機能キラル合成素子の環境調和合成	平成23年度～ 平成27年度	岩渕 好治	東北大学・大学院薬学研究科・教授	1

A03 計画	23105012 有機触媒を用いた創薬 を指向した生理活性天然物の実践的合成	平成23年度～ 平成27年度	砂塚 敏明	北里大学・北里生命科学研究所・教授	2
A03 計画	23105013 グアニジン／ビスウレ ア型有機触媒を用いる テトラロン類の速度論 的光学分割反応の開発 と(+)-Linnoxepinの合成	平成23年度～ 平成27年度	長澤 和夫	東京農工大学・大学院工学研究院・教授	1
計画研究 計 13 件					
A01 公募	26105724 らせん構造制御を基盤 とする超分子・高分子有 機触媒の開発	平成26年度～ 平成27年度	飯田 拡基	島根大学 大学院総合理工学研究 科・准教授	1
A01 公募	24105517 有機分子触媒による酸 素酸化分子変換システ ムの開発	平成24年度～ 平成25年度	今田 泰嗣	徳島大学・大学院理工学研究部・教 授	1
A01 公募	26105742 有機分子触媒による酸 素酸化分子変換システ ムの開発	平成26年度～ 平成27年度	今田 泰嗣	徳島大学・大学院理工学研究部・教 授	1
A01 公募	24105531 新規芳香族ケトン触媒 の開発による不斉ラジ カル反応の開拓	平成24年度～ 平成25年度	植田 光洋	大阪府立大学・大学院理学系研究 科・助教	1
A01 公募	26105752 光学活性有機ボレート アニオンを対アニオン として用いる新規イオ ン対型分子触媒の開発	平成26年度～ 平成27年度	植田 光洋	大阪府立大学・大学院理学系研究 科・助教	1
A01 公募	24105502 新規不斉場を有する不 斉有機分子触媒ライブ ラリーの構築	平成24年度～ 平成25年度	小笠原 正道	北海道大学・触媒研・准教授	1
A01 公募	26105702 新規不斉場を有する不 斉有機分子触媒ライブ ラリーの構築	平成26年度～ 平成27年度	小笠原 正道	北海道大学・触媒研・准教授	1
A01 公募	24105515 精密デザイン型酸塩基 触媒の開発	平成24年度～ 平成25年度	加納 太一	京都大学・大学院理学研究科・講師	1
A01 公募	26105730 アミン触媒と有機酸触 媒共存系の構築	平成26年度～ 平成27年度	加納 太一	京都大学・大学院理学研究科・准教 授	1
A01 公募	26105712 化学選択的有機光反応 のための有機-無機ハイ ブリッド触媒系の構築	平成26年度～ 平成27年度	草間 博之	学習院大学・理学部・教授	1

A01 公募	26105713 新しい電子移動パラダイムに基づく有機光レドックス触媒の開発	平成26年度～ 平成27年度	小西 玄一	東京工業大学・理工学研究科・准教授	1
A01 公募	24105521 FLPによる水素分子活性化を利用した高性能不斉水素化触媒の開発	平成24年度～ 平成25年度	是永 敏伸	岩手大学・理工学部・准教授	1
A01 公募	26105704 メタルフリーな高選択的水素化反応を実現する新規不斉FLP 触媒の開発	平成26年度～ 平成27年度	是永 敏伸	岩手大学・理工学部・准教授	1
A01 公募	26105739 分子内 n-カチオン相互作用を利用した有機分子ルイス酸触媒の精密設計	平成26年度～ 平成27年度	坂倉 彰	岡山大学・自然科学研究科・教授	1
A01 公募	24105534 有機分子触媒の活性中心におけるルイス酸性・ルイス塩基性の理論的検討	平成24年度～ 平成25年度	坂田 健	星薬科大学・薬学部・准教授	1
A01 公募	26105756 有機分子触媒反応における立体選択性と化学反応性に関する理論的検討	平成26年度～ 平成27年度	坂田 健	星薬科大学・薬学部・准教授	1
A01 公募	26105728 剛直な不斉環境場を構築する新規環状キラルアミン触媒の開発	平成26年度～ 平成27年度	柴富 一孝	豊橋技科大・大学院工学研究科・准教授	3
A01 公募	26105731 キラル有機触媒による中性無機塩の活性化を基盤とした新規不斉反応システムの構築	平成26年度～ 平成27年度	白川 誠司	長崎大学・大学院水産環境科学総合研究科・准教授	1
A01 公募	24105535 エナミン機構に基づく有機分子触媒反応：高性能触媒の開発	平成24年度～ 平成25年度	田中 富士枝	沖縄科学技術大学院大学・准教授	1
A01 公募	26105757 高性能アミン触媒システムの開発	平成26年度～ 平成27年度	田中 富士枝	沖縄科学技術大学院大学・准教授	1
A01 公募	26105727 配位性官能基導入による高機能性不斉有機分子触媒の創製研究	平成26年度～ 平成27年度	中村 修一	名古屋工業大学・大学院工学研究科・准教授	1
A01 公募	24105507 複合型高活性アゾリウム塩の創製と不斉合成への応用	平成24年度～ 平成25年度	鳴海 哲夫	静岡大学・大学院工学系列・准教授	1

A01 公募	26105721 多機能性アゾリウム塩 の創製と実践的不斉合 成への応用	平成26年度～ 平成27年度	鳴海 哲夫	静岡大学・大学院工学系列・准教授	1
A01 公募	24105512 キラルピナフチルジス ルホン酸を用いる高活 性キラル有機分子触媒 の開発	平成24年度～ 平成25年度	波多野 学	名古屋大学・大学院工学研究科・准 教授	1
A01 公募	26105723 キラル3,3'-二置換ピナ フチルジスルホン酸を 用いる高活性有機分子 触媒の精密設計	平成26年度～ 平成27年度	波多野 学	名古屋大学・大学院工学研究科・准 教授	1
A01 公募	24105520 光エネルギーを用いる 有機分子触媒的アルコ ール還元反応への挑戦	平成24年度～ 平成25年度	松原 亮介	神戸大学・大学院理学研究科・准教 授	2
A01 公募	26105738 有機分子触媒を用いる 炭素ラジカル発生法の 開発	平成26年度～ 平成27年度	松原 亮介	神戸大学・大学院理学研究科・准教 授	3
A01 公募	24105532 キラルグアニジン触媒 の開発及び β -ケトエス テル類の共役付加反応 への応用	平成24年度～ 平成25年度	御前 智則	兵庫県立大学・大学院物質理学研究 科・助教	2
A01 公募	26105753 キラル二官能性有機分 子触媒によるカルボン 酸誘導体 α 位での C-C 結合形成反応の開発	平成26年度～ 平成27年度	御前 智則	兵庫県立大学・大学院物質理学研究 科・助教	2
A01 公募	24105516 トリスイミダゾリンと カルボン酸の相互作用 を利用する有機触媒の 開発	平成24年度～ 平成25年度	村井 健一	大阪大学・大学院薬学研究科・助 教	1
A01 公募	26105734 トリスイミダゾリンの 分子認識能を利用する 不斉触媒システムの開 発	平成26年度～ 平成27年度	村井 健一	大阪大学・大学院薬学研究科・助 教	1
A01 公募	26105733 反応経路自動探索法に よる有機分子触媒反応 機構の解明と設計	平成26年度～ 平成27年度	諸熊 奎治	京都大学・福井謙一記念研究セン ター・シニアリサーチフェロー	1
A01 公募	24105533 有機分子触媒の設計を 先導する新しい酸性官 能基の開発	平成24年度～ 平成25年度	矢内 光	東京薬科大学・薬学部・助教	1
A01 公募	26105755 強酸性炭素酸を鍵構造 とする新しい有機分子	平成26年度～ 平成27年度	矢内 光	東京薬科大学・薬学部・講師	1

	触媒の設計と利用				
A01 公募	26105732 有機分子触媒による分子認識の基盤開拓と反応開発	平成26年度～平成27年度	山田 健一	京都大学・大学院薬学研究科・准教授	1
A01 公募	24105508 カチオン- π 相互作用に基づく分子認識型光増感触媒の開発	平成24年度～平成25年度	山田 眞二	お茶の水女子大学・理学部・教授	1
A01 公募	26105716 カチオン- π 相互作用に基づくテンプレート型光増感触媒の開発	平成26年度～平成27年度	山田 眞二	お茶の水女子大学・理学部・教授	1
A01 公募	24105501 第一級 β -アミノ酸を活性中心とした実用的な不斉有機分子触媒の創製	平成24年度～平成25年度	吉田 雅紀	北海道大学・大学院工学研究院・助教	1
A01 公募	26105701 ポリエーテル鎖によるカチオンの取り込みを鍵とする不斉有機分子触媒の創製	平成26年度～平成27年度	吉田 雅紀	旭川工業高等専門学校・一般理数科・准教授	1
A02 公募	24105519 π 共役系分子を活用する有機レドックス触媒システム	平成24年度～平成25年度	雨夜 徹	大阪大学・大学院工学研究科・助教	1
A02 公募	26105736 π 共役系分子のレドックス機能を活用する有機触媒システムの構築	平成26年度～平成27年度	雨夜 徹	大阪大学・大学院工学研究科・助教	1
A02 公募	26105706 プロトンと非金属性元素による協働作用有機触媒の開発 媒活性部位近傍に水素結合能を有する不斉ヨウ素触媒の開発	平成26年度～平成27年度	荒井 孝義	千葉大学・大学院理学研究科・教授	1
A02 公募	26105749 ビニリデンオルトキノンメチッドの生成を鍵とする芳香族エンイン系の触媒的ドミノ環化反応	平成26年度～平成27年度	入江 亮	熊本大学・大学院自然科学研究科・教授	3
A02 公募	26105746 有機分子触媒を用いるアルカンの高効率酸化	平成26年度～平成27年度	尾野村 治	長崎大学・大学院医歯薬学総合研究科・教授	1
A02 公募	24105504 医薬リード多官能基性分子の位置選択的触媒修飾法	平成24年度～平成25年度	金井 求	東京大学・大学院薬学系研究科・教授	2

A02 公募	26105709 多官能基性分子のカルボ ン酸選択的有機触媒 反応	平成26年度～ 平成27年度	金井 求	東京大学・大学院薬学系研究科・教 授	2
A02 公募	26105741 光励起ケトンを活性化 剤とする分子骨格への 直接的官能基導入法の 拡張と深化	平成26年度～ 平成27年度	上條 真	山口大学・大学院創成科学研究科・ 准教授	1
A02 公募	24105506 ペプチド触媒を用いる 位置選択的反応の開発	平成24年度～ 平成25年度	工藤 一秋	東京大学・生産技術研究所・教授	1
A02 公募	26105710 要素抽出と再構築によ るペプチドミメティック 触媒の開発	平成26年度～ 平成27年度	工藤 一秋	東京大学・生産技術研究所・教授	1
A02 公募	24105513 π 空間を利用する有機分 子フラスコ触媒の創成 とトリフルオロメチル 化反応の開発	平成24年度～ 平成25年度	柴田 哲男	名古屋工業大学・大学院工学研究 科・教授	1
A02 公募	24105522 レドックス応答型有機 分子触媒の活性制御を 利用した反応スイッチ ング	平成24年度～ 平成25年度	菅 誠治	岡山大学・大学院自然科学研究科・ 教授	1
A02 公募	26105740 電気化学反応が駆動す る有機分子触媒反応の 開発	平成26年度～ 平成27年度	菅 誠治	岡山大学・大学院自然科学研究科・ 教授	1
A02 公募	24105518 二重活性化型有機分子 触媒を用いるキラル多 官能性化合物の合成と 応用	平成24年度～ 平成25年度	滝澤 忍	大阪大学・産業科学研究所・准教授	1
A02 公募	26105737 多機能有機分子触媒の 開発と不斉ドミノ反応 への応用	平成26年度～ 平成27年度	滝澤 忍	大阪大学・産業科学研究所・准教授	1
A02 公募	24105525 フォールドマーを用い た不斉有機分子触媒の 創製	平成24年度～ 平成25年度	田中 正一	長崎大学・大学院医歯薬学総合研究 科・教授	1
A02 公募	26105745 フォールドマーによる 不斉有機分子触媒の創 製	平成26年度～ 平成27年度	田中 正一	長崎大学・大学院医歯薬学総合研究 科・教授	1
A02 公募	24105524 四級アンモニウム塩に よるキラルなヒドロキ シドイオンを用いた触 媒反応	平成24年度～ 平成25年度	徳永 信	九州大学・大学院理学研究院・教授	1

A02 公募	26105744 有機触媒によるエステル不斉加水分解および固体触媒との協同触媒の開発	平成26年度～ 平成27年度	徳永 信	九州大学・大学院理学研究院・教授	1
A02 公募	24105527 オキシド化合物を不斉有機分子触媒とする立体選択的炭素炭素結合形成反応の開発	平成24年度～ 平成25年度	中島 誠	熊本大学・大学院生命科学研究部・教授	1
A02 公募	26105748 有機オキシド化合物を触媒とした立体選択的連続反応の開発	平成26年度～ 平成27年度	中島 誠	熊本大学・大学院生命科学研究部・教授	1
A02 公募	26105708 有機触媒及び遷移金属触媒を協奏的に利用した不斉プロパルギル位置換反応の開発	平成26年度～ 平成27年度	西林 仁昭	東京大学・大学院工学系研究科・教授	2
A02 公募	26105705 有機分子触媒によるジフルオロカルベンの発生制御と合成化学的利用	平成26年度～ 平成27年度	淵辺 耕平	筑波大学・大学院数理物質科学研究科・准教授	1
A02 公募	26105719 ルイス塩基触媒と分子内ケイ素移動とを融合させた新規有機触媒反応システムの開発	平成26年度～ 平成27年度	松谷 裕二	富山大学・大学院医学薬学研究部・教授	2
A02 公募	26105735 単体ヨウ素による超原子価ヨウ素試剤の活性化を鍵とする新奇触媒システムの開発	平成26年度～ 平成27年度	南方 聖司	大阪大学・大学院工学研究科・教授	1
A02 公募	24105505 有機触媒および遷移金属触媒を協奏的に利用した高エナンチオ選択的分子変換反応の開発	平成24年度～ 平成25年度	三宅 由寛	東京大学・工学系研・助教	1
A02 公募	26105725 有機触媒および光電子移動触媒を協奏的に利用したエナンチオ選択的分子変換反応の開発	平成26年度～ 平成27年度	三宅 由寛	名古屋大学・大学院工学研究科・准教授	1
A02 公募	24105509 次世代型多機能ハイブリッド有機触媒の創製と反応	平成24年度～ 平成25年度	矢倉 隆之	富山大学・大学院医学薬学研究部・教授	1
A02 公募	26105717 不斉有機触媒を用いたラジカル付加反応の開発	平成26年度～ 平成27年度	矢島 知子	お茶の水女子大学・人間文化創成科学研究科・准教授	1

A02 公募	26105711 Novel Chiral Bifunctional Heterogeneous Catalysts for Asymmetric Tandem Reactions	平成26年度～平成27年度	Woo-Jin Yoo	東京大学・大学院理学系研究科・特任助教	1
A03 公募	24105528 不斉有機触媒反応を鍵工程とした生物活性アルカロイドの効率的全合成研究	平成24年度～平成25年度	石川 勇人	熊本大学・大学院自然科学研究科・准教授	1
A03 公募	26105750 不斉有機触媒反応を鍵工程とした生物活性アルカロイドの効率的全合成研究	平成26年度～平成27年度	石川 勇人	熊本大学・大学院自然科学研究科・准教授	1
A03 公募	24105510 リン原子修飾オリゴ核酸の触媒的不斉合成法の開発	平成24年度～平成25年度	岡 夏央	岐阜大学・工学部・准教授	1
A03 公募	26105720 キラルブレんステッド酸触媒を用いる不斉ホスホロアミダイト法の開発	平成26年度～平成27年度	岡 夏央	岐阜大学・工学部・准教授	1
A03 公募	24105523 有機不斉触媒反応を活用した第四級不斉炭素含有アルカロイド類の合成	平成24年度～平成25年度	小槻 日吉三	高知大学・総合研究センター・特任教授	1
A03 公募	26105743 有機不斉触媒反応を活用した第四級不斉炭素中心含有生物活性天然物の合成	平成26年度～平成27年度	小槻 日吉三	高知大学・総合研究センター・特任教授	1
A03 公募	24105503 有機分子触媒を活用した環境低負荷な機能性高分子材料の開発	平成24年度～平成25年度	佐藤 敏文	北海道大学・大学院工学研究院・教授	1
A03 公募	26105703 有機分子触媒を活用した環境低負荷な機能性高分子材料の開発	平成26年度～平成27年度	佐藤 敏文	北海道大学・大学院工学研究院・教授	1
A03 公募	26105726 新規有機ニトロキシラジカル型酸化触媒の開発と神経栄養因子様活性天然物の合成	平成26年度～平成27年度	澁谷 正俊	名古屋大学・大学院創薬科学研究科・講師	2
A03 公募	24105529 新薬創出に向けた有機分子触媒を用いる生物活性化合物の合成	平成24年度～平成25年度	鈴木 由美子	上智大学・理工学部・准教授	1

A03 公募	26105754 有機分子触媒を用いた創薬への合成的アプローチ	平成26年度～ 平成27年度	鈴木 由美子	上智大学・理工学部・准教授	1
A03 公募	26105715 極性転換を鍵とする連続環化反応の開発とアンギュサイクリノン類合成への展開	平成26年度～ 平成27年度	瀧川 紘	東京工業大学・大学院理工学研究科・助教	1
A03 公募	26105707 キラルアミン触媒を用いる不斉アジリジン化を基盤とした生物活性化化合物合成	平成26年度～ 平成27年度	根元 哲宏	千葉大学・大学院薬学研究院・教授	4
A03 公募	24105526 新規不斉有機触媒の創製と創薬を指向したHDAC阻害活性天然物の実践的合成	平成24年度～ 平成25年度	畑山 範	長崎大学・大学院医歯薬学総合研究科・教授	1
A03 公募	26105747 新規シニコナルカロイド不斉触媒の創製と創薬リード天然物の実践的合成	平成26年度～ 平成27年度	畑山 範	長崎大学・大学院医歯薬学総合研究科・教授	1
A03 公募	24105530 不斉ハロラクトン化反応と生物活性天然物の効率的合成	平成24年度～ 平成25年度	濱島 義隆	静岡県立大学・大学院薬学研究院・教授	1
A03 公募	26105751 不斉ハロ環化反応による高機能性キラル合成素子の開発	平成26年度～ 平成27年度	濱島 義隆	静岡県立大学・大学院薬学研究院・教授	1
A03 公募	24105514 高分子微粒子固定化有機分子触媒によるワンポット合成法の開発	平成24年度～ 平成25年度	原口 直樹	豊橋技術科学大学・大学院工学研究科・助教	1
A03 公募	26105729 高分子固定化型キラル有機分子触媒によるワンポット合成法の開発	平成26年度～ 平成27年度	原口 直樹	豊橋技術科学大学・大学院工学研究科・准教授	1
A03 公募	24105511 「モノづくり」の実用化を指向した超臨界二酸化炭素中有機分子触媒的ポリ乳酸合成	平成24年度～ 平成25年度	間瀬 暢之	静岡大学・大学院総合科学技術研究科・教授	1
A03 公募	26105722 「モノづくり」の実用化を指向した多機能性有機触媒による超臨界流体中ポリ乳酸合成	平成26年度～ 平成27年度	間瀬 暢之	静岡大学・大学院総合科学技術研究科・教授	1
公募研究 計 90 件					

1. 研究領域の目的及び概要（2 ページ以内）

研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

【研究の学術的背景】

有機合成化学は、医薬品、農薬からファインケミカル、さらに機能性材料等の様々な有用物質の合成法を提供することにより、医学、薬学、農学、材料科学などの分野に大きく貢献し、高度文明社会を支えてきた。2010 年ノーベル化学賞を受賞された日本人研究者 鈴木章 北海道大学名誉教授、根岸英一 パデュエー大学教授に象徴されるように、高度な「モノづくり」の原点を支える基礎的かつ重要な研究分野である有機合成化学は、日本の「お家芸」とまで言われるようになってきた。しかし、天然資源の乏しい我が国の将来にとって、現段階の学術・技術水準に甘んじることなく、今世紀の最大命題である「希少・枯渇資源の有効利用と再生可能資源の活用促進を原則とした元素戦略」、「持続可能な循環型社会の確立」に即した最先端の「モノづくり」（高付加価値の新機能性材料や医薬品の創製）の科学と技術を確立し、科学技術創造立国として、21 世紀も世界的優位性を保つことが肝要である。近年、産業界においても法規制や社会的要請に対応するため、環境に配慮した製造技術や生産システムの構築に多額の資金が投じられるようになり、希少資源の回収・再利用化や枯渇資源の使用回避を指向した「モノづくり」の新手法を開発できる「有機合成化学」に対する期待は今まで以上に大きくなってきている。

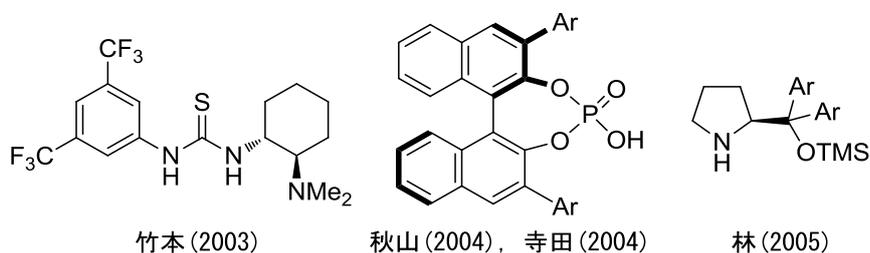
【有機分子触媒とは何か、新学術領域としての意義と目的】

1970 年代から現在に至るまで、2010 年ノーベル化学賞の受賞対象となった鈴木-宮浦カップリングや根岸カップリングを代表とする金属錯体触媒を用いた有機合成反応が活発に研究されてきた。一方、2000 年ごろから、光学活性な有機小分子が優れた不斉触媒能を有することが再認識され、Organocatalyst（有機分子触媒）として一躍脚光を浴びるようになってきた。有機分子触媒は金属元素を含まないことから、金属触媒の大きな問題点である、①生成物への金属の残留、②触媒の取り扱いに特殊な技術や設備が必要、③希少金属の局在化による価格の高騰、などの諸問題に 대응する次世代のクリーンな反応触媒として、学界および産業界から大きな期待が寄せられている。

有機分子触媒は極めて新しい研究分野であり、2000 年を前後して世界各国の多くの研究者が参入し、急速な発展を遂げている（図 1：2015 年、2016 年は集計未完了）。この分野において日本人研究者の貢献度は極めて高く、例えば、竹本は 2003 年にチオ尿素誘導体を、秋山、寺田は 2004 年に独自にキラルリン酸を、また林は 2005 年にプロリノール誘導体を報告した（図 2）。これらの有機分子触媒を報じた初報の論文は 700 回以上の引用回数を誇っており、世界の注目の的となっている。同時に日本人研究者がこの分野のパイオニアとして大きく貢献していることを顕著に示している。これら有機分子触媒は学術的な研究



図 2. 日本人研究者が開発した有機分子触媒の代表例



のみならず、産業界での実用化が望まれており、まさに金属触媒から有機分子触媒へのパラダイムシフトが進行しつつあると言っても過言ではない。しかし、「有機分子触媒」は研究の歴史が未だ浅く揺籃期にあり、触媒活性、反応の多様性等、実践的な合成プロセスとするには解決すべき多くの諸問題を抱えている。本領域研究では、研究グループ間の共同研究を促進することで「有機分子触媒」をキーワードとする有益な知的基盤を共有・統合化し、学問領域として確固たる地位を確立するとともに、革新的な科学技術の開拓に基づいた「モノづくり」の新たな未来像を創出することを目的とした。

【本研究領域の対象と取り組み】

研究の対象：「多様な研究者による斬新な視点や手法を取り入れた共同研究等の推進により、当該研究領域の新たな発展を目指すもの」である。

【学術水準の向上・強化につながる点】

「モノづくり」の新たな未来像の創出を目指す本領域研究では、近年急速に進展しつつある「有機分子触媒」に焦点を絞り、1) 有機分子触媒の制御システム設計開発 (A01)、2) 有機分子触媒による分子変換システム開発 (A02)、3) 有機分子触媒による実践的有用物質合成 (A03) の3つの研究項目を設定し、理論化学者との連携のもと、有機合成化学者を主体とする研究チームを組織し総力を挙げた開発研究を行う。①理論化学者による触媒現象の解明を進めることで、有機合成化学者によるこれまでの試行錯誤的な触媒開発から脱却し、「高い触媒活性」、「取り扱いの容易さ」、「立体化学制御能」など優れた特性を備えた有機分子触媒の合理的な設計開発を実現する。②触媒現象の解明を発展させることで、基質/触媒間の相互作用と活性化の本質に理解を深め、金属触媒では成しえない分子変換システムの開拓、あるいは新手法に基づく分子変換反応の開発へと結び付ける。③これら有機分子触媒と触媒反応系を駆使することで、有用物質の実践的な合成プロセスとして真に優れた分子変換を実現する。これら3つの開発研究を有機的・発展的に結びつけたスパイラルアップによって、有用物質合成(医薬品、農薬、機能性材料など)におけるトータル効率(低環境負荷、省エネルギー、収率、選択性、工程数など)に優れた方法論の開発が期待される。これにより有機合成化学の学術水準の飛躍的向上・強化に繋がるだけでなく、有機分子触媒の新たな骨格 (privileged structure) の創製による反応開発や有用物質合成など、「モノづくり」の科学の発展に大きく寄与することができる。このように、本領域研究の強力な推進は、この分野における基礎研究の学術水準を高めるだけでなく、地球の資源と環境に可能な限り配慮した持続可能な「モノづくり」の科学を飛躍的に発展させ、医薬品、農薬、機能性材料等の合成において我が国の国際的な優位性を強化することにつながる。

【有機分子触媒の開発研究に関する国内外の動向】

本領域研究の基軸となる「有機分子触媒」、さらに広義で言う「反応触媒」の開発研究は、有機合成化学の中心的な研究課題の一つであり、産業界への実用化にも近い段階、日本はもとより欧米、アジアを含む全世界の産と学の領域で幅広く活発に研究されている。その中で本領域の日本の研究水準はトップレベルにあるが、益々複雑・多様化する医薬品や機能性材料を地球環境のあらゆる点に配慮しながら大量に安全に効率よく生産するという社会のニーズに応えるには、革新的な触媒や反応の開発による持続可能な「モノづくり」の科学を飛躍的に発展させることが急務となっている。

ドイツでは、2005年より、'Organocatalyst'に着目した6年間の研究プロジェクトが発足した。これは、日本の特定領域に類似する総額16億円規模のプロジェクトであり、30余りの研究グループが一同に会して討議と共同研究を重ねることにより、極めて多くの成果を挙げつつあり、ドイツの有機分子触媒の研究は長足の進歩を遂げている。また、中国でも極めて数多くの研究者が有機分子触媒の研究分野に参入し、顕著な業績を上げつつある。このように世界規模の開発競争が繰り広げられる中、日本の優位性を継続的に維持するためには「有機分子触媒」をキーワードとする研究グループを組織し、総力を挙げた開発研究を推し進めることでその力量を飛躍的に向上させなければならない。本研究領域は、「触媒設計」「触媒反応系の開拓」「その活用による実践的有用物質合成」3つの研究項目を設定することで「有機分子触媒」の開発研究を強力に推進し、技術創造立国・日本の「モノづくり」に新たな未来像を創出することを目標とした。

2. 研究領域の設定目的の達成度（3ページ以内）

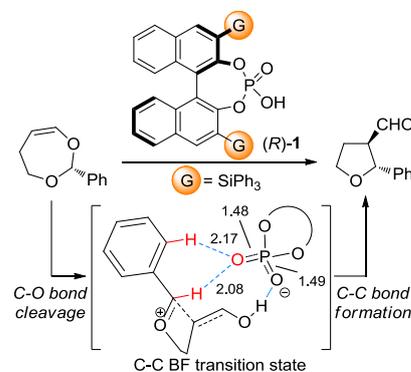
研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記述してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目ごとの状況も記述してください。

【A01 班：有機分子触媒の制御システム設計開発】

A01 班では、有機分子触媒の開発を精力的に展開している研究者3名と有機反応の理論化学計算を専門とする研究者1名が、班内外および領域内外との共同研究を積極的に行う事で、有機分子触媒の原理原則を理解するための詳細な反応機構の解明と有機分子触媒の改良と新たな有機分子触媒の開発を行う事により、未開拓な分子変換反応の開発へと展開する事を目指している。このような目標のもと、平成23年8月より研究を開始し、A01 班では下記の様な研究成果を期待通り着実に挙げている。A01 班の計画班員の中で、有機分子触媒（キラル酸触媒、キラルオニウム塩触媒）を進めている3名の研究者は、班内外の理論化学および合成化学の研究者と共同研究を強力に推進し、新たな有機分子触媒、触媒反応の開発を順調に進めた。また、理論化学の研究者は本新学術領域の理論化学の研究者の中心的役割を果たし、班内外の研究者との共同研究を精力的に推進しており、触媒開発、反応開発に大きな役割を果たした。

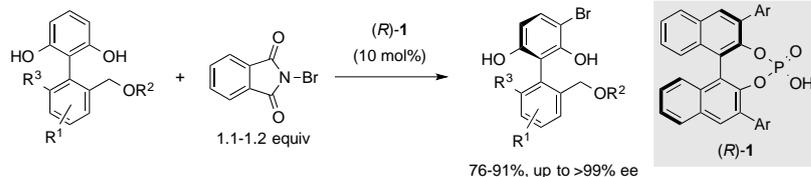
寺田 眞浩：水素結合のネットワーク形成に基づく有機分子触媒の制御システム設計開発（A01 班：山中 正浩 教授ならびに A01 班：都築 誠二 博士との共同研究）

キラルブレンステッド酸触媒の開発研究は急速に進展しているが、なかでもビナフトール由来のキラルリン酸 **1** は最も多用されている有機分子触媒の一つである。最近の計算化学による反応機構解析では、リン酸の酸性プロトン（P-OH 基）とホスホリル酸素（P=O）がそれぞれ求電子剤ならびにプロ求核剤（H-Nu）と X-H...A 型（X, A = ヘテロ元素）の水素結合を介して 2 点相互作用し触媒作用を示すことが明らかとなっている。これに対し正電荷を有する求電子剤と負電荷を帯びた **1** の共役塩基とのイオン対形成を経る反応系において高いエナンチオ選択性が報告されるようになってきた。求電子剤の配座制御に関わる X-H...A 型の水素結合が形成できないこの形式の反応における「相互作用」を明らかにするため、Petasis-Ferrier 型転位反応をモデルとして、得られた実験結果を量子化学計算によって解析した。その結果、**1** の共役塩基とオキシカルベニウムカチオンが非古典的水素結合である C-H...O を介して相互作用し、配座制御がなされていることを明らかにした（論文発表済）。



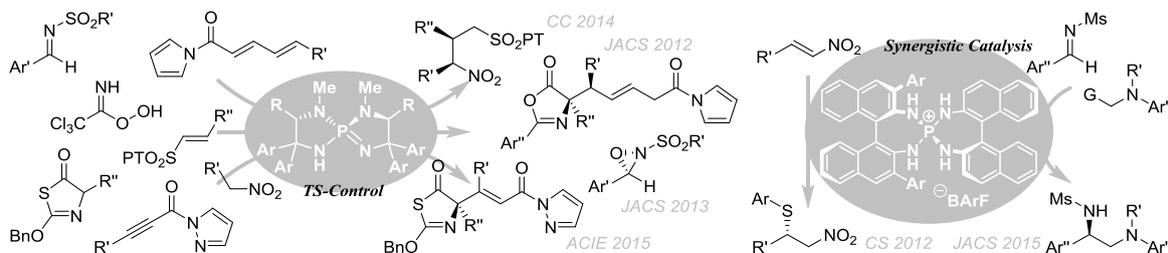
秋山 隆彦：キラルブレンステッド酸触媒の理論的制御システム設計（A01 班：山中 正浩 教授との共同研究）

鏡面对称を有するビアリアルに対して、リン酸存在下、臭素化剤（NBP）を作用させ、非対称化反応による臭素化反応を用いる事により、キラルビアリアルを良好な収率かつ高い光学純度で得ることができた（論文発表済）。本反応は、リン酸と基質、臭素化剤との錯体が水素結合ネットワークにより、安定化を受け手いる事が明らかになった。更に、¹H NMR を用いる事により、最適の触媒を選択するために有益な情報を得る事ができた。



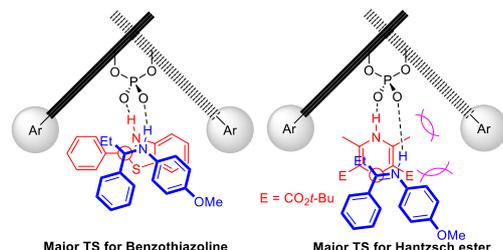
浦口 大輔：機能型キラルオニウム塩の設計に基づく高選択的分子変換法の開拓（A01 班：山中 正浩 教授、坂田 健 准教授との共同研究）

P-スプロ型アミノホスホニウム塩の触媒作用を利用して、様々な高度分子変換の実現につなげた。特に、多数の選択性の同時制御が必要な共役付加反応に取り組む中で、触媒分子が持つ HN-P⁺-NH 構造が反応の遷移状態制御に極めて有効であるという知見を得たことは、研究目的であるイオン対を触媒とする化学に共通する学理の構築に寄与するものと考えている。この機構を理解するために領域内共同研究により計算科学から得られた情報が重要であった事実は、本新学術領域研究に参画して研究を推進した価値と位置付けられる。



山中 正浩：キラルプレンステッド酸触媒による制御システムの理論的検討 (A01 班：秋山 隆彦 教授との共同研究)

有機分子触媒の合理的な制御システム設計の確立に向けて、各班の実験研究者ら (A01 班：寺田、秋山、浦口、A02 班：川端、A03 班：林、長澤) と協同して、主に、キラルリン酸触媒、プロリノール触媒、4-ピロリジノピリジン触媒、グアニジン-ビスウレア触媒による不斉反応について検討を行い、制御システムの鍵が、多点水素結合と引力的相互作用の集積による精緻な相互作用ネットワークの構築であることを解明した。例えば、BINOL-リン酸触媒によるケトイミンの不斉移動水素化反応では、汎用されている Hantzsch エステルよりもベンズチアゾリンの方が高い不斉触媒能を示すが、これは、非対称構造のベンズチアゾリンとは異なり、対称構造の Hantzsch エステルでは、いずれのジアステレオメリックな遷移状態においても、基質/基質間または基質/触媒間に複数の立体反発が生じており、不斉反応場に適合しないためであることが分かった。



【A02：有機分子触媒による分子変換システム開発】

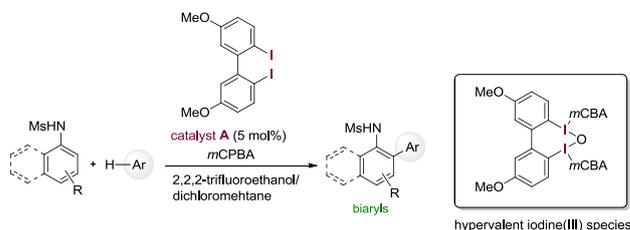
A02班では、有機分子触媒反応の開発を精力的に展開している研究者4名が核となり、班内外および領域内外との共同研究を積極的に行うことで、反応機構の精密解析から触媒反応の指導原理を探究し、新たな有機分子触媒の創製と未開拓な分子変換反応の開発を目指します。

このような目標のもと、平成23年8月より研究を開始し、A02班では下記の様な研究成果を期待通り着実に挙げている。A02班の計画班員4名がそれぞれ得意とする有機分子触媒 (ヨウ素触媒、水素・ハロゲン結合供与触媒、求核触媒、オニウム塩触媒) に焦点をあて、触媒構造を改変し新たな多成分分子集積場を構築することで反応効率を飛躍的に向上させることに成功した。また、A01班とA03班の研究者との共同研究を積極的実施することで、未知の触媒活性化機構の発見とその知見に基づいた新触媒の創製、多元触媒系の活用など有機分子触媒の有用性と優位性を示す優れた研究成果を挙げることができた。

北 泰行：レアメタルを用いないカップリング反応による精密合成設計

我々の 30 余年亘るヨウ素反応研究を通じて、「ヨウ素」が金属元素の反応挙動と極めて類似していることが明らかとなり、今や毒性の大きな鉛や水銀等の重金属酸化剤の代替としてだけでなく、反応性の高い遷移金属触媒とも競争しうる元素となりつつある。このような理由から、ヨウ素反応剤を触媒的に用いる分子間クロスカップリング反応の実現を一つの到達目標とし、研究を進めてきた。本点に関する世界初の成功例として、 μ -オキシ高反応性ヨウ素触媒存在下、メタククロ過安息香酸 (*m*CPBA) を共酸化剤として用いることにより、適切な保護基を有するアニリン類と芳香族化合物との触媒的分子間クロスカップリング反応が、室温で効果的に進行することを明らかとした。

First organocatalytic oxidative cross-biaryl coupling

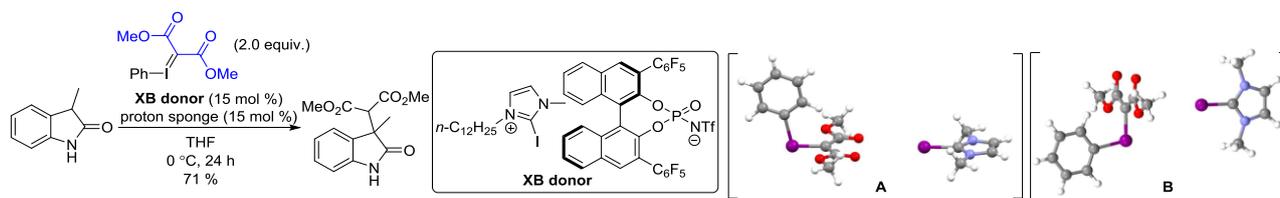


し、研究を進めてきた。本点に関する世界初の成功例として、 μ -オキシ高反応性ヨウ素触媒存在下、メタククロ過安息香酸 (*m*CPBA) を共酸化剤として用いることにより、適切な保護基を有するアニリン類と芳香族化合物との触媒的分子間クロスカップリング反応が、室温で効果的に進行することを明らかとした。

竹本 佳司：分子間相互作用ネットワークを駆使した革新的有機分子触媒による新反応開発 (A01班：都築誠二 博士との共同研究)

A01 班の諸熊奎治教授、都築誠二博士、坂田健准教授と個別に共同研究を推進し、触媒反応の詳細な機構を解明した。特に、下記の酸化的炭素-炭素結合形成反応において、ヨードニウムイリドと触媒の相互作用を計算化学的手法により解析し、イリドと σ ホールとの相互作用は **A** と **B** の 2 種類が考えられ、イリ

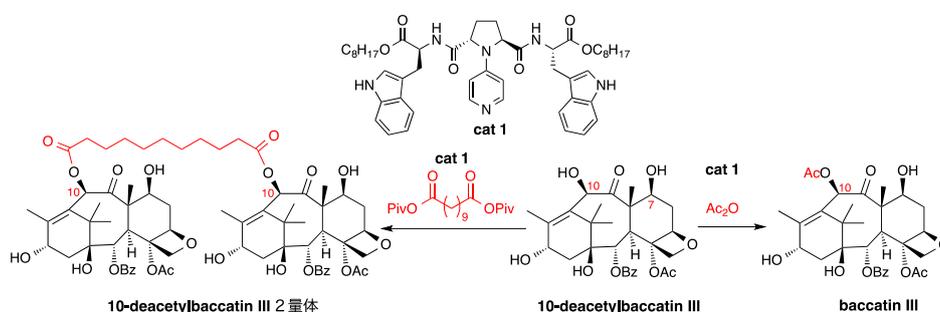
ド炭素と相互作用する **B** においては分散力の寄与が大きいことを明らかにした。また、チオ尿素触媒を利用した全合成への応用をはじめとし、新たな水素結合供与触媒の開発、ハロゲン結合供与触媒、リン酸触媒、NHC 触媒、ボロン酸触媒による触媒反応やチオ尿素触媒を共存させた二元触媒反応、さらにはハイブリッド触媒反応を見出し、幾つかの未踏反応を解決した。



川端 猛夫：基質認識型有機触媒による位置選択的分子変換（A03 班：砂塚 敏明 教授との共同研究）

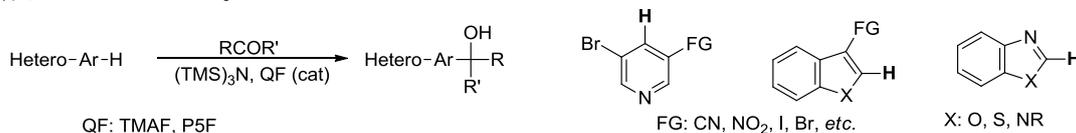
複雑な構造をもつ生理活性天然物やその前駆体の late-stage functionalization は、近年特に注目を集めている。本手法は、化合物本来の生物活性をある程度担保したまま多様な誘導体を提供できるメリットがある一方で、生理活性天然物の多官能基性に起因し、直接的な位置選択的修飾には困難が伴う。今回、抗がん剤として多用される taxol や taxotere の半合成前駆体である 10-deacetylbaccatin III の位置選択的修飾を行った。有機触媒 **1** を用いるアセチル化は、通常反応性が高いとされる 7 位ではなく 10 位選択的に進行し、baccatin III を一段階で与えた。

また、ジカルボン酸誘導体を用いるアシル化により、10-deacetylbaccatin III の直接的な位置選択的二量化に成功した。抗がん剤は薬剤耐性が問題になる場合が多いが、薬剤の二量化はこの問題解決に向けた有効なひとつの手段となる可能性を秘めている。



根東 義則：有機触媒芳香族脱プロトン化による分子変換システム開発

芳香環あるいは芳香複素環の脱プロトン化修飾を行うための分子変換触媒システムの検討を行い、HMDS アミド塩基をトリストリメチルシリルアミンとフッ化物により系内で発生させ、親電子剤の共存下に脱プロトン化修飾を一工程で行う有機分子触媒反応の開発を行った。この反応はピリジン環、インドール環、ベンゾチオフェン環、ベンゾチアゾール環などの芳香複素環をはじめ多官能基性のベンゼン環上においても進行することが明らかになった。いずれの反応も室温付近で進行し、親電子性の高い官能基との優れた共存性を示している。



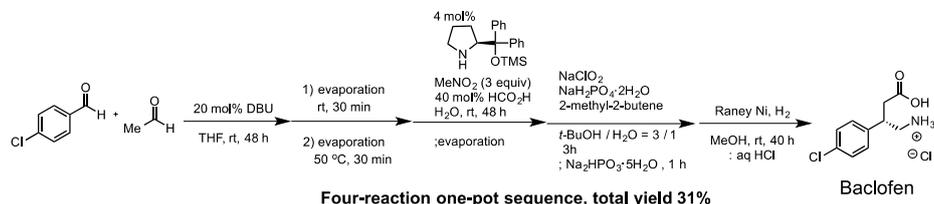
【A03 班：有機分子触媒による実践的有用物質合成】

A03 班では、有機分子触媒を用いることにより、実践的な有用物質合成を行うことを主たる研究目的とする。A01、A02 班が開発した触媒あるいは反応を活用し、有機分子触媒反応の医薬品・天然物合成への展開、ポリマー合成への展開等の研究を行い、以下にあげる成果をあげた。独自に開発した diphenylprolinol silyl ether 触媒を用いるタミフル、プロスタグランジン、バクロフェンの短工程合成、さらに腎腫瘍治療薬リードとして期待される(-)-englerine A の全合成を達成した。従来困難とされていた選択的アシル化を鍵反応とする短工程 Avermectin 誘導体合成を行う事ができた。グアニジン-ウレア型有機触媒の開発とそれを用いた linorexpin の不斉全合成に成功した。これらの研究において、反応解析を A01 班と共同研究で行っている例が 2 件、A02 班が開発した触媒を天然物の全合成に利用した共同研究が行われ、さらに領域内だけでなく、領域外また海外との共同研究により研究が大きく進展した。

林 雄二郎：有機触媒を用いた有用物質の独創的合成

diphenylprolinol silyl ether 触媒を開発し、タミフルの one-pot 合成、プロスタグランジン E1 メチルエステルの 3 pot 合成を達成した。また筋弛緩剤として臨床で用いられているバクロフェンの市販化合物からの one-pot 合成を行った。さらに、diphenylprolinol silyl ether 触媒の反応機構解析により、本反応にはエナミンを経由する反応とイミニウムとの 2 つの反応と考えられてきたが、イミニウム塩の反応に Diels-Alder 型の反応とマイケル反応型の反応があり、それぞれにおいて、最適なシリル基、芳香環上の置換基が異なる事を明らかにした。これらの知見

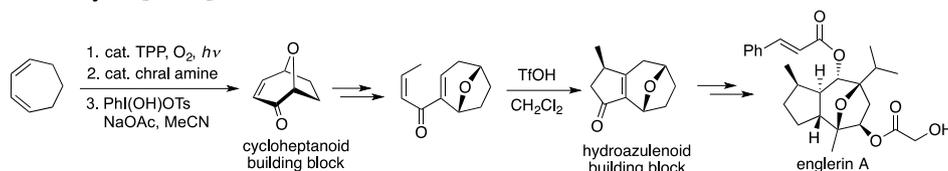
は新たな反応を開発する上で、また本触媒を使用する上で必要な知見である。なお、ab initio 計算による反応機構説明は元 A01 班員の内丸忠文博士との共同研究である。



岩淵 好治：有機分子触媒による高機能キラル合成素子の環境調和合成

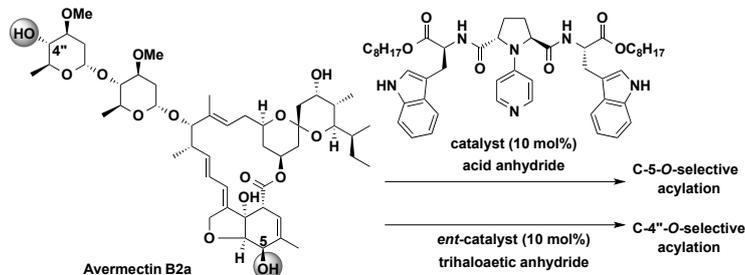
有機色素テトラフェニルポルフィリンを光増感触媒として生成させた一重項酸素と 1,3-シクロヘプタジエンとの[4+2]付加環化により定量的に得られるメソ対称性エンドペルオキシドを基質とする、キラル 3 級アミン触媒不斉 Kornblum-DeLaMare 反応を鍵反応として、シクロヘプタノイド型キラル合成素子を大量合成することに成功した。このものへのシクロペンタン環の立体選択的増築により、多様なヒドロアズレノイド化合物への変換を可能とする bicyclo[5.3.0]decane 型合成素子へと導き、これより腎腫瘍治療薬リードとして期待される

(-)-englerine A の全合成を達成し、キラル合成素子としての有用性を実証した。



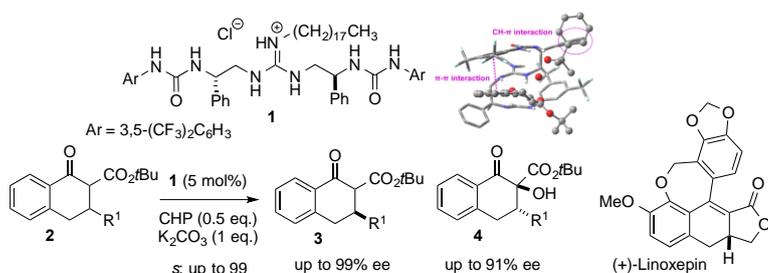
砂塚 敏明：有機触媒を用いた創薬を指向した生理活性天然物の実践的合成 (A02 班：川端 猛夫 教授との共同研究)

川端猛夫教授 (A02 班) が開発した有機分子触媒を利用し、北里研究所で発見された顕著な抗寄生虫、抗昆虫活性を有する Avermectin の天然テトラオール類縁体である Avermectin B2a の位置選択的なアシル化に取り組んだ。その結果、触媒と酸無水物の組み合わせにより、C-5 位、あるいは C-4 位水酸基の位置選択的なアシル化が可能になった。



長澤 和夫：触媒の動的構造制御に基づくタンデム型反応と効率的有用物質合成への展開 (A01 班：山中正浩 教授との共同研究)

γ 位に置換基 (R^1) を有するテトラロン型 β ケトエステル **2** に対し、グアニジン-ウレア型有機触媒 **1** 存在下 α 位の酸化反応を行うと、極めて高い効率で酸化的光学分割反応が進行し、**3** および **4** がそれぞれ高い光学純度で得られることを見いだした。本反応の遷移状態を、山中正浩教授 (A01 班) との共同研究から明らかにすることができた。また本反応を基盤として、(+)-linoxepin の不斉全合成を達成した。



3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1 ページ以内）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

本新学術領域の推進に当たり、生じた懸念事項は共同研究の円滑な促進が挙げられる。特に個々の研究者が独自に開発した有機分子触媒を活用した共同研究を推進する際、有機分子触媒を提供する上でのルールとその提供方法に関して定める必要が出てきた。有機分子触媒の設計開発は個々の研究者の独自性でもあり、これら他の研究者に提供して共同研究を推進する場合、研究者倫理に基づいたルール作りは必至である。一方で、これらの倫理観の過度な対応が障害になり共同研究を妨げるようであれば、領域の推進を減速しかねないマイナス要素となるため、これらを払拭するための有機分子触媒の適切な提供ルートの構築も必要となった。そこで、これらの問題を解決し円滑な共同研究を推進するため、領域ホームページに『「有機分子触媒」提供の申込』サイトを「メンバー専用サイト」に開設した（図3）。班員の研究者が開発した有機分子触媒を共同研究で利用したい場合、この提供申込サイトを通じて連絡し、総括班員の承認のもとに触媒の開発者から提供を受けるシステムとなっている。また、このサイト上に有機分子触媒の提供を受ける際のルール（サイト上では「有機分子触媒の提供 申し合わせ事項」を明記し、このルールに同意した上で依頼申込するシステムとすることで研究者倫理への対応を図った（図4）。総括班員の承認を得たのち、有機分子触媒の提供を依頼者が受け、共同研究を開始するサポートシステムをウェブ上に構築することで、上記の問題点の回避を図った。

図3. 領域HPのメンバー専用サイトに開設した「有機分子触媒提供の申込」サイト



図4. 有機分子触媒の提供 申し合わせ事項

有機分子触媒の提供について

有機分子触媒の提供の目的

班員が設計開発・合成した有機分子触媒を別の班員からの依頼に応じて提供し、「共同研究」を奨励・推進する。本サイトは「共同研究」のきっかけ作りを目的として開設するものであり、是非ともご活用いただき、分野の発展にご協力頂きたい。

有機分子触媒の依頼申込 申し合わせ事項

1. 新学術領域研究に係る「共同研究」の目的にのみ使用すること。
2. 班員より提供を受けた有機分子触媒を使用した成果は原則、「共同研究（共著）」として発表のこと。
3. 提供者はHP上に提供可能な有機分子触媒を掲載し、依頼者は「有機分子触媒のリスト（下記からダウンロード）」の中から提供を受けたい有機分子触媒を選び、依頼申込書（下記からダウンロード）に化合物リスト番号、提供者名ならびに構造式を記載のこと。
4. 依頼者により依頼申込書を作成し、総括班の承認を経て、依頼者より提供者に連絡のこと。
5. 有機分子触媒の提供を受けるにあたっては、提供者に配慮し「量と時期」を十分協議の上、依頼のこと。
6. 「共同研究」の推進に当たっては、提供者ならびに依頼者の責任のもとで実施のこと。
7. 「共同研究」終了後は提供を受けた有機分子触媒を提供者に返却のこと。

有機分子触媒のリスト	>>有機分子触媒のリストをダウンロードする リストの更新日：2014年8月6日
依頼申込書	>>依頼申込書をダウンロードする

有機分子触媒の依頼申込 依頼手順

1. 依頼申込書を上記のリンク先からダウンロード。
2. 上記の、提供可能な有機分子触媒のリストから提供を受けたい有機分子触媒を選択。複数の場合は該当する全てを依頼申込書に記入。ただし、提供者が異なる場合は依頼申込書を提供者に応じ複数作成のこと。
3. 依頼申込書に必要事項を記入。
4. 必要事項を記入した「依頼申込書」のPDFを下記のブラウザからアップロード。
5. 『「申し合わせ事項」に 同意します』にチェック「」し、依頼申込書を送信。
6. 以上で申込完了。提供にあたっては、総括班によって共同研究の目的等を審査する。その回答を待ってから提供者に連絡のこと。

依頼申込書	PDFファイル(.pdf) : <input type="text"/> <input type="button" value="参照..."/>
-------	---

「申し合わせ事項」に <input type="checkbox"/> 同意します	
<input type="button" value="依頼申込書を送信"/>	

4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況（2 ページ以内）

審査結果の所見及び中間評価において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

<審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況>

審査結果の所見では「(一部を抜粋) 本領域研究は、有機分子触媒を用いた新規合成手法の開拓を目的とした研究課題である。この分野は近年急速な発展を遂げ、有機分子触媒に特有な反応も見出されるなど、金属触媒の代用という立場から脱却して独立した学問領域を確立しつつある。世界的に激しい競争の中で研究が進められている中で、日本の優位性を保つ上でも本研究領域の学術的意義と重要性は高いと言える。金属を用いないことで環境への負荷も小さく、医薬品や機能性材料など様々な分子変換合成プロセスへの応用も期待される重要な課題である。」とのコメントに記載されている通り、領域の重要性について前向きな意見を頂いた。実際、本領域が採択されたことで本分野を飛躍的に発展することができ、日本の貢献度はもちろん、優位性を示すことができた。総括班評価者のコメント（11. 総括班評価者によるコメント参照）に

山本尚教授：「これまでの新学術領域プロジェクトでは見られない活発な活動を行い、本分野の我が国の優位性を確立すると同時に、今後我が国が中心になって本分野を飛躍させる基盤を作り上げ、同時に将来に向けての多くの有為の人材を育成した。」、

丸岡啓二教授：「日本における「有機分子触媒」の新学術領域研究が平成 23 年度より始まったことは、グループによる研究推進の点でもまことにタイムリーであり、それから 5 年間で最大 67 名の研究者が集中してこの新興分野における日本の最新の研究成果を世界に向けて発信することにより、日本の貢献度やプレゼンスを示すことができたと思う。」

List 教授：「the represented achievement of this project is excellent and Japanese researchers have played a leading role in the field of organocatalysis」

とあるように、本領域の推進により、本分野における日本の優位性と貢献度を示すことが出来たと高く評価を受けている。

その一方で本新学術領域の推進に関しては、「個別研究の集まりと感じられる部分もあり、それぞれの研究者が連携することで期待される革新的な成果というものがやや不明瞭であるとの意見があった。また、有機分子触媒の重要性をより明確に打ち出し、本領域研究の弱点となる可能性のある異分野融合研究を格別に推進することを期待する」との意見があった。本領域の開始当初にはこうした意見を受けていたが、公開シンポジウムの開催や若手セミナーの開催による情報交換や人的交流を通じて、共同研究を積極的に推奨することで、「研究者が連携することで期待される革新的な成果」を挙げることができたと考えている。特に計算化学を用いた触媒機構の理論的な研究が共同研究によって大きく進展し、新たな触媒開発の指導原理につながる知見を見出すまでに至っており、本領域研究の課題の一つを解決する大きな前進を遂げたと考えている。こうした成果は本新学術領域を組織したことで研究者間の連携が円滑になされ、実験研究者と理論化学者がこの組織基盤を活用して共同研究したことによって初めて成し得たものである。

<中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況>

中間評価では「A」判定を受けており、研究領域の設定目的に照らして、期待通りの進展が認められると評価を頂いている。

【総合所見】では「本領域研究では、世界における日本の触媒化学の優位性が極めて重要で、これを発展・深化させることが喫緊の課題と捉え、論理的に触媒合成の開発指導原理を明確にしようとする精力的な領域である。領域内のみならず、協力企業との共同研究が実施され、成果が着実に出ていることから、本領域は当初の目的に照らして、順調に進展していると判断できる。今後は有機分子触媒でなければ成しえない反応を開発すべく研究を推進し、新たな展開につなげることを期待する。」となっており、今後の課題として、「有機分子触媒でなければ成しえない反応を開発すべく研究を推進し、新たな展開につなげる」ことが挙げられていた。

一方、「評価にあたっての着目点ごとの所見」では、以下のコメントを頂いている。

【(a) 研究の進展状況】「各研究者が開発した種々の優れた有機分子触媒により、個々の成果は十分出ている。研究組織内の連携は機能的に進められており、企業との多くの共同研究を積極的に実施することによって、実用化が見込める研究成果を得ている点も高く評価できる。「多様な研究者による新たな視点や手法による共同研究等の推進により、当該研究領域の新たな展開を目指すもの」としてこれまでの進展は順調と考えられるが、今後は斬新なアイデアでの研究推進、理論的な触媒化学の発展を期待する。」

【(b) 研究成果】「計画研究間のみならず、企業との共同研究も実施されており成果が着実に現れている。計算化学を用いて、触媒の機構の理論的な研究が大きく進展し、新たな触媒開発指導原理につながる知見が見出されており、将来の展開が期待できる。若手研究者の育成にも注力し、若手を含めて多くの受賞、また、雑誌のカバーページを飾るような論文の成果が得られている。本領域の成果は産業界からの期待も大きく、影響力もある。」

【(c) 研究組織】「研究組織は、日本のトップクラスの研究者により構成されており、研究項目内外での多くの共同研究に加え、協力企業との共同研究も多数行われているが、新しい学術領域の創出には、領域全体で共通意識を持って、本分野ならではの基礎概念創出に向けて努力することが必要と考えられる。」

【(d) 研究費の使用】「特に問題点は無かった。」

【(e) 今後の研究領域の推進方策】「多用な研究者による個別研究の集まりとならないよう、領域全体を統一する概念を明確にする必要がある。触媒の開発指導原理を論理的に構築し、世界に先駆けた概念による新触媒の開発が重要である。領域名にもある「未来型分子変換」に見合う成果につながるよう、既存の反応の制御に留まらず、有機分子触媒でなければ成し得ない反応を開発すべく、共同研究や新視点・手法の開発を望みたい。」

【(f) 各研究計画の継続に係る審査の必要性・経費の適切性】

「各計画研究において順調に成果があがっており、今後の研究計画・方法も意欲的かつ妥当であることから、継続に係る審査の必要性は無い。研究経費も適切に計上されており、問題ない。」

以上の中間評価を要約すると今後の課題として下記の3点が挙げられ、これらの課題を克服するべく領域の運営を進めてきた。

- 1) 斬新なアイデアでの研究推進、理論的な触媒化学の発展を推進すること。
- 2) 領域全体で共通意識を持って、本分野ならではの基礎概念創出に向けて努力すること。
- 3) 既存の反応の制御に留まらず、有機分子触媒でなければ成し得ない反応を開発すること。

1) の斬新なアイデアのもとでの研究推進では、本領域の発足当初は有機分子触媒単独での分子変換が中心に開発研究が進められてきたが、公募班から多様なバックグラウンドを有する研究者を新たに領域加えることで、組み合わせ技術によって新展開が見込まれる環境を整えた。特に有機分子触媒と光を組み合わせた新反応の開発に進展が見られ、それ以外にも金属触媒、固相反応、マイクロウェーブ、超高压、フローシステムなどと組み合わせた開発研究をスタートしており、今後の展開が期待される下地を作った。一方、理論的な触媒化学の発展では、計算化学者との共同研究を強力に推進することで、触媒の立体化学制御機構や反応機構などを明確にし、触媒開発指導原理の確立に大きく貢献した。

2) 領域全体で共通意識を持った基礎概念創出では、特に、有機分子触媒による制御機構の解明を中心に進め、基礎概念の確立に注力した。1) に示す通り、計算化学者との共同研究を積極的に進めることで、有機分子触媒の開発における指導原理の確立に向けた取り組みを推進し、「触媒設計」に関する基礎概念の確立に努めた。新触媒の開発にもいくつか成功しており、一定の成果を収めたと考えている。

3) 既存の反応の制御に留まらず、幅広い触媒反応系の開拓を目指すため、特異な有機分子触媒の開発による求核剤の拡充やラジカル反応の制御など、従来の反応系の枠にとらわれない開発研究を推進してきた。いくつかの新規な有機分子触媒の開発に基づき、研究成果を挙げており、上記のコメントに概ね応えられるきっかけとなる成果をあげることができたと考えている。

5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）[研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する]

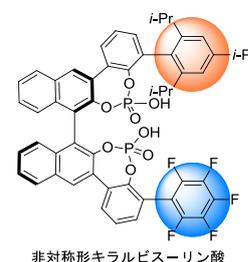
(3 ページ以内)

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

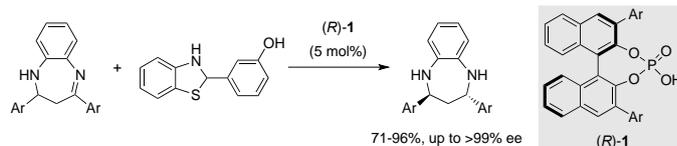
【A01 班：有機分子触媒の制御システム設計開発】

総評：A01 班では、有機分子触媒の開発を精力的に展開している合成化学の研究者 25 名と有機反応の理論化学計算を専門とする研究者 3 名が、班内外および領域内外との共同研究を積極的に行う事で、有機分子触媒の原理原則を理解するための詳細な反応機構の解明と有機分子触媒の改良と新たな有機分子触媒の開発を行う事により、未開拓な分子変換反応の開発へと展開する事を目指している。このような目標のもと、計画班は平成 23 年 8 月より、公募班は平成 24 年 4 月より研究を開始し、A01 班では下記の様な研究成果を期待通り着実に挙げた。合成化学の研究者は、これまでの得意とする有機分子触媒の触媒設計、ならびに反応開発を着実に進めており、既に理論化学の研究者との共同研究が触媒設計、触媒開発に威力を發揮し、下記に示す成果を見出した。

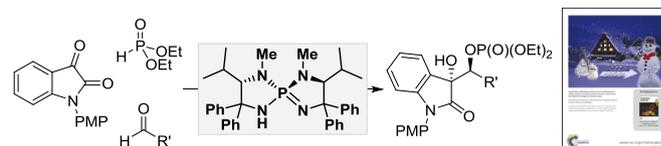
寺田 眞浩（計画研究） 水素結合のネットワーク形成を基盤とした多酸系複合型有機分子触媒の設計開発を推進した結果、非対称形キラルビスーリン酸触媒による高度な立体化学制御が可能であることを見出した。導入した置換基の化学的性質によって二つのリン酸の役割分担がなされていることを量子化学計算によって解明し（山中 正浩 教授（A01 班）との共同研究）、多酸系複合型有機分子触媒を分子設計する際の指針を示した。



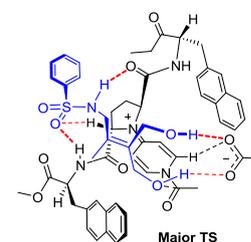
秋山 隆彦（計画研究） ベンゾチアゾリンを水素供与体として用いた水素移動型還元反応を利用したテトラヒドロベンゾジアゼピンの不斉合成に成功した。理論化学計算（山中 正浩 教授（A01 班）との共同研究）により、反応の遷移状態を明らかにした。



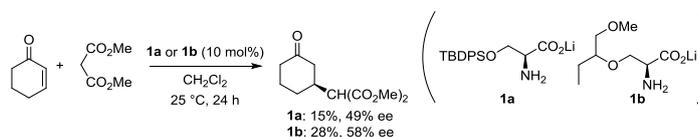
浦口 大輔（計画研究） 従来、過剰量の金属還元剤が必須とされてきたラジカル的なカルボニル化合物の二量化反応を、ホスファ Brook 転位を巧みに用いた連続反応を設計することでイオニックに実現し、高立体選択的に非対称ジオール誘導体を得ることに成功した。新たな戦略の力量を実証した本成果は高く評価され、*Chemical Science* 誌の裏表紙に選定された。本研究は、米国ノースカロライナ大のグループとの共同研究として行った。



山中 正浩（計画研究） A02 班の川端らが開発した 4-ピロリジノピリジン触媒は、分子性触媒では初めて四置換アルケンジオールの *E*-選択的アシル化反応を達成している。川端猛夫教授（A02 班）との共同研究により、幾何異性の識別機構には、基質の NH 部位と触媒のアミド基の CO 部位、基質の OH 基とアセテートアニオンの水素結合に加えて、触媒のアミド基の NH 部位と基質の 2 つのアミド基が協働的に作用して高度な水素結合ネットワークを構築することが、高い *E*-選択性の発現に重要であることを解明した。

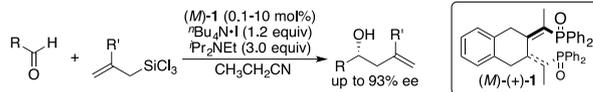


吉田 雅紀（公募研究） ポリエーテル鎖を側鎖に持つ第一級 α -アミノ酸リチウム塩を合成し、イミン-エナミン型有機分子触媒反応の触媒として用いたところ、ポリエーテル鎖を有しない触媒と比較して反応が早く進行し、高いエナンチオ選択性で生成物を与えることが分かった。

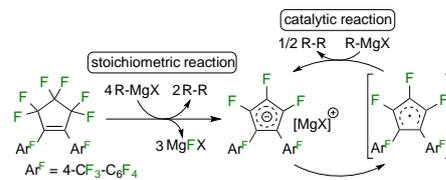


小笠原 正道 (公募研究) アトロプ異性共役ジエン(M)-

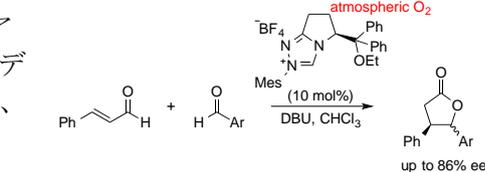
(+)-1 は優れたルイス塩基性有機分子触媒として作用し、アルデヒドの不斉アリル化において、高活性かつ高エナンチオ選択性を示す (中島 誠 教授 (A02 班) との共同研究成果)。



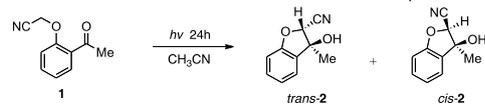
是永 敏伸 (公募研究) パーフフルオロシクロペンテン誘導体がグリニャール試薬の酸化的ホモカップリング反応の触媒として働くことを見出した。この触媒サイクルでは、触媒を再生する再酸化剤として、空气中の酸素を用いる事ができる。



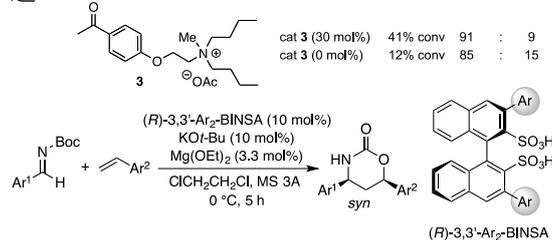
鳴海 哲夫 (公募研究) エトキシジフェニルメチル基を有するトリアゾリウム塩は優れた NHC 触媒前駆体として作用し、 α,β -不飽和アルデヒドと芳香族アルデヒドを基質とする不斉ラクトン化反応において、高活性かつ高エナンチオ選択性を示すことを見出した。



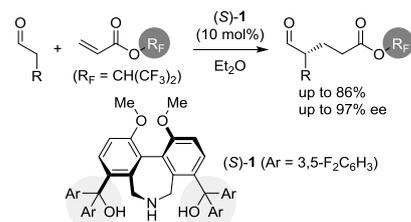
山田 眞二 (公募研究) ベンジルオキシアセトフェノン類の Norrish-Yang 反応において、TBAF を添加することで高い trans 選択性が見られることが明らかになった。



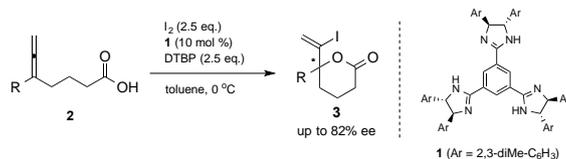
波多野 学 (公募研究) キラル超分子カリウムマグネシウムピナフチルジスルホナート触媒を創製し、スチレンとアルジミンの高エナンチオ選択的付加環化連鎖反応を開発した。生成物は光学活性 γ -アミノアルコールやイソインドリン骨格を有する生物活性物質へ誘導した。



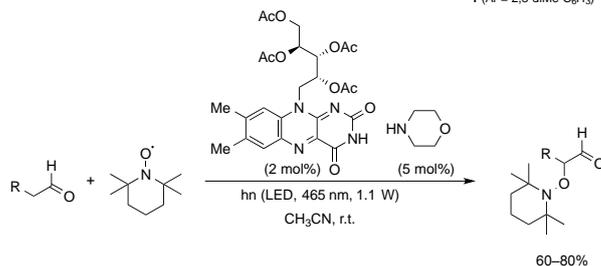
加納 太一 (公募研究) アルデヒドのみを選択的に取り込んで求核剤として活性化する酵素様の反応場と求電子剤を活性化するためのヒドロキシ基を併せ持つ、アミノアルコール触媒(S)-1 を新たに設計し、アルデヒドのアクリル酸エステルへの共役付加反応に適用したところ、反応は高立体選択的に進行して目的の共役付加生成物を与え、反応の不斉触媒化が初めて実現された。



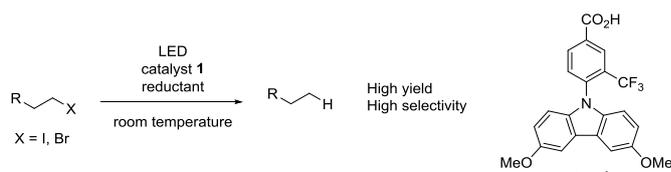
村井 健一 (公募研究) 独自に開発したトリスイミダゾリン触媒を用いて、これまで報告のないアレンカルボン酸の不斉ヨードラクトン化反応の開発に成功した。



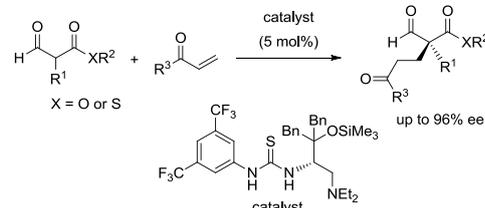
今田 泰嗣 (公募研究) 四酢酸リボフラビン触媒とモルホリン触媒の存在下、アルデヒドと TEMPO を青色 LED の照射下で反応させると、アルデヒドの α 位オキシアミノ化反応が進行した。本反応は入手容易なフラビン分子の有機フォトレドックス触媒としての可能性を示すものである。



松原 亮介 (公募研究) カルバゾールと安息香酸が一体化した分子を新たに創製し、それを光触媒として C-X 結合を光化学的に活性化することができた。

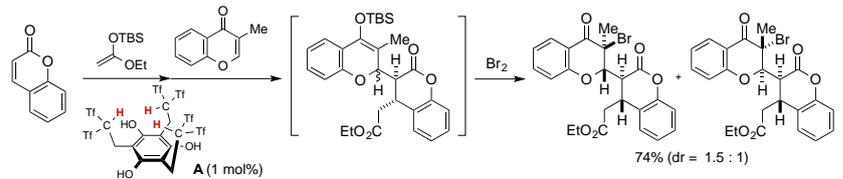


御前 智則 (公募研究) 2-ホルミルエステルを求核剤とするビニルケトンへの触媒的不斉共役付加反応の開発に成功した。この反応の生成物は、従来構築が困難なキラル四級炭素を含む鎖状の化合物で、しかも四級炭素周辺に種々変換が可能な官能基を有しているため、キラルシントーンとして期待できる。尚、この反応は 2-ホ

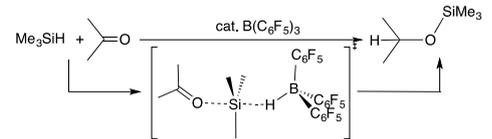


ルミルエステルを求核剤とする初めてのエナンチオ選択的 C-C 結合形成反応の例である。

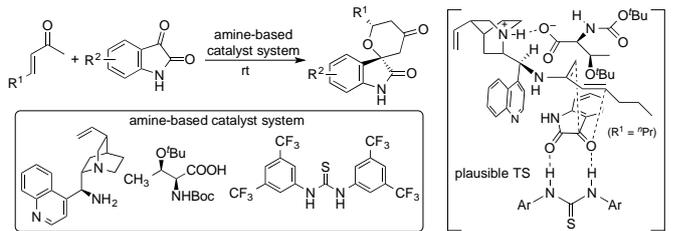
矢内 光 (公募研究) 本研究の中で開発された炭素酸触媒 **A** を駆使することで、逐次の Mukaiyama-Michael 反応が円滑に進行することを見いだした。共同研究 (領域外) の結果、既存の強酸触媒とは異なり、触媒 **A** は Michael 受容体のグルーフトランスファー重合を引き起こしにくく、目的とする逐次反応を行う上で優れた特性を持っていることも明らかとなった。



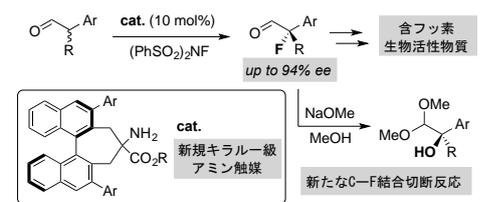
坂田 健 (公募研究) トリス(ペンタフルオロフェニル)ボラン $B(C_6F_5)_3$ を触媒として用いたヒドロシリル化反応の反応機構を量子化学計算により検討し、Si-H 結合活性化が鍵であることを明らかにした。



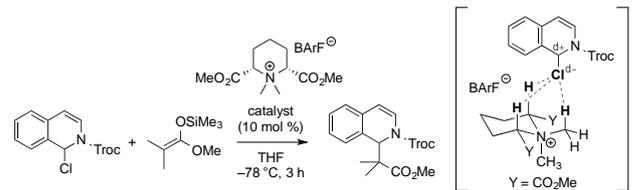
田中 富士枝 (公募研究) アミンを含む三成分から成る触媒系を用いる、エノンの直接的不斉ヘテロディールス・アルダー反応により、一連のスピロオキシインドール置換テトラヒドロピラノン誘導体を合成する方法を開発した。また、本触媒反応を精査し、反応加速や立体選択性制御における、触媒構成成分の機能等、今後の触媒開発に資する知見を得た。



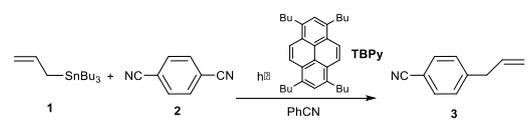
柴富 一孝 (公募研究) 新たなキラル一級アミン触媒を開発し、これを利用することで分岐型アルデヒドの高収率かつ高エナンチオ選択的なフッ素化反応に初めて成功した。また、本反応を利用して含フッ素生物活性物質を合成し、創薬利用の一例を示した。さらに、得られたフッ素化アルデヒドの炭素-フッ素結合の開裂を経る新たな誘導化反応を見いだした。



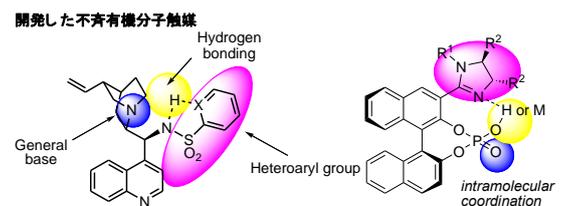
白川 誠司 (公募研究) テトラアルキルアンモニウム塩触媒の新たな可能性として、水素結合供与型有機分子触媒としての利用を検討した。新たに調製した触媒を用い、マンニッヒ型反応に適用したところ、目的の触媒作用を示すことが明らかとなった。



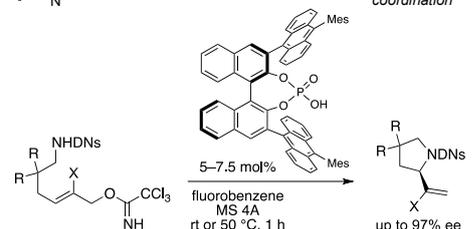
小西 玄一 (公募研究) 有機光触媒 (光増感剤) の吸収帯を LED 光源に合わせるという戦略により、光誘起電子移動を経由するクロスカップリング反応の効率化や可視光での進行に成功した。また、Ir 錯体の光触媒で合成している医薬品や天然物合成に有用な反応を添加塩なしで安価に製造するプロセスの開発も行った。



中村 修一 (公募研究) 幾つかの配位性置換基を導入した不斉触媒を開発し、それら触媒を用いるケトイミンへのヒドロペルオキシド、チオール、ピロール、エステルエノラート類の付加反応、脱炭酸型不斉共役付加反応、および、アジリジン類のイソチオシアナートによる不斉開環反応の開発に成功した。

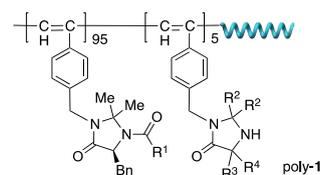


山田 健一 (公募研究) キラルリン酸との水素結合形成によってトリクロロアセトイミダートの脱離能を効果的に活性化できることを見出し、脱離基の活性化に基づく触媒的不斉分子内 S_N2 反応の開発に成功した。DFT 計算による解析から、*anti*- S_N2 型反応機構で進行

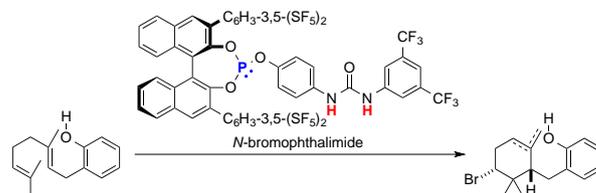


することが示唆された。なお DFT 計算について、山中 正浩 教授 (A01 班)、坂田 健 准教授 (A01 班)との共同研究により有益なご助言をいただいたことを特記したい。

飯田 拓基 (公募研究) アキラルなイミダゾリジノン誘導体を触媒活性部位として有する光学活性らせん状ポリフェニルアセチレン(**poly-1**)が、不斉触媒能を示すことを見出し、高分子の誘起らせん構造が触媒の不斉反応場として利用できることを明らかとした (八島栄次教授 (領域外)との共同研究)。また、今田泰嗣 教授(A01 班)との共同研究により、キチンに担持したフラビン触媒の開発に成功した。



坂倉 彰 (公募研究) 2-ゲラニルフェノールのエナンチオ選択的ブロモ環化反応に有効なキラルな亜リン酸エステルウレア触媒の精密設計を行い、中程度ではあるが、A 環のみが環化した生成物をエナンチオ選択的に得ることができた。

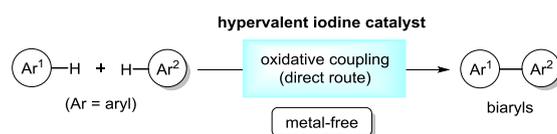


【A02 班：有機分子触媒による分子変換システム開発】

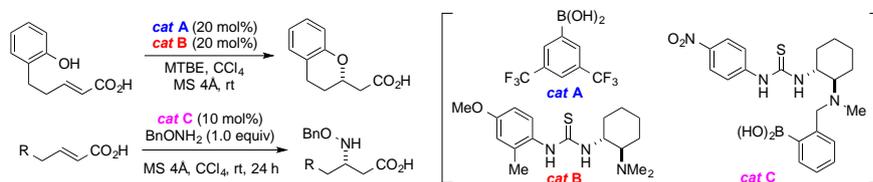
総評：A02班では、これまで様々な触媒分子の開発に携わってきた研究者を結集し、有機触媒の更なる進化発展を目指して、各触媒の未知なる反応機構の解明、個々の反応に適応した有機分子触媒の改良と未開拓な分子変換反応の開発に焦点をあてた研究を行っている。

このような目標のもと、計画班員4名以外に、平成24年4月からは11名の公募班員を加え、さらに平成26年4月からは公募班員を増員し19名が参画した。その結果、研究対象となる有機分子触媒のラインナップがハロゲン触媒、ラジカル触媒、レドックス触媒、ペプチド系触媒、固定化触媒、さらに金属触媒併用系や多元触媒系などより幅広く多彩になり、それと連動して開発対象となる反応も多様性がさらに増大した。これまでに得た成果を以下に示すが、期待通りの研究成果を順調に挙げることができた。特に当初の共同研究は1例のみであったが、異分野研究者間での学術交流を奨励し活発化することにより、殆どの班員が所属班にとられることなく、しかも複数個の共同研究を実施するまでに発展させることができた。本領域のブレークスルーに繋がる研究成果も幾つか誕生している。

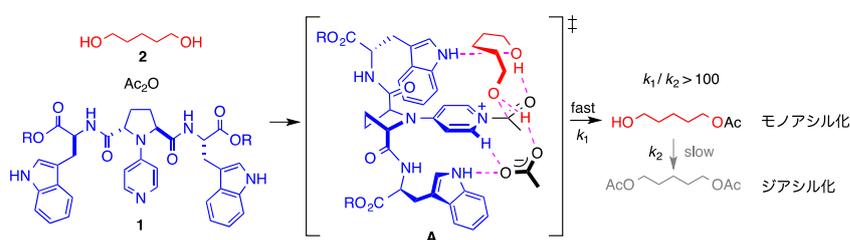
北 泰行 (計画研究) 未来に残る持続可能な分子変換の実現を目指し、反応剤として低毒性かつ安全で天然に豊富に存在するヨウ素を鍵として用いた、レアメタルを用いないクロスカップリング反応を実現するとともに、様々な芳香族化合物の組み合わせの反応に有効な反応系への改良を行い、有用物質の合成へと展開した。



竹本 佳司 (計画研究) 報告例のない α,β -不飽和カルボン酸への直接的な共役付加反応を検討し、アミノチオ尿素 **A** とボロン酸 **B** の二元触媒あるいはそれらを合体させたハイブリッド触媒 **C** が分子内のみならず分子間反応を効果的に促進し、クロマン類や β -アミノ酸誘導体が高エナンチオ選択的に合成できることを見出した。



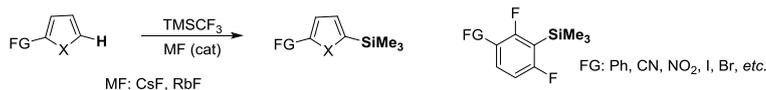
川端 猛夫 (計画研究) 長鎖ジオールのモノアシル化は、一見単純であるが現在でも困難な分子変換として知られている。触媒 **1** を用いる **2** のアシル化は、モノアシル化 92% に対し、3% のジアシル体を副生するのみ



で、その化学選択性は酵素法をも凌駕する。これは遷移状態 **A** に示すように、 C_2 -対称性触媒 **1** の 2 つの

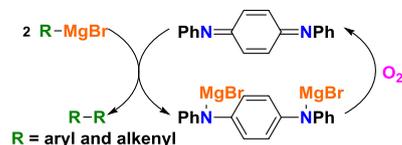
分子認識側鎖がそれぞれ異なる機能を持ち、それらが協同的に作用することで、高度な動的分子認識が実現したものと考えている (A01 班：山中 正浩 教授との共同研究)。

根東 義則 (計画研究) 芳香環の脱プロトン化修飾の新しい触媒反応として、 TMSCF_3 (Ruppert 試薬) とフッ化物塩から

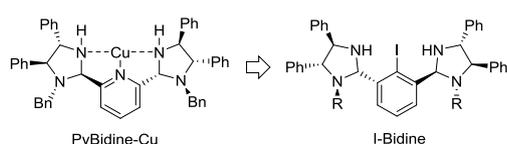


CF_3 アニオンを発生させ、これを脱プロトン化剤として利用するケイ素化反応の開発を行った。この反応は官能基を有する芳香複素環やベンゼン環上において円滑に進行し、高い官能基共存性を示した。

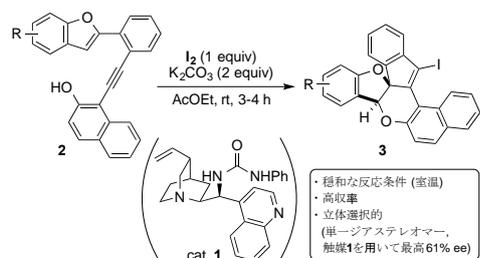
雨夜 徹 (公募研究) 有機マグネシウム化合物の酸化的ホモカップリング反応において、酸素雰囲気下、*N,N'*-ジフェニル-1,4-ベンゾキノンジイミンが、有機分子触媒として機能することを見出した。



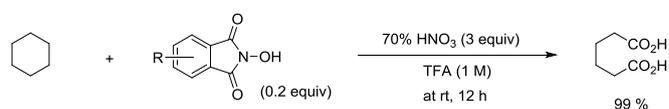
荒井 孝義 (応募研究) Bis(imidazolidine)Pyridine (PyBidine)-Cu 不斉触媒を用いる [3+2]付加環化反応について、A01 班の山中 正浩 教授との共同研究により Cu とプロトンの協奏機能によって高立体選択的な反応が進行していることが明らかにした (ACIE 2015, 54,1595)。本協奏機能を基に、金属をヨウ素に置き換えた Bis(imidazolidine) iodobenzene (I-Bidine)有機触媒の開発に成功した。



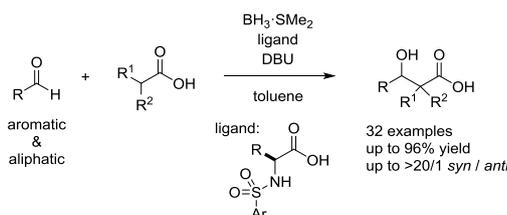
入江 亮 (応募研究) ベンゾフラン誘導体 **2** のヨード化/脱芳香族的[4+2]環化付加カスケード反応の開発に成功し、複雑な縮環構造を有するヘテロ多環式化合物 **3** の高効率かつ立体選択的合成法を開拓した。さらに、キラルな有機触媒 **1** を用いることで本反応のエナンチオ制御も達成した。現在、キラル触媒の改良に向けて、中村 修一 准教授 (A01 班) との共同研究を進めている。



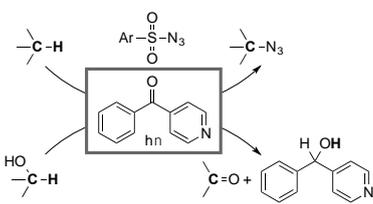
尾野村 治 (公募研究) NHPI 誘導体を有機分子触媒として用いたアルカンの金属フリー高効率酸化法を開発した。この方法で常温常圧下、シクロヘキサンをアジピン酸に定量的に変換できた。



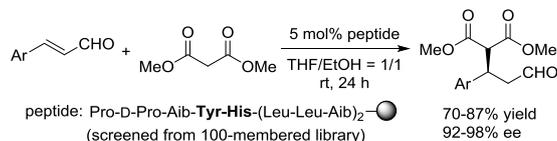
金井 求 (公募研究) 1 当量の $\text{BH}_3 \cdot \text{SMe}_2$ と *N*-スルホニルアミノ酸誘導体リガンドから系中で調製される活性化剤を用いることで、カルボン酸選択的アルドール反応の開発に成功した。高い電子求引性を有するリガンドを用いることで反応性が劇的に向上し、生物活性物質の直接的変換反応にも適用可能である。



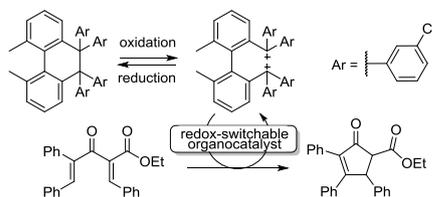
上條 真 (公募研究) 酸性度に乏しく、通常は反応性を示さない飽和炭素鎖に含まれる炭素-水素(C-H)結合の切断化剤として、光励起された 4-benzoylpyridine が効果的に機能することを明らかにした。この素反応を鍵工程として利用することで、 $\text{C}(\text{sp}^3)\text{-H}$ 結合の直接アジド化反応(C-H 官能基化)、ならびにアルコールの光酸化反応(官能基変換)を新たに開発した。



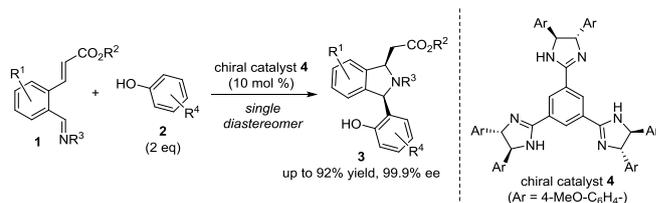
工藤 一秋 (公募研究) 新たに開発したアッセイ法を用いて樹脂固定化ペプチドライブラリーをスクリーニングし、イミニウムイオン機構で進む共役付加反応に高い活性を示すペプチド触媒を見出した。得られたペプチド触媒は高活性というだけでなく、エナンチオ選択性も従来のものよりも優れることが分かった。



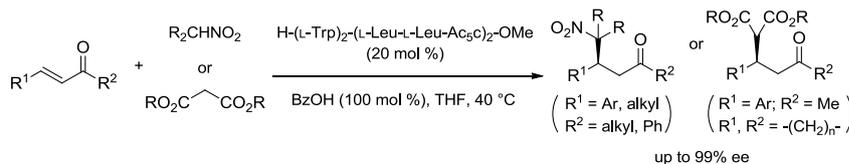
菅 誠治 (公募研究) 独自に開発したレドックス応答性有機分子触媒を用いて、Nazarov 環化、向山アルドール反応、アルデヒドのシアノシリル化反応において、触媒機能の電気化学的なスイッチ オン・オフによる反応制御を達成した。



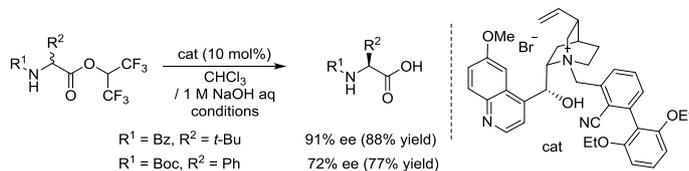
滝澤 忍 (公募研究) アルジミン **1** とフェノール **2** に触媒 **4** (村井健一博士 (A01 班) との共同研究) を用いると初めての不斉 Betti/aza-Michael ドミノ反応が進行して、イソインドリン **3** が単一ジアステレオマーとして得られることを見出した。



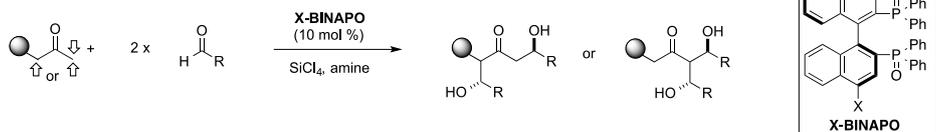
田中 正一 (公募研究) 環状置換アミノ酸を導入した α -ヘリカルペプチドを有機分子触媒として利用した不斉 1,4-付加反応を開発し、その不斉発現機構について考察した。



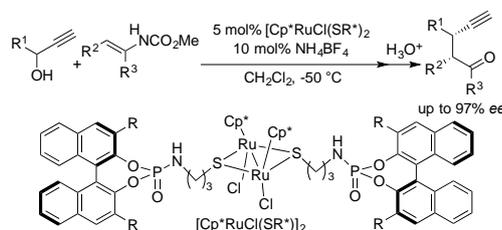
徳永 信 (公募研究) キラル四級アンモニウム塩を相間移動触媒に用いて、エステル類の不斉加水分解反応を行った。エノールエステル類に加え、キラルなアミノ酸エステル類の不斉加水分解などにも成功した。



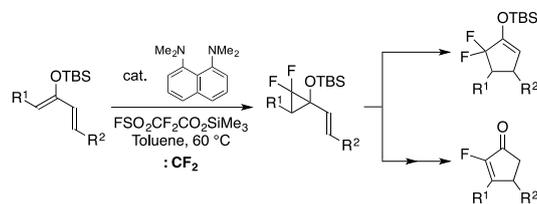
中島 誠 (公募研究) キラルなホスフィンオキシド X-BINAPO を触媒とすることにより、2分子の受容体が1分子の供与体と反応する、2種の高エナンチオ選択的不斉二重アルドール反応が実現できた。



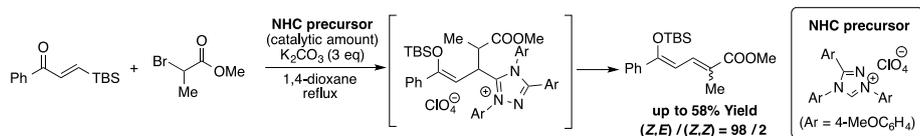
西林 仁昭 (公募研究) 有機触媒として広く用いられているキラルリン酸アミドを架橋硫黄部位に導入したハイブリッド型硫黄架橋二核ルテニウム錯体を新たに設計・合成し、このハイブリッド型触媒を用いることによる不斉プロパルギル位置置換反応の開発に成功した。



淵辺 耕平 (公募研究) 有機分子触媒を利用することで初めて可能となった、穏やかな条件下でのジフルオロカルベン生成を利用して、シリルジエノールエーテルのジフルオロシクロプロパン化を初めて実現した。得られた生成物にフッ素置換基の特徴を活かした変換を組み合わせ、医薬品等として重要な α,α -ジフルオロシクロペンタノン誘導体の位置選択的合成反応として確立した。



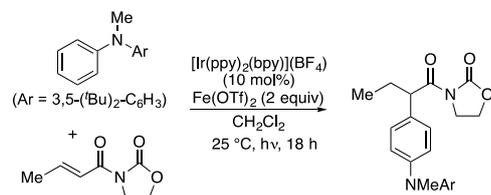
松谷 裕二 (公募研究) NHC 型有機触媒を求核剤として用い、 β -シリル共役エノンに対する求核付加、引き続き 1,4-Brook 転位と求電子剤との反応、触媒の再生という新規な連続的変換反応系を設計し、その反応条件の最適化を実施した。その結果、NHC 触媒としてトリアリールトリアゾール誘導体を用い、1,4-dioxane 中で加熱還流する条件にて、最大 58%にて反応が進行し、合成化学的に有用なシリルジエノールエーテル類を 98/2 という高い立体選択性にて合成することに成功した。



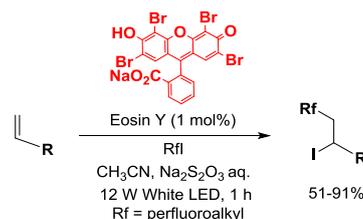
南方 聖司 (公募研究) ヨウ素触媒存在下、 β,γ -不飽和カルボン酸にクロラミン塩を作用させると、脱炭酸を伴うアミノ化反応が進行し、アリルアミドが得られることを見出した。本手法を用いることで、既存の方法では合成困難であった多置換アルケン部位を含む種々のアリルアミン誘導体を簡便に合成可能である。



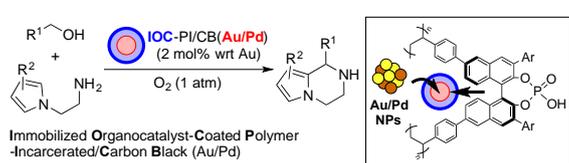
三宅 由寛 (公募研究) 光誘起電子移動によるアミニウムラジカル生成を鍵とする α,β -不飽和カルボニル化合物の α 位選択的アール化反応の開発に成功した。電子豊富芳香環と電子不足アルケンとの反応が熱的条件下では β 位で反応することと対照的な結果が得られた。



矢島 知子 (公募研究) 有機触媒を用いた光ペルフルオロアルキル化反応の開発に成功した。特に、安価で入手容易な有機色素であるエオシン Y を用いた際に、可視光照射により種々のヨウ化ペルフルオロアルキルと末端アルケンとのヨウ化-ペルフルオロアルキル化反応が極めて速やかに良好な収率で進行することを明らかとした。



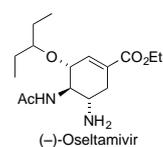
Woo-Jin Yoo (public research) A heterogeneous material composed of Au/Pd nanoparticles and chiral phosphoric acids was prepared and evaluated as a bifunctional catalyst for the sequential aerobic oxidation-asymmetric intramolecular aza-Friedel-Crafts reaction between benzyl alcohols and N-aminoethylpyrroles.



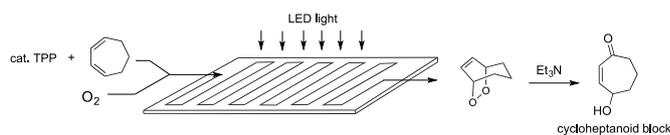
【A03 班：有機分子触媒による実践的有用物質合成】

A03 班では、有機分子触媒を用いることにより、実践的な有用物質合成を行うことを主たる研究目的とし、有機分子触媒反応の医薬品・天然物合成への展開、ポリマー合成への展開等の研究を行っている。異なるバックグラウンドを有する研究者が集結し、A01、A02 班が開発した触媒あるいは反応を、有用化合物の合成に応用する共同研究、および反応機構・遷移状態を計算化学的に解明するため、A01 班の理論化学者との共同研究が進展している。これまで本領域内における共同研究が 2 件、領域外の共同研究が 2 件行われており、共同研究を通して、着実な成果が上がっている。以下に述べるように、有機触媒を鍵反応とする天然物、医薬品、ポリマーの合成がいくつか達成されている。また天然物・医薬品の有用な合成中間体の合成が有機触媒を用いることにより、効率的に行われている。

林 雄二郎 (計画研究) 我々は独自に開発した diphenylprolinol silyl ether の有用化合物の全合成への展開を検討している。これまで 3 ポットでのタミフルの全合成を報告していたが、今回 1 つの反応容器だけで全合成を行う究極的な one-pot 合成を達成した。また diarylprolinol 触媒を開発し、多くの不斉アルドール反応に展開した。なお、ETH の Seebach 教授 (領域外) と共同研究を行っている。

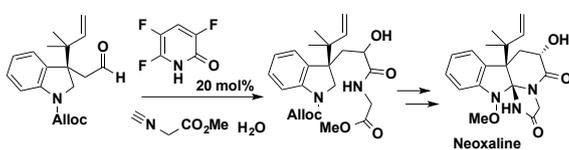


岩淵 好治 (計画研究) 一重項酸素と環状ジエンの付加環化によるビシクロ型エンドペルオキシドの安全な生成と迅速な異性化を鍵とする γ -ヒドロキシエノンの大量合成法を開発を目指して、デク



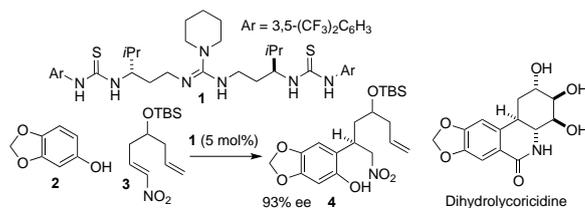
セリアルズ株式会社と共同研究 (領域外) を行い、ガラスフローセルリアクターを用いた光反応プロセスの確立に成功し、シクロヘプタノイド合成素子の試薬販売を実現した。

砂塚 敏明 (計画研究) 3,5,6-トリフルオロ-2-ピリドンが、イソシアニドのアルデヒドへの α 付加反応を触媒し、対応する α -ヒドロキシアミド体を良好に与えることを見出した。本反応を利用し、北里研究所で発見した特異なインドリン

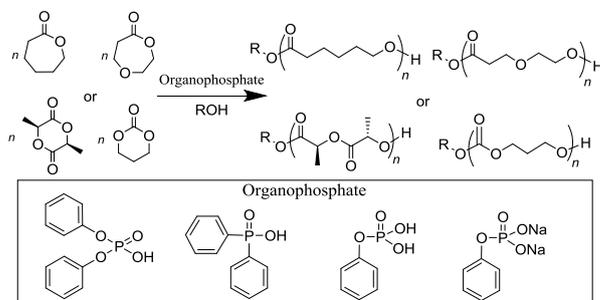


スピロアミナル骨格を有する Neoxaline の初の全合成を達成した。

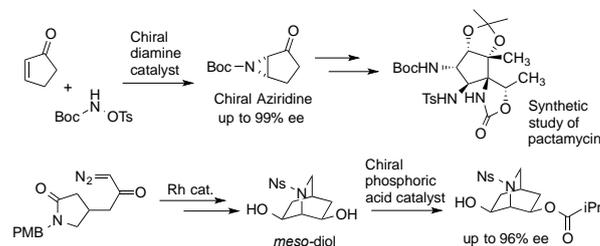
長澤 和夫 (計画研究) グアニジン-チオウレ型有機触媒 **1** を用いたフェノールとニトロアルケンによるエントロピー制御型 Friedel-Crafts 反応を基盤として、dihydrolycoricidine の不斉全合成を達成した。なお本反応の遷移状態について、山中 正浩 教授 (A01 班) との共同研究により明らかにした。



佐藤 敏文 (公募研究) 有機リン酸誘導体を触媒に用いた環状エステル類および環状カーボネート類の開環重合系を開発し、環境低負荷かつクリーンな新規重合触媒系を社会に提供した。本重合はリビング重合機構で進行し、得られる高分子の分子量分散度が狭く、また、分子量の調整も容易であることから、環境低負荷なプロセスでの高分子合成に寄与する。

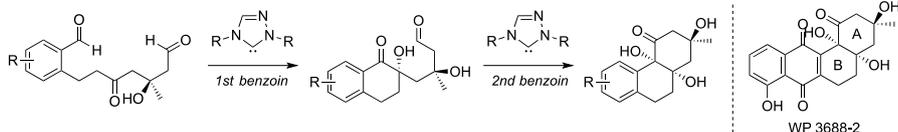


根本 哲宏 (公募研究) 環状エノンおよびエナールを原料とする高選択的触媒的不斉アジリジン化反応の開発に成功した。本反応を応用することで、(R)-Sumanirole、(-)-Allosamizoline の不斉合成、Pactamycin 合成中間体の不斉合成研究を行った。また、Rh カルベノイドのアミド挿入反応を経由して得られる meso-ジオールのキラルリン酸触媒を利用した非対称化反応について 山田 健一 准教授 (A01 班) と共同研究を行なっている。



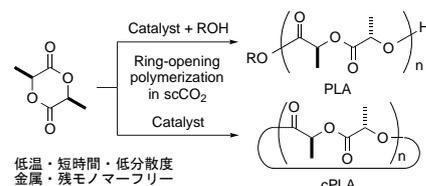
瀧川 紘 (公募研究) 当研究室

で開発されたケトアルデヒドのベンゾイン環化反応を、ケトジアルデヒド、もしくはその等価

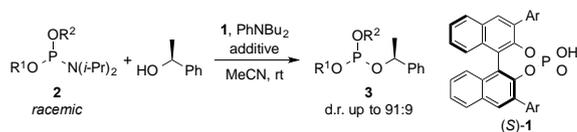


体に対して連続的に2回行うことにより、WP 3688-2 のように AB 環が酸化的に脱芳香化されたアンギュサイクリノン類の部分骨格を迅速に構築することに成功した。

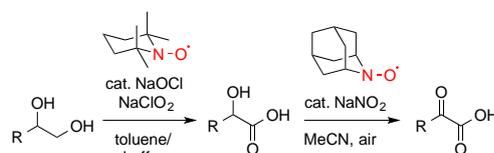
間瀬 暢之 (公募研究) 超臨界二酸化炭素 (scCO₂) ならびに有機分子触媒を活用した環境調和性が高い手法による高純度・高光学純度の鎖状 (PLA) ならびに環状ポリ乳酸 (cPLA) 合成を達成した。本手法は省エネルギー、安全性・生産性・品質向上、VOC 規制対応、エピメリ化の抑制など、従来法にない利点を有しており、ポリ乳酸製造プロセスへの実用化・工業化ならびに DDS などへの応用が期待される。



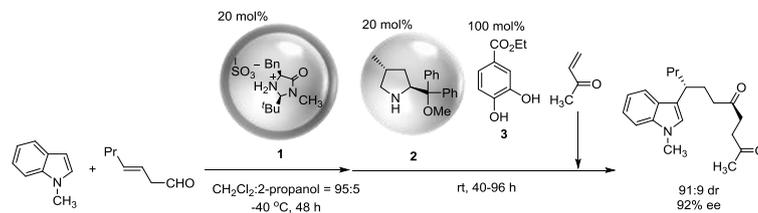
岡 夏央 (公募研究) ビナフチルリン酸触媒 **1** の存在下、ラセミ体のホスホロアミダイト **2** とアルコールから P-キラル亜リン酸トリエステル **3** を高立体選択的に得る手法を開発した。



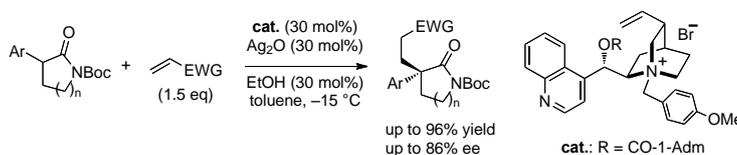
澁谷 正俊 (公募研究) 有機ニトロキシラジカル型酸化触媒による 1,2-ジオールから α -ヒドロキシカルボン酸の化学選択的酸化反応および α -ヒドロキシカルボン酸から α -ケトカルボン酸への化学選択的酸化反応の開発に成功した。前者の反応では、電荷移動錯体 TEMPO-ClO₂ が選択性に重要な役割を果たしていることを明らかにした。



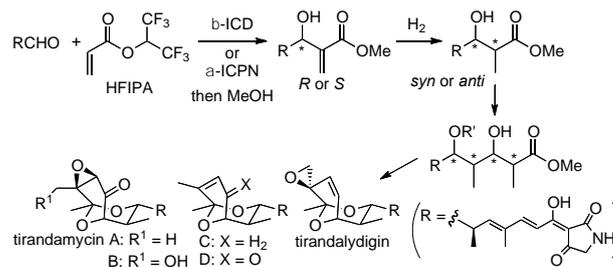
原口 直樹 (公募研究) 複数の高分子微粒子固定化キラル有機分子触媒による光学活性化合物のワンポット反応系の開発に成功した。



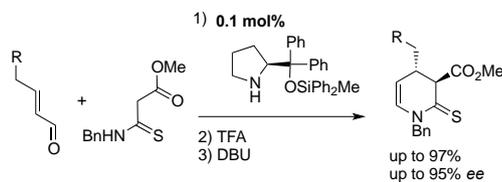
小槻 日吉三 (公募研究) シンコナルカロイド系第四級アミンを不斉触媒として、 α -アリーララクタム類の不斉 Michael 付加反応を開発、それを利用した第四級不斉炭素含有アルカロイド(+)-mesembrine の短工程での不斉全合成を達成した。



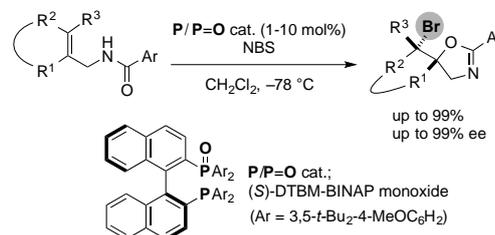
畑山 範 (公募研究) 不斉森田-Baylis-Hillman 反応と *syn*-および *anti*-選択的水素化とを組み合わせたポリプロピオナート単位の立体制御構築法を開発し、重篤な身体障害を引き起こす感染症であるリンパ性フィラリア症治療薬開発などのリードとして期待されるチランダマイシン天然物の網羅的不斉全合成に成功した。



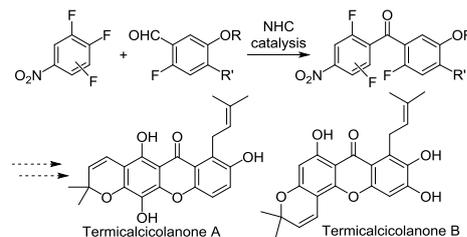
石川 勇人 (公募研究) 天然に存在する 4-アルキルピペリジン環構造を持つアルカロイド類の効率的全合成のため、ジフェニルプロリノールシリルエーテル触媒を用いた形式的アザ[3+3]付加環化反応の開発を行った。本反応では、必要とする触媒量はわずか 0.1 モル%であり、目的とする光学活性ピペリジン化合物を高収率かつ高エナンチオ選択的に得ることができる。



濱島 義隆 (公募研究) P/P=O 型ダブルサイト Lewis 塩基を触媒として用いる、アリルアミドの高立体選択的な不斉ブロモ環化反応を開発し、不斉四置換炭素を含むキラルオキサゾリンの効率的合成に成功した。



鈴木 由美子 (公募研究) 有機分子触媒反応を鍵反応として利用する、抗がん活性あるいは抗菌活性を持つポリフェノール型キサントン類天然物の合成研究を行った。NHC 触媒反応によりベンゾフェノン中間体を合成し、その後の分子変換により、目的天然物の基本骨格であるピラノキサントンの構築に成功した。Termicalcicolanone B に関しては、全合成を達成した。



6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

- 論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に*印を付してください。
- 別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。
- 補助条件に定められたとおり、本研究課題に係り交付を受けて行った研究の成果であることを表示したもの（論文等の場合は謝辞に課題番号を含め記載したもの）について記載したもののについては、冒頭に▲を付してください（前項と重複する場合は、「◎▲・・・」と記載してください）。
- 一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

【新学術領域全体としての研究成果公表状況】

○ホームページ

本新学術領域発足当初の平成23年9月より以下のサイトにホームページを立ち上げ、積極的に国内外に領域の紹介とアクティビティを示した。

<http://www.organocatalysis.jp/>

○主催シンポジウム・会議等

- キックオフミーティング [非公開] (平成23年9月17日：東京理科大学・神楽坂キャンパス)
- 第1回 公開シンポジウム [公開] (平成24年1月21日：仙台・TKP ガーデンシティ仙台)
- 第1回 全体会議 [公開] (平成24年6月8日－9日：京都大学・吉田キャンパス・薬学部構内)
- 第1回 有機分子触媒 若手セミナー [非公開] (平成24年9月8日－9日：那須・ラフォーレ那須)
- 第2回 公開シンポジウム [公開] (平成24年10月26日－27日：学習院大学・目白キャンパス)
- First International Conference on Organocatalysis [公開] (平成25年5月27日－28日：大津・大津プリンスホテル)
- 第2回 有機分子触媒 若手セミナー [非公開] (平成25年9月14日－15日：ラフォーレ倶楽部 伊東温泉 湯の庭)
- 合同シンポジウム - 日本プロセス化学会 2013 ウィンターシンポジウム・第3回公開シンポジウム - (平成25年11月28日－29日：仙台市 仙台市民会館)
- 第4回 公開シンポジウム (分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム) [公開] (平成26年6月20日－21日：北海道大学・学術交流会館)
- 第3回 有機分子触媒 若手セミナー [非公開] (平成26年9月6日－7日：玄海ロイヤルホテル)
- Second International Conference on Organocatalysis [公開] (平成26年11月21日－22日：東京大学 伊藤国際学術研究センター「伊藤謝恩ホール」)
- 第5回 公開シンポジウム [公開] (平成27年5月10日－5月11日：沖縄県市町村自治会館・自治会館ホール)
- 第4回 有機分子触媒 若手セミナー [非公開] (平成27年10月3日－4日：名古屋金山研修センター)
- 第6回 公開シンポジウム [公開] (平成28年1月22日－1月23日：(一財)大阪科学技術センター)

表1. 主催シンポジウム・会議 [公開] の参加者内訳

主催シンポジウム・会議名 [公開]	企業 詳細表2	大学関係	ポスドク ・学生	計
(2) 第1回 公開シンポジウム	17	71	103	191
(3) 第1回 全体会議	25	91	78	194
(5) 第2回 公開シンポジウム	35	77	79	191
(6) First International Conference on Organocatalysis	22	77	71	170
(8) 合同シンポジウム -日本プロセス化学会2013ウィンターシンポジウム・第3回 公開シンポジウム-	189	94	92	375

(9) 第4回 公開シンポジウム -分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム-	11	88	77	176
(11) Second International Conference on Organocatalysis	17	90	113	220
(12) 第5回 公開シンポジウム	11	93	37	141
(14) 第6回 公開シンポジウム	30	96	46	172

表2. 表1に記載のシンポジウム・会議への企業参加者所属一覧

アクティブファーマ(株)	アグロカネショウ(株)	あすか製薬(株)	アステラス製薬(株)
アスピオファーマ(株)	旭化成ケミカルズ(株)	旭化成ファーマ(株)	味の素(株)
イハラケミカル工業(株)	稲畑産業(株)	石原産業(株)	宇部興産(株)
(株)エーピーアイコーポレーション	(株)エースジャパン	エア・ウォーター(株)	エア・ブラウン(株)
エーザイ(株)	(株)大阪合成有機化学研究所	オーダ化成(株)	小野薬品工業(株)
大原薬品工業(株)	大塚製薬(株)	(株)カネカ	(株)片山製薬所
科研製薬(株)	川研ファインケミカル(株)	キッセイ薬品工業(株)	杏林製薬(株)
協和発酵キリン(株)	協和発酵バイオ(株)	(株)ケミクレア	興和(株)
金剛化学(株)	(株)三和化学研究所	(独)産業技術総合研究所	佐藤製薬(株)
CMC 研究センター	塩野フィネス(株)	四国化成工業(株)	昭和電工(株)
JCMA	十全化学(株)	住友化学(株)	高砂香料工業(株)
大正製薬(株)	田辺三菱製薬(株)	武田薬品工業(株)	大日本住友製薬(株)
第一ファインケミカル(株)	第一三共(株)	中外製薬(株)	帝人ファーマ(株)
トーアエイヨー(株)	東ソー有機化学(株)	東レ(株)	東京化成工業(株)
東京理器器械(株)	富山化学工業(株)	東洋合成工業(株)	ナードケミカルズ(株)
ナミキ商事(株)	日光ケミカルズ(株)	日産化学工業(株)	日宝化学(株)
日本ゼオン(株)	日本たばこ産業(株)	日本マイクロバイオファーマ(株)	日本軽金属(株)
日本曹達(株)	日本農薬(株)	日本理化学工業(株)	浜理薬品工業(株)
(株)パーマケムアジア	BASF ジャパン(株)	(株)伏見製薬所	藤本化学製品(株)
富士フイルム(株)	福寿製薬(株)	北興化学工業(株)	三井化学アグロ(株)
三菱化学(株)	三菱商事(株)	Meiji Seika ファルマ(株)	(株)ヤクルト
有機合成薬品工業(株)	渡辺化学工業(株)	和光純薬工業(株)	

○共催・協賛シンポジウム・会議等

- (1) 第4回 有機触媒シンポジウム(平成23年9月17日:東京理科大学・神楽坂キャンパス)[参加者:213名(内訳:一般62名、ポスドク・学生151名)]
- (2) First Germany-Japan Organocatalytic Symposium(平成23年10月14日-15日:京都大学・吉田キャンパス)
- (3) International Mini-Symposium on Organocatalysis(平成23年10月17日:学習院大学・目白キャンパス)
- (4) 日本化学会関東支部・講演会「進化する有機分子触媒-その最先端と展望-」(平成24年8月31日:東京・日本化学会館)
- (6) First Japan-USA Organocatalytic Symposium(平成24年12月15日-18日:Honolulu, USA・Prince Hotel Waikiki)[参加者:66名(内訳:USA13名、日本大学関係42名、ポスドク・学生11名)]
- (7) 日本化学会第93春季年会・特別企画「有機分子触媒の最先端」(平成25年3月25日:立命館大学・びわこ・草津キャンパス)
- (8) UK/Japan Conference in Catalytic Asymmetric Synthesis(平成25年4月19日-20日:仙台・仙台国際センター)[参加者:240名(内訳:UK9名、一般60名、ポスドク・学生171名)]
- (9) 日本化学会第94春季年会・特別企画「進化する有機分子触媒」(平成26年3月27日:名古屋大学・東山キャンパス)
- (10) 日本化学会第95春季年会・特別企画「有機分子触媒の最前線」(平成27年3月27日:名古屋大学・東山キャンパス)
- (11) 第39回 内藤コンファレンス「The Chemistry of Organocatalysts」(国際会議:平成27年7月6日-9日:札幌・シャトレーゼ ガトーキングダム サッポロ)

- (12) IUPAC 2015 Molecular Synthesis Symposia (平成 27 年 8 月 09 日－14 日 : Busan, Korea・BEXCO)
- (13) Pacificchem 2015 #122 Recent trends on Organocatalysis (平成 27 年 12 月 15 日－20 日 : Honolulu, USA・Hilton Hawaiian Village, South Pacific II)
- (14) 日本化学会第 96 春季年会・コラボレーション企画「未来を創る有機分子触媒」(平成 28 年 3 月 26 日 : 同志社大学・京田辺キャンパス)

【各班員の研究成果公表状況】

○学術論文等

本領域から公表された学術論文等について表 3 にまとめる。これらのうち代表的な原著論文を研究項目ごとに計画研究、公募研究の順にまとめて次頁に示す。

表 3. 班員より公表された学術論文・特許数一覧

	A01 班	A02 班	A03 班	領域全体
原著論文	477	539	396	1412 (-107)*
著書	36	60	36	132
総説・解説	56	49	47	152
特許	12	58	15	85
合計	581	706	494	1781 (-107)*

*領域内共同研究による重複論文 (69 件) ならびにプロモーションに伴う連名論文 (38 件) による重複分を差し引いた。

○主な原著論文

以下の論文は全て謝辞(Acknowledgment)に「This work was (partially) supported by a Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Areas “Advanced Molecular Transformations by Organocatalysts” from The Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT), Japan」を記載している。

<A01 班・計画研究>

- "Enantioselective Aza Michael-Type Addition to Alkenyl Benzimidazoles Catalyzed by a Chiral Phosphoric Acid"
Wang, Y.Y.; Kanomata, K.; Korenaga, T.; *Terada, M.
Angew. Chem. Int. Ed. **2016**, 55 (3), pp.927-931.
- Synergistic Catalysis of Ionic Brønsted Acid and Photosensitizer for a Redox Neutral Asymmetric α -Coupling of *N*-Arylaminomethanes with Aldimines"
Daisuke Uraguchi, Natsuko Kinoshita, Tomohito Kizu, and *Takashi Ooi
J. Am. Chem. Soc. **2015**, 137 (43) pp.13768-13771.
- "Mechanistic Studies of Highly Enantio- and Diastereoselective Aza-Petasis-Ferrier Rearrangement Catalyzed by Chiral Phosphoric Acid"
*Terada, M.; Komuro, T.; Toda, Y.; Korenaga, T.
J. Am. Chem. Soc. **2014**, 136 (19), pp.7044-7057.
- "Secondary Stereocontrolling Interactions in Chiral Brønsted Acid Catalysis: Study of a Petasis-Ferrier-Type Rearrangement Catalyzed by Chiral Phosphoric Acids"
Kanomata, K.; Toda, Y.; Shibata, Y.; Yamanaka, M.; Tsuzuki, S.; Gridnev, I. D.; *Terada, M.
Chem. Sci. **2014**, 5 (9), pp.3515-3523.
- "Double C(sp³)-H Bond Functionalization Mediated by Sequential Hydride Shift/Cyclization Process: Diastereoselective Construction of Polyheterocycles"
Mori, K.; Kurihara, K.; Yabe, S.; Yamanaka, M.; *Akiyama, T.
J. Am. Chem. Soc. **2014**, 136 (10), pp.3744-3747.

<A01 班・公募研究>

- "Sequential Mukaiyama-Michael reaction induced by carbon acids"
*Yanai, H.; Kobayashi, O.; Takada, K.; Isono, T.; Satoh, T.; *Matsumoto, T.
Chem. Commun. **2016**, 52 (16), pp.3280-3283.
- " Proton Transfer Mechanism of Organocatalyzed Isomerization of Alkynoates into Allenates: Enantioselectivity

and Reversibility. A DFT Study "

Xiao, H.; Kobayashi, Y.; Takemoto, Y.; *Morokuma, K.

ACS Catal. **2016**, 6 (5), pp.2988-2996.

- (8) "Imidazolium Salt-Catalyzed Friedel–Crafts-Type Conjugate Addition of Indoles: Analysis of Indole/Imidazolium Complex by High Level ab Initio Calculations"

Narumi, T.; Tsuzuki, S.; *Tamamura, H.

Asian J. Org. Chem **2014**, 3 (4), pp.497-503.

- (9) "Helically Chiral Diene in Asymmetric Catalysis: C₂-Symmetric (Z,Z)-2,3-Bis[1-(diphenylphosphinyl)ethylidene]tetralin as Highly Active Lewis-Base Organocatalyst"

*Ogasawara, M.; Kotani, S.; Nakajima, H.; Furusho, H.; Miyasaka, M.; Shimoda, Y.; Wu, W.-Y.; Sugiura, M.; *Takahashi, T.; *Nakajima, M.

Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, 52 pp.13798-13802.

- (10) "Tetraalkylammonium-Templated Stereoselective Norrish-Yang Cyclization"

*Yamada, S.; Iwaoka, A.; Fujita, Y.; Tsuzuki, S.

Org. Lett. **2013**, 15 (23), pp.5994-5997.

<A02 班・計画研究>

- (11) "Iodoarene-Catalyzed Fluorination and Aminofluorination by an Ar-I/HF•pyridine/mCPBA System"

Suzuki, S.; Kamo, T.; Fukushi, K.; Hiramatsu, T.; Tokunaga, E.; Dohi, T.; *Kita, Y.; *Shibata, N.

Chem. Sci. **2014**, 5 (7), pp.2754-2760.

- (12) "Synthesis and Characterization of Binary-Complex Models of Ureas and 1,3-Dicarbonyl Compounds: Deeper Insights into Reaction Mechanisms Using Snap-Shot Structural Analysis"

Azuma, T.; Kobayashi, Y.; Sakata, K.; Sasamori, T.; Tokitoh, N.; *Takemoto, Y.

J. Org. Chem. **2014**, 79 (4), pp.1805-1817.

- (13) "Investigation of the Carboxylate Position during the Acylation Reaction Catalyzed by Biaryl DMAP Derivatives with an Internal Carboxylate "

Nishino, R.; *Furuta, T.; Kan, K.; Sato, M.; Yamanaka, M.; Sasamori, T.; Tokitoh, N.; *Kawabata, T.

Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, 52 (25), pp.6445-6449.

- (14) © "Organocatalytic deprotonative functionalization of C(sp²)-H and C(sp³)-H bonds using in situ generated onium amide bases"

*Inamoto, K.; Okawa, H.; Taneda, H.; Sato, N.; Hirono, Y.; Yonemoto, M. Kikkawa, S.; *Kondo, Y.

Chem. Commun. **2012**, 48 (78), pp.9771-9773.

<A02 班・公募研究>

- (15) "Enantioselective acyl transfer catalysis by a combination of common catalytic motifs and electrostatic interactions"

*Mandai, H.; Fujii, K.; Yasuhara, H.; Abe, K.; Mitsudo, K.; Korenaga, T.; *Suga, S.

Nat. Commun. **2016**, 7 pp.11297.

- (16) "Visible Light-Mediated Aromatic Substitution Reactions of Cyanoarenes with 4-Alkyl-1,4-dihydropyridines via Dual Carbon-Carbon Bonds Cleavage"

Nakajima, K.; Nojima, S.; Sakata, K.; *Nishibayashi, Y.

ChemCatChem. **2016**, 8 (6), pp.1028-1032.

- (17) "An enantioselective organocatalyzed aza-Morita–Baylis–Hillman reaction of isatin-derived ketimines with acrolein"

Yoshida, Y.; Sako, M.; Kishi, K.; Sasai, H.; Hatakeyama, S.; *Takizawa, S.

Org. Biomol. Chem. **2015**, 13 (34), pp.9022-9028.

- (18) "Catalytic Asymmetric Iodocyclization of N-Tosyl Alkenamides using Aminoiminophenoxy Copper Carboxylate: A Concise Synthesis of Chiral 8-Oxa-6-Azabicyclo[3.2.1]octanes."

*Arai, T.; Watanabe, O.; Yabe, S.; Yamanaka, M.

Angew. Chem. Int. Ed. **2015**, 54 pp.12767-12771.

- (19) "Ruthenium–Triggered Ring-Opening of Ethynylcyclopropanes: [3+2] Cycloaddition with Aldehydes and Aldimines Involving Metal–Allenylidene Intermediates"

Miyake, Y.; Endo, S.; Moriyama, T.; Sakata, K.; *Nishibayashi, Y.

Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, 52 (6), pp.1758-1762.

<A03 班・計画研究>

- (20)◎"Organocatalytic Site-Selective Acylation of Avermectin B2a, a Unique Endectocidal Drug"
Yamada, T.; Suzuki, K.; Hirose, T.; Furuta, T.; Ueda, Y.; Kawabata, T.; Ōmura, S.; *Sunazuka, T.
Chem. Pharm. Bull. **2016**, *in press* DOI: 10.1248/cpb.c16-00205.
- (21)"Origin of stereocontrol in guanidine-bisurea bifunctional organocatalyst that promotes α -hydroxylation of tetralone-derived β -ketoesters: Asymmetric synthesis of β - or γ -substituted tetralone derivatives via organocatalytic oxidative kinetic resolution"
Odagi, M.; Furukori, K.; Yamamoto, Y.; Sato, M.; Iida, K.; Yamanaka, M.; *Nagasawa, K.
J. Am. Chem. Soc. **2015**, *137* (5), pp.1909-1915.
- (22)◎"Highly Chemoselective Aerobic Oxidation of Amino Alcohols into Amino Carbonyl Compounds"
Sasano, Y.; Nagasawa, S.; Yamazaki, M.; Shibuya, M.; Park, J. W.; *Iwabuchi, Y.
Angew. Chem. Int. Ed. **2014**, *53* (12), pp.3236-3240.
- (23)"Organocatalytic, Enantioselective Intramolecular [6+2] Cycloaddition Reaction for the Formation of Tricyclopentanoids and Insight on Its Mechanism from a Computational Study"
*Hayashi, Y.; Gotoh, H.; Honma, M.; Sankar, K.; Kumar, I.; Ishikawa, H.; Konno, K.; Yui, H.; Tsuzuki, S.; *Uchamaru, T.
J. Am. Chem. Soc. **2011**, *133* (50), pp.20175-20185.

<A03 班・公募研究>

- (24)◎ "Binaphthol-derived phosphoric acids as efficient chiral organocatalysts for the enantiomer-selective polymerization of *rac*-lactide"
Makiguchi, K.; Yamanaka, T.; Kakuchi, T., *Terada, M., *Satoh, T.
Chem. Commun. **2014**, *50* (22), pp.2883-2885.
- (25)◎ "Fluorogenic aldehydes bearing arylethynyl groups: turn-on aldol reaction sensors for evaluation of organocatalysis in DMSO"
*Mase, N.; Ando, T.; Shibagaki, F.; Sugita, A.; Narumi, T.; Toda, M.; Watanabe, N.; Tanaka, F.
Tetrahedron Lett. **2014**, *55* (11), pp.1946-1948.
- (26)◎ "Synthesis of Cinchona Alkaloid-derived Chiral Polymers by Mizoroki-Heck Polymerization and Their Application to Asymmetric Catalysis"
Parvez, M. M.; Haraguchi, N.; *Itsuno, S.
Macromolecules **2014**, *47* (6), pp.1922-1928.
- (27)◎"Total Synthesis of Marinomycin A Based on a Direct Dimerization Strategy"
Nishimaru, T.; Kondo, M.; Takeshita, K.; Takahashi, K.; Ishihara, J.; *Hatakeyama, S.
Angew. Chem. Int. Ed. **2014**, *53* (32), pp.8459-8462.
- (28)◎"Efficient Organocatalytic Construction of C4-Alkyl Substituted Piperidines and Their Application to the Synthesis of (+)- α -Skytanthine"
Shiomi, S.; Sugahara, E.; *Ishikawa, H.
Chem. Eur. J. **2015**, *21* (42), pp.14758-14763.
- (29)◎"Asymmetric Fluorolactonization with a Bifunctional Hydroxyl Carboxylate Catalyst"
Egami, H.; Asada, J.; Sato, K.; Hashizume, D.; Kawato, Y.; *Hamashima, Y.
J. Am. Chem. Soc. **2015**, *137* pp.10132-10135.

○主な特別講演・受賞講演・招待講演・依頼講演等

表 4. 班員による講演・講師等

	A01 班	A02 班	A03 班	領域全体
国際会議あるいは海外での特別講演・招待講演・依頼講演等	254	122	166	542
国内学会(日本語)における特別講演・招待講演・依頼講演等	113	90	91	294
学会主催の講習会等での講師	23	17	14	54
他大学への集中講義・非常勤講師 (主な派遣先は表 5)	37	56	18	111
企業での講演 (主な派遣先は表 6)	21	17	21	59
合計	448	302	310	1060

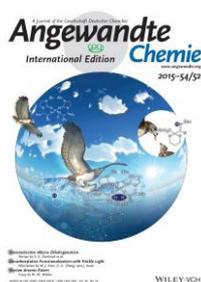
表 5. 大学への集中講義・非常勤講師等派遣先大学一覧

東北大学	富山大学	新潟大学	埼玉大学
千葉大学	筑波大学	東京大学	東京工業大学
東京農工大学	名古屋大学	名古屋工業大学	京都大学
大阪大学	愛媛大学	高知大学	徳島大学
九州大学	熊本大学	長崎大学	首都大学東京
大阪市立大学	静岡県立大学	岐阜薬科大学	名古屋市立大学
東北薬科大学	学習院大学	中央大学	東京理科大学
東邦大学薬学部	日本大学	法政大学	明治薬科大学
立教大学	早稲田大学	静岡理工科大学	名城大学
大阪薬科大学	京都薬科大学	岡山理科大学	

表 6. 企業での講演、派遣先一覧

アステラス製薬 (株)	大塚製薬 (株)	関東化学 (株)	相模中央化学研究所
住友化学 (株)	ソニー (株)	第一三共 (株)	田辺三菱製薬 (株)
中外製薬 (株)	東レ (株)	(株) 豊田中央研究所	トヨタ自動車 (株)
名古屋市工業研究所	日産化学工業 (株)	浜理薬品工業 (株)	微生物化学研究センター
三井化学 (株)	持田製薬 (株)	理化学研究所	

○学術論文のカバーピクチャー (他 14 件)



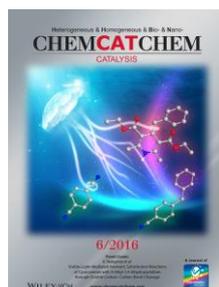
(A01 班)
寺田 眞浩ら



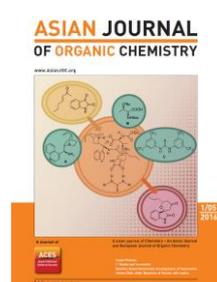
(A01 班)
浦口 大輔ら



(A01 班)
加納 太一ら



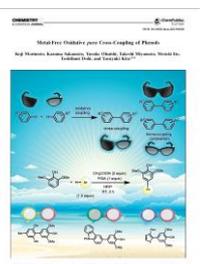
(A01 班)
坂田 健ら



(A01 班)
田中 富士枝ら



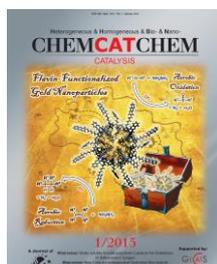
(A01 班)
波多野 学ら



(A02 班)
北 泰行ら



(A02 班)
雨夜 徹ら



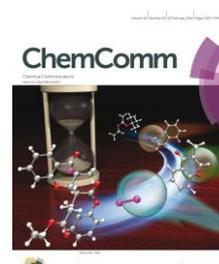
(A02 班)
今田 泰嗣ら



(A02 班)
工藤 一秋ら



(A02 班)
柴田 哲男ら



(A02 班)
矢内 光ら

【アウトリーチ活動】

○出前授業、サイエンスカフェ、オープンキャンパス、体験学習などでの研究紹介

本領域のアウトリーチ活動について表 7 にまとめる。これらの活動を通じて高校生ならびに一般の方に対して広く本領域の重要性と意義を理解いただけるよう努力している。なお、これらのうち代表的な活動を以下に列記する。

表 7. 出前授業、サイエンスカフェ、オープンキャンパス、体験学習などでの紹介

	件数
一般向け講演会（公開講座など）	38
小学校、中学校、高等学校などへの出前授業・体験学習などを通じた研究紹介	120
サイエンスカフェにて研究紹介	7
イベント参加・出展（オープンキャンパスにて研究紹介）	23
合計	188

<主なアウトリーチ活動>

- (1) 高校への出前講義「秋田県立本荘高等学校：欲しいものだけを作る化学：有機化合物を立体選択的に作る方法論」由利本荘市 寺田 眞浩（A01 班）
- (2) 高校への出前講義「岡山県立倉敷天城高等学校：科学者を目指す高校生に期待すること」倉敷市 秋山 隆彦（A01 班）
- (3) 小中高生一般向け体験学習「おもしろワクワク化学の世界'13 徳島化学展」徳島市 今田 泰嗣（A01 班）
- (4) 第 5 回科学の甲子園大会島根県予選大会「有機物質の化学—分子の形と機能」出雲市 飯田 拓基（A01 班）
- (5) 科学技術振興機構「女子中高生の理系進路選択支援プログラム：第 9 回女子中高生のための関西科学塾」大阪市 植田光洋（A01 班）
- (6) 一般向け公開講座「夢ナビライブ 2015 仙台：進行しない反応を進行させる触媒の不思議」仙台市 是永敏伸（A01 班）
- (7) 夢化学 21「化学への招待：高校生のための岡山大学化学系見学会と談話会」岡山市 坂倉 彰（A01 班）
- (8) 一般向け公開講座「やさしい科学技術セミナー：化学合成品は天然由来品と何が違うのか」神戸市 松原 亮介（A01 班）
- (9) 高校生向け体験型学習「科学への誘いセミナー：バラの香りがレモンに変わる」東京都 山田眞二（A01 班）
- (10) 小学生高学年向け体験学習「旭川しんきん旭川高専 ジョイントサマースクール：算数と理科の世界を広げよう！」旭川市 吉田 雅紀（A01 班）
- (11) 一般向け公開講座「有機微量分析ミニサロン：有機分子触媒って何の役に立つの？」京都市 竹本 佳司（A02 班）
- (12) 一般向け公開講座「2013 年度立命館大阪オフィス講座：新薬づくりの夢～大学から挑戦する創薬のロマン～」大阪市 北 泰行（A02 班）
- (13) 一般向け体験・公開講座「夢科学探検：鏡の国の科学～キラル分子生命科学への招待～」熊本市 入江 亮（A02 班）
- (14) 高校生向け体験学習「滋賀県立膳所高等学校スーパーサイエンススクール：高大連携 Dr. 講座」大津市 小林祐輔（A02 班）
- (15) 高校への出前講義「兵庫県立柏原高等学校：人の力で有機化合物をどうやってつくるか？」丹波市 菅 誠治（A02 班）
- (16) サイエンスカフェ「産研サイエンスカフェ：薬と毒は紙一重？～分子と握手しよう～」茨木市 滝澤 忍（A02 班）
- (17) オープンキャンパス「長崎大学オープンキャンパス：アミノ酸、ペプチドとその有機触媒としての利用」長崎市 田中 正一（A02 班）
- (18) 一般向け公開講座「イブニング技術交流サロン：創薬化学～天然物に医薬シーズを求めて～」富山市 松谷 裕二（A02 班）
- (19) 高校への出前講義「栃木県立宇都宮女子高等学校：みんな化学でできている」宇都宮市 矢島 知子（A02 班）
- (20) 高校への出前講義「福島県立会津高等学校：化学は世界を変える」会津若松市 林 雄二郎（A03 班）
- (21) サイエンスカフェ「東北大学サイエンスカフェ：カレーの成分クルクミンが先導する創薬研究」仙台市 岩渕 好治（A03 班）
- (22) 一般向け公開講座「武蔵野市民講座「身近な最先端科学シリーズ」：資源や環境に配慮した未来のモノづくり」武蔵野市 長澤 和夫（A03 班）

- (23) オープンキャンパス「北里大学オープンキャンパス：天然物からの創薬研究について」東京都 砂塚 敏明 (A03 班)
- (24) 高大連携化学系フォーラム「大学で研究するということー感動との出会いを求めて」高知市 小槻日吉三 (A03 班)
- (25) サイエンスカフェ「資生堂サイエンスカフェ in 上智大学：化学のワクワク☆ドキドキをのぞいてみよう！～私が科学者になったワケ」東京都 鈴木由美子 (A03 班)
- (26) オープンキャンパス「豊橋技術科学大学オープンキャンパス：身の回りの不斉分子を学ぼう 2012」豊橋市 原口 直樹 (A03 班)
- (27) サイエンスカフェ in 浜松「静岡県から発信する環境調和型モノづくり」浜松市 間瀬 暢之 (A03 班)

○所属機関公式サイトや広報誌による研究者紹介ならびに産学連携向けに研究内容の紹介

所属機関公式 Web サイトや広報誌に下記の内容が紹介された。

研究者紹介記事が掲載された：	18 件
産学連携向けに研究内容が紹介された：	23 件
プレスリリース：	22 件

<主な報道・Web 掲載記事ならびに放送番組出演>

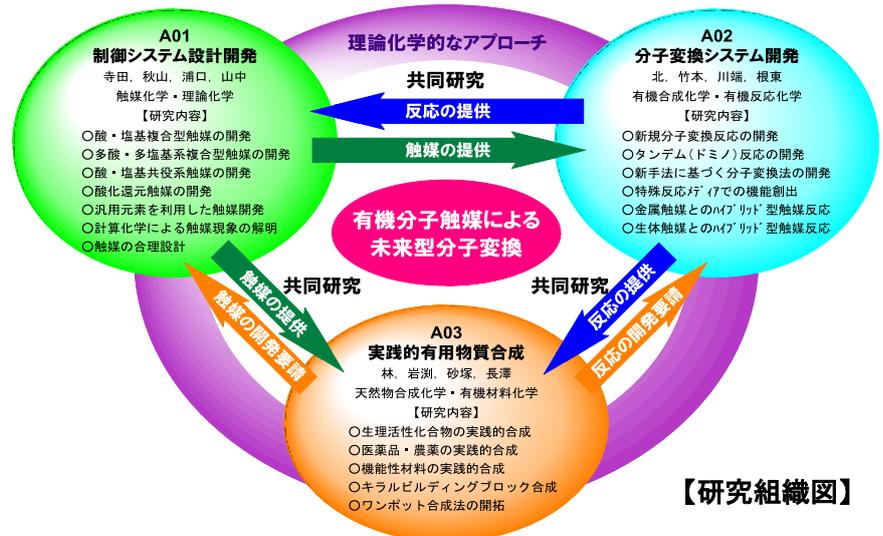
- (1) 平成 23 年 11 月 1 日 選択 「日本の科学アラカルト その最前線ー日本で産出される数少ない資源利用価値が注目されるヨウ素」北 泰行(A02 班)
- (2) 平成 24 年 2 月 17 日 化学工業日報 「金属触媒用いず低温重合」間瀬 暢之 (A03 班)
- (3) 平成 24 年 6 月 5 日 岐阜新聞 「核酸医薬の開発、工学部から」岡 夏央 (A03 班)
- (4) 平成 24 年 6 月 30 日 資生堂プレスリリース 「有機触媒反応を用いた医薬品候補化合物の合成」鈴木 由美子 (A03 班)
- (5) 平成 24 年 6 月 30 日 'Organic Chemistry Portal' web site 「 μ -Oxo bridged hypervalent iodine compound as extreme oxidant for aqueous oxidations (*Synthesis* **2012**, *44* (8), 1183.)」北 泰行ら(A02 班)
- (6) 平成 24 年 7 月 24 日 日刊工業新聞 「名古屋工大、フッ素を含む農薬・動物医薬原料ー有機触媒で効率合成」柴田 哲男 (A02 班)
- (7) 平成 25 年 3 月 4 日 日刊工業新聞 「名古屋工大、フッ素樹脂副産物フルオロホルムー医薬・液晶向け活用」柴田 哲男 (A02 班)
- (8) 平成 25 年 3 月 22 日 薬事日報 「窒素原子隣接位から炭素骨格を伸ばす触媒反応」金井 求ら (A02 班)
- (9) 平成 25 年 5 月 19 日 FM ラジオ広報「天伯之城 ギカダイ」出演 「未来を拓く新しい触媒」原口 直樹 (A03 班)
- (10) 平成 25 年 5 月 27 日 'Nature communications' web site 「注目の論文：アキラル成分を用いた 2 回らせん水素結合ネットワークにおける分子キラリティーと超分子キラリティーの間のつながり制御」都築 誠二、宮田 幹二ら (A01 班)
- (11) 平成 26 年 2 月 17 日 日刊工業新聞 「名古屋工大、フッ素化合物から一度の応で種々の有用物質得られる合成法を開発」柴田 哲男 (A02 班)
- (12) 平成 26 年 7 月 10 日 日経産業新聞 「東大 ペプチド触媒開発」工藤 一秋 (A02 班)
- (13) 平成 27 年 1 月 23 日 日刊工業新聞 「人工アミノ酸産出多彩 名大が新合成法 光学活性物質ほぼ 100% 副作用軽減、創薬開発に応用」波多野 学 (A01 班)
- (14) 平成 27 年 3 月 25 日 中日新聞 「微細バブルで有機合成」間瀬暢之 (A03 班)
- (15) 平成 27 年 4 月 12 日 日本経済新聞 「日本酒、日がたつと香り変化」徳永 信 (A02 班)
- (16) 平成 27 年 11 月 29 日 岩手日報 「レアメタル代替新触媒」是永 敏伸 (A01 班)
- (17) 平成 28 年 2 月 9 日 化学工業日報 「キララル化合物 ケトン由来 効率合成 名大、新不斉触媒を開発」波多野学 (A01 班)
- (18) 平成 28 年 5 月 13 日 科学新聞 「高活性有機分子触媒開発 触媒使用量が数十分の一に」菅 誠治 (A02 班)

7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況（2 ページ以内）

領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、総括班研究課題の活動状況も含め、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

【各研究項目と研究組織の概要】

本領域研究は、持続可能な「モノづくり」の科学を発展させるための優れた有機分子触媒の開発、ならびに有機分子触媒を用いた効率的・革新的な触媒反応系を開拓し、有用物質の実践的な合成プロセスとして真に優れた分子変換を実現することを目的とした。本領域研究を強力に推進するため、「A01 有機分子触媒の制御システム設計開発」、「A02 有機触媒による分子変換システム開発」、「A03 有機分子触媒による実践的有用物質合成」の3つの研究項目を設定し、各項目内での密接な情報交換、討論を行うとともに、それぞれの研究グループを密に結びつけ各項目間との連携を発展的に行う環境を整えた。



「A01 有機分子触媒の制御システム設計開発」、「A02 有機触媒による分子変換システム開発」、「A03 有機分子触媒による実践的有用物質合成」の3つの研究項目を設定し、各項目内での密接な情報交換、討論を行うとともに、それぞれの研究グループを密に結びつけ各項目間との連携を発展的に行う環境を整えた。

【X00：総括班】

領域全体の研究を円滑に推進するために、研究企画と方針を決定する総括班を設けた。総括班は、実施グループと評価グループから構成した。

実施グループ（5名）：

- A01：寺田 眞浩（東北大院理・教授）領域代表・A01 班長、領域の総括
A01：秋山 隆彦（学習院大理・教授）領域の事務連絡担当
A02：北 泰行（立命館大薬・教授）A02 班長、領域の研究企画担当
A02：竹本 佳司（京大院薬・教授）領域の広報担当
A03：林 雄二郎（東北大院理・教授）A03 班長、各研究項目の企画調整

毎年 1~2 回のシンポジウムを開催し、班員が研究成果を発表し、討議、情報交換する機会を設けるとともに、国内外の関連する研究者を招待し、議論の機会を設けた。シンポジウムなどの情報交換の場を活用し、計画研究、公募研究を隔てることなく班員相互の共同研究を促進した。

評価グループ（5名）：

- 山本 尚 氏（中部大学・分子性触媒研究センター長・教授 [シカゴ大学名誉教授、名古屋大学名誉教授]）
丸岡 啓二 氏（京大院理・教授 [平成 17-21 年度・特定領域研究「炭素資源の高度分子変換」領域代表]）
鴻池 敏郎 氏（日本プロセス化学会 副会長 日本化学会フェロー[株式会社ピオニエ・取締役]）
左右田 茂 氏（日本プロセス化学会・副会長 [元エーザイ(株)・創薬研究本部・顧問]）
Benjamin List 氏（ドイツ・マックスプランク研究所・元研究所長）

本領域の運営方法ならびに研究の方向性を広い視野から評価して頂くため、本分野における有識者として大学関係から 2 名、海外有識者として 1 名の方に評価グループの一員となって頂き、本領域の国内外での位置づけを的確に評価頂ける体制を整えた。また、本領域は将来的な展望として産業界への応用が大いに期待されており、大学で進めている基礎研究から化学プロセスへと展開する際に超えるべきハードルを提示して頂くことを考慮し、企業での豊富な実績を有する 2 名の方に評価グループとして加わって頂いた。

【A01：有機分子触媒の制御システム設計開発】

計画研究代表者（4名）計画研究分担者（2名）： 班長：寺田 眞浩（東北大院理・教授）

公募研究代表者： 平成 24 年度-25 年度：15 名 平成 26 年度-27 年度：24 名

有機分子触媒の設計開発を主たる研究項目とし、①酸・塩基複合型触媒、②多酸・多塩基系複合型触媒、③酸・塩基共役系触媒、④酸化還元触媒、⑤汎用元素の特性を活用した新規有機分子触媒、など幅広く検討し、有機分子触媒の新機能創成を図った。一方で、こうした触媒の設計開発は主に実験化学者によるトライアンドエラー（試行錯誤）のもとで進められてきた。理論化学者との組織だった連携のもとで、触媒

現象の解明、基質／触媒間の相互作用や活性化の本質を科学的に理解することで、触媒設計における指導原理を確立し、合理的な触媒設計を試みた。また、実験的ならびに理論的に触媒現象の本質を明らかにすることで、その知的基盤を A02 班の反応開発、あるいは A03 班による有用物質合成に適合した触媒開発へと有機的・発展的に結びつけた。

【A02：有機分子触媒による分子変換システム開発】

計画研究代表者（4名）計画研究分担者（3名）： 班長：北 泰行（立命館大薬・教授）

公募研究代表者： 平成 24 年度－25 年度：11 名 平成 26 年度－27 年度：19 名

有機分子触媒による新規反応開発ならびに新手法に基づく分子変換を主たる研究項目とした。①金属を含まない有機分子触媒による新規触媒反応の開発。②多段階反応を一つの有機分子触媒で行うドミノ反応の開発。③有機分子触媒により構築される特殊な反応場を利用した新たな手法に基づく分子変換の実現。④特殊な反応メディアのもとでの有機分子触媒の新機能創出。⑤金属錯体触媒や生体触媒（酵素）などの従来の触媒系と有機分子触媒とを融合したハイブリッド型触媒系の開拓。これらの開発研究により多彩な分子変換を検討した。さらに、A01 班との連携のもとで反応に即した触媒を設計開発するとともに、開発した触媒反応系を A03 班の有用物質合成へと応用展開した。

【A03：有機分子触媒による実践的有用物質合成】

計画研究代表者（4名）： 班長：林 雄二郎（東北大院理・教授）

公募研究代表者（9名）： 平成 24 年度－25 年度：9 名 平成 26 年度－27 年度：12 名

有機分子触媒を用いて実践的有用物質合成へと応用展開することを主たる研究項目とした。A01 班、A02 班で開発された新規有機分子触媒ならびに触媒反応系を駆使し、医薬品、農薬、天然物などの生理活性化化合物、あるいは機能性材料などの有用物質の合成へと展開した。特に、弱い相互作用による活性化を特徴とする有機分子触媒は、ドミノ反応を基盤とするワンポット反応への展開が有望視されていたことから、これらのトータル効率に優れた分子変換の開発を検討した。A01 班ならびに A02 班で見出された知的基盤を発展的に展開することで A03 班による実践的有用物質合成として真に優れた分子変換の開発を検討した。

【研究組織間の連携状況：共同研究の実施状況】

多様な研究者による斬新な視点や手法を取り入れた共同研究等の推進により、当該研究領域の新たな発展を目指すため、積極的に共同研究を推進してきた。各研究項目内ならびに研究項目間の領域内共同研究について、①論文発表済、②学会発表済、③未発表の共同研究の件数をそれぞれ表 8 にまとめた。領域内共同研究が順調に進められている様子は、学会発表②されている共同研究が順調に論文発表①へとつながっている様子からも伺うことができる。新学術領域は昨年度で終了しているが、未発表の共同研究も継続されており、本領域研究により構築された組織基盤によってさらに発展が見込まれる環境が出来ていることが伺える。併せて本領域外との共同研究の実施状況も併記したが、本学術分野に関係する研究者の潜在数を示していると考えられ、学術分野としての今後の発展を期待させる件数となっている。また、こうした共同研究には海外の研究者との共同研究も多く含まれており、国際的な展開も引き続き継続されることが予測され、本学術分野の発展が大いに期待される数値となっている。

表 8. 領域内共同研究（研究項目内外）ならびに領域外共同研究の実施状況

	研究項目	①論文発表済	②学会発表済	③未発表	① + ② + ③
研究項目内 共同研究	A01 班/A01 班	23	31	12	66
	A02 班/A02 班	1	2	2	5
	A03 班/A03 班	0	0	3	3
	小計	24	33	17	74
研究項目間 共同研究	A01 班/A02 班	30	29	13	72
	A01 班/A03 班	12	34	8	54
	A02 班/A03 班	3	3	2	8
	小計	45	66	23	134
領域内共同研究	総計	69	99	40	208
領域外 共同研究	A01 班/領域外	71	51	31	153
	A02 班/領域外	43	39	15	97
	A03 班/領域外	41	21	9	71
	総計	155	111	55	321

8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む。）（1 ページ以内）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について記述してください（総括班における設備共用等への取組の状況を含む。）。

【予算配分】

表 9. 平成 23～27 年度予算配分額

	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	平成 26 年度	平成 27 年度
総括班	4,200,000 円	5,200,000 円	5,200,000 円	4,900,000 円	4,900,000 円
計画班	126,400,000 円	130,800,000 円	130,800,000 円	118,800,000 円	118,800,000 円
公募班	0 円	125,000,000 円	125,000,000 円	145,000,000 円	145,000,000 円
領域合計	130,600,000 円	261,000,000 円	261,000,000 円	268,700,000 円	268,700,000 円

【予算使用状況】

予算配分に従って研究費を効果的に使用することで研究計画を推進してきた。限られた総括班経費を効果的に運用して公開シンポジウムならびに国際会議を開催し、国内外における人的交流、情報交換を幅広く展開した。

【領域内共同利用機器】

研究を強力に推進するため、主な装置として下記の共同利用装置を購入し、班員間による利用を図った。導入装置した装置を有効利用するため頻度が高いと考えられた(1)～(8)の装置は平成 23 年度に購入した。平成 24 年度に購入した(9)～(12)のうち、解析用コンピューター(11)と(12)は共同研究による使用頻度が大幅に上がったため追加購入し、研究活動の円滑な推進に努めた。平成 25～27 年度に購入した(13)～(21)の装置類は、研究の推進に伴い実験系を強化するための合成用装置、精製装置ならびに分析装置類、あるいは既存の分析装置を有効に活用する上で検出器類を強化する必要が生じたため購入した。

- (1) 核磁気共鳴装置・日本電子(株)製 JEOL JNM-ESC400 一式<設置場所>京都大学・大学院薬学研究科
- (2) グローブボックスシステム・(米)VAC 社製 VAC1019650MNILAB STO4648S100<設置場所>東北大学・大学院理学研究科
- (3) 高性能コンピューター・HPC システムズ(株)製 HPC7000-XW<設置場所>立教大学・理学部
- (4) 超高速液体クロマトグラフ・日本分光(株)製 X-LC 2 ポンプ高圧グラジェントシステム一式<設置場所>東北大学・大学院理学研究科
- (5) 超臨界クロマトグラフ・日本分光(株)製 SFC システム<設置場所>東北大学・大学院理学研究科
- (6) マルチ分取システム・YMC(株)製 LC-Forte/R UVRI HPLC<設置場所>京都大学・大学院薬学研究科
- (7) 自動旋光計・(株)堀場製作所 SEPA-500 一式<設置場所>学習院大学・理学部
- (8) 高速液体クロマトグラフ・(株)島津製作所製 Prominence4 液低圧グラジェントシステム 27A1203<設置場所>名古屋大学・大学院工学研究科
- (9) リサイクル分取 HPLC・日本分析工業(株)製 LC-9210NEXT<設置場所>東北大学・大学院薬学研究科
- (10) 高速液体クロマトグラフ・(株)島津製作所製 Prominence LC-20AT<設置場所>京都大学・大学院薬学研究科
- (11) 高性能コンピューター・HPC システムズ(株)製 HPC7000-XW864R5S<設置場所>立教大学・理学部
- (12) 高性能コンピューター・DELL(株)製 DELL-HPC-ProServer<設置場所>産業技術総合研究所（筑波）
- (13) 高速液体クロマトグラフ・日立ハイテクノロジー(株)製 Chromaster<設置場所>東北大学・大学院理学研究科
- (14) 超高速液体クロマトグラフ・(株)島津製作所製 NexeraX2<設置場所>東北大学・大学院薬学研究科
- (15) 蛍光分光光度計・(株)堀場製作所 FluoroMax-4P<設置場所>名古屋大学・大学院工学研究科
- (16) MS トリガーフラッシュ自動精製システム一式・バイオタージ社製・ISO-DALT-DET<設置場所>立命館大学・薬学部
- (17) UV-LED 多連照射装置・朝日分光(株)製 MPOT-UVLED<設置場所>名古屋大学・大学院工学研究科
- (18) 極低温反応機 UC リアクター・テクノシグマ社製 UCR-150N<設置場所>京都大学・大学院薬学研究科
- (19) MW ペプチド合成装置・バイオタージ社製 Initiator+Eight<設置場所>京都大学・大学院薬学研究科
- (20) 高速液体クロマトグラフ用円二色性検出器・日本分光(株)製 CD-4095 型 ChromNAV Ver.2 型<設置場所>京都大学・化学研究所
- (21) キセノン光源装置・朝日分光(株)製 MAX-303(UV-VIS)一式<設置場所>京都大学・大学院薬学研究科

・研究費の使用状況

(1) 主要な物品明細 (計画研究において購入した主要な物品 (設備・備品等。実績報告書の「主要な物品明細書」欄に記載したもの。) について、金額の大きい順に、枠内に収まる範囲で記載してください。)

年度	品名	仕様・性能等	数量	単価 (円)	金額 (円)	設置(使用)研究機関
23	NMR 装置	日本電子株式会社製 FT NMR 装置	1	20,475,000	20,475,000	京都大学
	(米)VAC 社製グローブボックスシステム	VAC1019650MNILAB STOH4648S100	1	7,875,000	7,875,000	東北大学
	高性能コンピュータ	HPC システムズ HPC7000-XW	1	6,642,876	6,642,876	立教大学
24	リサイクル分取 HPLC	日本分析工業(株)製 LC-9210NEXT	1	5,197,500	5,197,500	東北大学
	高速液体クロマトグラフ	(株)島津製作所 Prominence LC-20AT	1	4,765,500	4,765,500	京都大学
	高性能コンピュータ	HPC システムズ HPC7000-XW864R5S	1	4,373,714	4,373,714	立教大学
25	高速液体クロマトグラフ	日立ハイテクノロジー製・Chromaster	1	6,384,000	6,384,000	東北大学
	超高速液体クロマトグラフ	(株)島津製作所製 NexeraX2	1	5,638,500	5,638,500	東北大学
	蛍光分光光度計	(株)堀場製作所 FluoroMax-4P	1	4,899,300	4,899,300	名古屋大学
26	MS トリガーフラッシュ自動精製システム一式	バイオタージ社製 ISO-DALT-DET	1	5,994,000	5,994,000	立命館大学
	UV-LED 多連照射装置	朝日分光(株)製 MPOT-UVLED	1	2,776,896	2,776,896	名古屋大学
	極低温反応機 UCリアクター	テクノシグマ社製 UCR-150N	1	830,304	830,304	京都大学
27	マイクロウェーブペプチド合成装置	バイオタージ社製 Initiator+Eight	1	4,102,920	4,102,920	京都大学
	高速液体クロマトグラフ用円二色性検出器	日本分光(株)CD-4095 ChromNAV Ver.2 型	1	2,943,000	2,943,000	京都大学
	キセノン光源装置 (合算)	朝日分光(株)製 MAX-303(UV-VIS) 一式	1	1,548,720	1,548,720	京都大学

(2) 計画研究における支出のうち、旅費、人件費・謝金、その他の主要なものについて、年度ごと、費目別に、金額の大きい順に使途、金額、研究上必要な理由等を具体的に記述してください。

【平成23年度】

・旅費 5,603,370 円

研究上の情報交換ならびに人的交流を図るため、公開シンポジウムや国際会議に参加するための旅費に充てた。シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際に、講師を招致した際の旅費として充てた。

・人件費・謝金 5,255,896 円

総括班経費からは本新学術領域を円滑に運営するため、事務補佐員を雇用する人件費に充てた。また、研究を推進するため、実験補助をする研究者を雇う必要が生じたため、その人件費に充てた。公開シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際、ならびに総括班評価者からシンポジウムの講評を頂くため、その謝礼金として充てた。

・その他 4,109,573 円

総括班経費からはシンポジウムを開催するための会場費と運営に関わる諸経費を支払った。また、学術論文の英文校閲、有機分子触媒に関連する学会参加費、測定分析依頼費、装置類の修理費など、研究活動に必要とされる諸経費の支払いにあてた。

【平成24年度】

・旅費 10,467,522 円

研究上の情報交換ならびに人的交流を図るため、公開シンポジウムや国際会議に参加するための旅費に充てた。シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際に、講師を招致した際の旅費として充てた。

・人件費・謝金 16,549,699 円

総括班経費からは本新学術領域を円滑に運営するため、事務補佐員を雇用する人件費に充てた。また、研究を推進するため、実験補助をする研究者を雇う必要が生じたため、その人件費に充てた。公開シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際、ならびに総括班評価者からシンポジウムの講評を頂くため、その謝礼金として充てた。

・その他 9,000,655 円

総括班経費からはシンポジウムを開催するための会場費と運営に関わる諸経費を支払った。また、学術論文の英文校閲、有機分子触媒に関連する学会参加費、測定分析依頼費、装置類の修理費など、研究活動に必要とされる諸経費の支払いに充てた。

【平成25年度】

・旅費 11,963,619 円

研究上の情報交換ならびに人的交流を図るため、公開シンポジウムや国際会議に参加するための旅費に充てた。シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際に、講師を招致した際の旅費として充てた。

・人件費・謝金 22,405,560 円

総括班経費からは本新学術領域を円滑に運営するため、事務補佐員を雇用する人件費に充てた。また、研究を推進するため、実験補助をする研究者を雇う必要が生じたため、その人件費に充てた。公開シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際、ならびに総括班評価者からシンポジウムの講評を頂くため、その謝礼金として充てた。

・その他 12,991,664 円

総括班経費からはシンポジウムを開催するための会場費と運営に関わる諸経費を支払った。また、学術論文の英文校閲、有機分子触媒に関連する学会参加費、測定分析依頼費、装置類の修理費など、研究活動に必要とされる諸経費の支払いに充てた。

【平成26年度】

・旅費 16,900,414 円

研究上の情報交換ならびに人的交流を図るため、公開シンポジウムや国際会議に参加するための旅費に充てた。シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際に、講師を招致した際の旅費として充てた。

・人件費・謝金 22,693,869 円

総括班経費からは本新学術領域を円滑に運営するため、事務補佐員を雇用する人件費に充てた。また、研究を推進するため、実験補助をする研究者を雇う必要が生じたため、その人件費に充てた。公開シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際、ならびに総括班評価者からシンポジウムの講評を頂くため、その謝礼金として充てた。

・その他 15,673,733 円

総括班経費からはシンポジウムを開催するための会場費と運営に関わる諸経費を支払った。また、学術論文の英文校閲、有機分子触媒に関連する学会参加費、測定分析依頼費、装置類の修理費など、研究活動に必要とされる諸経費の支払いにあてた。

【平成27年度】

・旅費 7,533,381 円

研究上の情報交換ならびに人的交流を図るため、公開シンポジウムや国際会議に参加するための旅費に充てた。シンポジウムの特別講演ならびに招待講演をして頂いた際に、講師を招致した際の旅費として充てた。

・人件費・謝金 13,143,849 円

総括班経費からは本新学術領域を円滑に運営するため、事務補佐員を雇用する人件費に充てた。また、研究を推進するため、実験補助をする研究者を雇う必要が生じたため、その人件費に充てた。公開シンポジウムにおいて総括班評価者から講評を頂くため、その謝礼金として充てた。

・その他 6,820,619 円

総括班経費からはシンポジウムを開催するための会場費と運営に関わる諸経費を支払った。また、学術論文の英文校閲、有機分子触媒に関連する学会参加費、測定分析依頼費、装置類の修理費など、研究活動に必要とされる諸経費の支払いにあてた。

(3) 最終年度(平成27年度)の研究費の繰越しを行った計画研究がある場合は、その内容を記述してください。

○計画研究・課題番号：23105003 研究代表者・秋山隆彦教授より研究費の繰越し申請があった。研究が当初の計画通りに進まなかった理由として「平成27年10月、キラルリン酸を触媒として用いた実験結果の解析を行っていたところ、リン酸がブレinstedd酸として作用するのではなく、微量の金属塩が真の触媒として機能していると思われる実験結果が見出された。研究遂行上この現象の本質を見極めることは不可欠であるため、再度事前準備・予備調査を行った上で実験をやり直す必要が生じた。」を挙げており、繰越しを必要とすることは明らかである。これらの解決による研究成果を期待したいところである。

○計画研究・課題番号23105010 研究代表者・林雄二郎教授より研究費の繰越し申請があった。研究が当初の計画通りに進まなかった理由として「平成27年11月。バッチ方式で最適化した反応条件を、フローに適用したところ、当初の予想に反し、反応がかなり遅くなることが明らかとなった。研究遂行上、この現象の本質を見極め、バッチ方式をフロー反応に適用するためには、反応性を向上させることが不可欠であることから、反応の添加剤の効果を詳細に検討する必要が生じた。」を挙げており、繰越しを必要とすることは明らかである。これらの解決による研究成果を期待したいところである。

9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1 ページ以内）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

「研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果」については「11. 総括班評価者による評価」に客観的な視点からコメントがなされていることから、その文中から引用しつつ、関連分野へのインパクトと波及効果をまとめたい。山本尚教授からのコメント「有機分子触媒には複数の互いに独立した分野いくつかが含まれている。例えば、プロリン型触媒、ブレンステッド酸型触媒、相関移動触媒は不斉有機分子触媒として著名であるが、いずれも我が国が研究のトップを走ってきた。本新学術領域研究『有機分子触媒による未来型分子変換』においても、この優位性に基づいて開始された。例えば、寺田・秋山触媒や、林触媒は領域研究の初期段階から既に様々な新展開をみせて、抜群の成果を出した。」にあるように、本領域の班員が開発した有機分子触媒は世界中の研究者により用いられており、数々の優れた成果を挙げるに至っている。本領域によって強力に推進してきたことで、日本人研究者の本分野における優位性を保つばかりでなく、極めて高いプレゼンスを誇っている。このことは海外から招致した評価者である Benjamin List 教授のコメントからも明らかである。一方、有機分子触媒の多角的な利用による新展開においても一定の成果を挙げており、山本尚教授のコメントに「ドミノ反応やカスケード反応に代表される単工程で複雑な分子骨格を迅速に合成する手法でも工業的な応用に向けて大きな成果があり、今後の企業化が期待される。（中略）また、有機分子触媒からさらに発展・展開した新分野にも果敢に踏み込んで、驚くほど有機分子触媒の研究分野を広げてきた。例えば、有機分子触媒と金属触媒の混成系や光反応等の物理的活性化を組み合わせた新規反応系において、大きな進展を見せた。」とあるように、企業化の方向性を探ると同時に、新分野を取り込むことで研究分野の拡大に貢献してきた。こうした評価は丸岡啓二教授のコメント「本領域研究では、触媒合成、反応開発、天然物合成、光化学、高分子化学、機能性材料科学、理論化学、ラジカル化学、創薬など極めて多彩な領域の研究者が結集して、最新の研究成果の情報交換や共同研究を通して活発な議論がなされ、新学術領域研究ならではの多くの実りある成果が得られた。」ならびに鴻池敏郎氏のコメント「最近の本領域の研究の特徴は、組み合わせ技術の研究が進んでいることである。特に有機分子触媒と光を組み合わせた新反応が多い。それ以外にも金属触媒、固相反応、マイクロウェーブ、超高压、フローシステムなどと組み合わせられて発明された革新的反応が産業化され、日本発の技術として広く用いられることを期待する。」にも表れており、新学術領域という組織立った取り組みによって新たな展開へのきっかけ作りに貢献してきた。時機をとらえて本新学術領域が始まったことも本分野における日本の優位性を保つ上で重要であったことが、「日本における『有機分子触媒』の新学術領域研究が平成 23 年度より始まったことは、グループによる研究推進の点でもまことにタイムリーであり、それから 5 年間で最大 67 名の研究者が集中してこの新興分野における日本の最新の研究成果を世界に向けて発信することにより、日本の貢献度やプレゼンスを示すことができたと思う。」と述べている丸岡啓二教授のコメントから伺うことができ、また世界中の研究者に影響力を及ぼしつつ本分野の発展に大きく貢献してきたと評価することができる。

一方で、今後「有機分子触媒」がさらなる発展を遂げるには、その企業化が課題となるが、これには鴻池敏郎氏のコメント「触媒の産業利用には、応用技術の深化、触媒の最適化、大量供給などが必須であり、企業パートナーとの協業が望まれる。触媒の供給では、研究者の間では融通されていたものの、最近になりアカデミックの研究がきっかけとなり試薬メーカーから販売される有機分子触媒の種類が増えた。これにより、触媒を企業が購入して反応を試すことができるようになり、触媒の産業での利用を推進するものである。」ならびに左右田茂氏のコメント「“有機合成化学の新たな可能性”は、余すことなく業績一覧に示された。“実業の製造現場で用いられる実現性”は、現在、企業二社が班員の開発した新規触媒のキット化を検討中であり、実業で用いられる現実性を高めている。“さらに進化した学術領域の可能性”は、本領域研究テーマであるところの高い触媒活性・取り扱いの容易さ・立体化学制御能の『研究思考プロセス』を、有機合成化学分野に留めることなく生化学/生体内反応/疾病メカニズム/治療薬開発へと進展させる期待を持てる。」にあるように、企業化に向けて一部は始動しており、研究成果を社会貢献へと昇華する準備も整いつつある。実際、平成 27 年 4 月から日本学術振興会の支援のもと、産学連携を推進する研究開発専門委員会「有機分子触媒による高度分子変換技術」を立ち上げ、企業化に向けて大きく動き出そうとしている。なお、領域代表の寺田はこの研究開発専門委員会の委員長を兼務している。

10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1 ページ以内）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者（※）の研究終了後の動向等を記述してください。

※研究代表者・研究分担者・連携研究者・研究協力者として参画した若手研究者を指します。

【取り組み状況概要】

本領域研究が目指す革新的な触媒や反応の開発に基づく「モノづくり」を担う若手研究者の育成と交流を目的として、「有機分子触媒 若手セミナー」ならびに「日本化学会春季年会・特別企画」を、また、分野の次なる担い手となるポスドクならびに大学院生をエンカレッジする目的で公開シンポジウムならびに国際会議において「ポスター発表とポスター賞の授与」を実施した。

【若手セミナーの開催】

本領域に関わる若手研究者を中心とした「有機分子触媒 若手セミナー（非公開）」を年1回、開催し研究期間内に計4回開催した。本セミナーは、同世代ならではのざっくばらんな議論と情報交換を行う中で、互いに交流を深め、本領域内での連携の強化と共同研究を促進し、領域の進展につなげることを趣旨とし、実際、本セミナーをきっかけとして共同研究が始動しており、領域内での相互連携の推進へと結実した。さらに領域外の産学界からも招待・依頼講演も実施しており、学术界のみならず産学連携への裾野の拡大を目的とした。

○第1回有機分子触媒 若手セミナー（平成24年9月8日-9日：ラフォーレ那須）参加者33名

○第2回有機分子触媒 若手セミナー（平成25年9月14日-15日：伊東温泉 湯の庭）参加者50名

○第3回 有機分子触媒 若手セミナー（平成26年9月6日-7日：玄海ロイヤルホテル）参加者36名

○第4回 有機分子触媒 若手セミナー（平成27年10月3日-4日：名古屋金山研修センター）参加者36名

【日本化学会春季年会における特別企画による講演会の開催】

本領域に関わる若手研究者を中心に領域外の研究者を含め、日本化学会春季年会の特別企画にて講演を依頼し、最新の研究成果を発表する場を提供した。

○日本化学会第93春季年会・特別企画「有機分子触媒の最先端」（平成25年3月25日：立命館大学・びわこ・草津キャンパス）

○日本化学会第94春季年会・特別企画「進化する有機分子触媒」（平成26年3月27日：名古屋大学・東山キャンパス）

○日本化学会第95春季年会・特別企画「有機分子触媒の最前線」（平成27年3月27日：名古屋大学・東山キャンパス）

○日本化学会第96春季年会・コラボレーション企画「未来を創る有機分子触媒」（平成28年3月26日：同志社大学・京田辺キャンパス）

【若手研究者のプロモーション】

本領域発足後、下記の若手研究者がプロモーションしており、本領域による研究成果が高く評価された結果と言える。

○平成25年4月：(A03班) 濱島 義隆 教授（静岡県立大学・薬学部・准教授）

→静岡県立大学・薬学部・教授

○平成25年4月：(A02班) 三宅 由寛 准教授（東京大学・大学院工学研究科・助教）

→名古屋大学・大学院工学研究科・准教授

○平成25年10月：(A01班) 鳴海 哲夫 准教授（東京医科歯科大学・生体材料工学研究所・助教）

→静岡大学・大学院工学系列・准教授

○平成26年4月：(A01班) 吉田 雅紀 准教授（北海道大学・大学院工学研究院・助教）

→旭川工業高等専門学校・准教授

○平成26年4月：(A02班) 小林 祐輔 助教（分担研究者）

（京都大学・大学院医学研究科（健康長寿社会の総合医療開発ユニット）・特定助教）

→京都大学・大学院薬学研究科・助教

○平成26年6月：(A01班) 近藤 梓 助教（研究協力者）

（東北大学・大学院理学研究科・助教〈本新学術領域研究・研究費による雇用〉）

→東北大学・大学院理学研究科・助教

○平成26年7月：(A01班) 矢内 光 講師（東京薬科大学・薬学部・助教）

→東京薬科大学・薬学部・講師

- 平成 26 年 8 月：(A01 班) 飯田 拓基 准教授 (名古屋大学 大学院工学研究科・講師)
→島根大学・大学院総合理工学研究科・准教授
- 平成 27 年 3 月：(A01 班) 加納 太一 准教授 (京都大学・大学院理学研究科・講師)
→京都大学・大学院理学研究科・准教授
- 平成 28 年 4 月：(A01 班) 矢内 光 准教授 (東京薬科大学・薬学部・講師)
→東京薬科大学・薬学部・准教授

【若手研究者の受賞】

- 平成 23 年 4 月 "平成 23 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞" (A01 班) 浦口 大輔
文部科学省「分子認識型キラル有機イオン対触媒の創製と応用の研究」
- 平成 24 年 4 月 "平成 24 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞" (A01 班) 加納 太一
文部科学省「デザイン型アミン有機触媒による精密有機合成法の研究」
- 平成 25 年 4 月 "平成 25 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞" (A01 班) 波多野 学
文部科学省「酸塩基協奏型高次機能触媒を用いる精密有機合成法の研究」
- 平成 25 年 5 月 "第 48 回 東海化学工業会学術賞" (A03 班) 原口 直樹
東海化学工業会「新規高分子固定化型キラル触媒の開発」
- 平成 26 年 2 月 "Lectureship Award MBLA 2013" (A01 班) 浦口 大輔
万有生命科学振興国際交流財団「反応性イオン種の制御を志向したキラル有機イオン対触媒の創製と応用」
- 平成 26 年 2 月 "有機合成化学奨励賞" (A03 班) 石川 勇人
有機合成化学協会「直接的骨格構築反応を利用する生物活性化合物の短段階合成」
- 平成 26 年 2 月 "井上リサーチアワード" (A01 班) 松原 亮介
井上科学振興財団「外部刺激に反応して一酸化窒素を放出するフロキサン化合物の創製」
- 平成 27 年 2 月 "有機合成化学奨励賞" (A02 班) 三宅 由寛
有機合成化学協会「光誘起電子移動の精密制御に基づく含窒素化合物の効率的変換反応の開発」
- 平成 27 年 3 月 "日本薬学会奨励賞" (A01 班) 矢内 光
日本薬学会「フッ素の特異性に着目した有機フッ素化合物の新しい合成手法の開発と利用」
- 平成 27 年 6 月 "有機電子移動化学奨励賞" (A02 班) 雨夜 徹
有機電子移動化学研究会「有機電子移動化学の発展への寄与」
- 平成 28 年 2 月 "有機合成化学奨励賞" (A02 班) 雨夜 徹
有機合成化学協会「スマネンを基盤とするボウル型 π 共役系分子の合成と機能」
- 平成 28 年 2 月 "有機合成化学奨励賞" (A03 班) 澁谷 正俊
有機合成化学協会「有機ニトロキシラジカルの酸化還元特性を利用した効率的酸化システムの開発」

【ポスター発表ならびにポスター賞の授与】

公開シンポジウムならびに国際会議など、本領域が主催するシンポジウムでポスター発表を開催した。この際、ポスターならびに学生によるポスター発表に対し、ポスター賞を設けることで活発な質疑応答と研究に対する問題意識の向上を促した。特に国際会議では英語によるプレゼンテーションの経験を積む良い機会ととらえ、海外からの講演者を優先してポスター賞の審査員とした。

- 第 2 回公開シンポジウム (東京・学習院大学)
ポスター賞 4 件 (審査対象 30 件中<総発表件数：41 件>)
- First International Conference on Organocatalysis (大津・大津プリンスホテル)
ポスター賞 4 件 (審査対象 22 件中<総発表件数：41 件>)
- 第 4 回公開シンポジウム (札幌・北海道大学 学術交流会館)
ポスター賞の審査は分子活性化との合同シンポジウムのため実施せず<総発表件数：50 件>
- Second International Conference on Organocatalysis (東京大学・伊藤謝恩ホール)
ポスター賞 7 件 (審査対象 36 件中<総発表件数：54 件>)
- 第 5 回公開シンポジウム (那覇・沖縄県市町村自治会館)
ポスター賞 4 件 (審査対象 27 件中<総発表件数：50 件>)
- 第 5 回公開シンポジウム (大阪・大阪科学技術センター)
ポスター賞 5 件 (審査対象 29 件中<総発表件数：45 件>)

11. 総括班評価者による評価（2 ページ以内）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

【中部大学・分子性触媒研究センター長・教授 [シカゴ大学名誉教授、名古屋大学名誉教授] 山本 尚 氏】

有機分子触媒には複数の互いに独立した分野いくつかが含まれている。例えば、プロリン型触媒、ブレンステッド酸型触媒、相関移動触媒は不斉有機分子触媒として著名であるが、いずれも我が国が研究のトップを走ってきた。本新学術領域研究「有機分子触媒による未来型分子変換」においても、この優位性に基づいて開始された。例えば、寺田・秋山触媒や、林触媒は領域研究の初期段階から既に様々な新展開をみせて、抜群の成果を出した。一方、ドミノ反応やカスケード反応に代表される単工程で複雑な分子骨格を迅速に合成する手法でも工業的な応用に向けて大きな成果があり、今後の企業化が期待される。また、これまでは比較の見過ごされてきた有機分子触媒を用いる酸化反応等の官能基化反応においても多くの注目すべき結果を見いだしている。また、有機分子触媒からさらに発展・展開した新分野にも果敢に踏み込んで、驚くほど有機分子触媒の研究分野を広げてきた。例えば、有機分子触媒と金属触媒の混成系や光反応等の物理的活性化を組み合わせた新規反応系において、大きな進展を見せた。数多くの海外研究者の発表、公開シンポジウム、若手セミナーを開催し、また、月刊の「News Letter」でメンバーの重要発見知見をいち早く共有・総合化するなど、これまでの新学術領域プロジェクトでは見られない活発な活動を行い、本分野の我が国の優位性を確立すると同時に、今後我が国が中心になって本分野を飛躍させる基盤を作り上げ、同時に将来に向けての多くの有為の人材を育成した。以上、「有機分子触媒による未来型分子変換」は新学術領域研究として破格の成功を収めた。

【京都大学・大学院理学研究科・教授 丸岡 啓二 氏】

有機分子触媒化学の分野は、欧米のみならず中国、韓国、シンガポールやインドなど南アジアの新興国でも急速に発展しつつある新興分野である。ヨーロッパでは既に有機分子触媒に関するグループ研究が発足していたものの、シンポジウム開催経費のみであったことを考慮すると、日本における「有機分子触媒」の新学術領域研究が平成 23 年度より始まったことは、グループによる研究推進の点でもまことにタイムリーであり、それから 5 年間で最大 67 名の研究者が集中してこの新興分野における日本の最新の研究成果を世界に向けて発信することにより、日本の貢献度やプレゼンスを示すことができたと思う。実際、本領域研究では、触媒合成、反応開発、天然物合成、光化学、高分子化学、機能性材料科学、理論化学、ラジカル化学、創薬など極めて多彩な領域の研究者が結集して、最新の研究成果の情報交換や共同研究を通して活発な議論がなされ、新学術領域研究ならではの多くの実りある成果が得られた。特に、有機分子触媒化学分野を触媒開発、反応開発、合成法開発に分けて、研究推進の効率化・高速化を図るのみならず、それぞれの領域間で有機的、発展的な連携を取ることににより、多くの研究成果へと結びつけることに成功している。また、若手研究者の活躍も顕著であり、若手研究者の勉強会の場として有機分子触媒若手セミナーを定期的に企画するなど、若手研究者同士の交流も盛んに行われ、領域の次世代を育てる努力も盛込まれた。有機分子触媒の領域は、学術としてのみならず、産業界にとっても関心の高い領域である。特に、不安定で取り扱い難い有機金属触媒と異なり、有機分子触媒は通常の条件下で安定であるため、試薬化が容易になる。このため産業界においても、数多くの有機分子触媒を短時間で試すことが可能になり、反応や合成法の最適条件を見出すための省力化が期待できるという産業界のニーズと直結していると言えよう。本領域での交流・研究成果をもとに、今後、有機分子触媒の領域が産業界も含めてさらに発展していくことを大いに期待している。

【日本プロセス化学会 副会長 日本化学会フェロー[株式会社ピオニエ・取締役] 鴻池 敏郎 氏】

本学術領域の後半期には新メンバーが加わり班員数は約 1.5 倍となり、研究者の交流が深まって研究テーマも広がり、成果が最近の News Letter に掲載されている。それは第一世代の研究者が結果を残し、追隨する若手の研究者が新たな視点で研究を進めた成果である。

最近の本領域の研究の特徴は、組み合わせ技術の研究が進んでいることである。特に有機分子触媒と光を組み合わせた新反応が多い。それ以外にも金属触媒、固相反応、マイクロウェーブ、超高压、フローシステムなどと組み合わせで発明された革新的反応が産業化され、日本発の技術として広く用いられることを期待する。

その他の成果は、触媒作用の反応機構が計算化学により解明が進んでいることである。今後もこの分野が発展することで触媒設計が容易になる。その他でも、触媒の利用範囲が広がっており、医療分野ではアルツハイマー病の原因とされるアミロイドβタンパク質をリボフラビン触媒存在下、光照射で分解する野心

的な試みが紹介された。これらの新しい研究が一層、成果を上げることが望まれる。

触媒の産業利用には、応用技術の深化、触媒の最適化、大量供給などが必須であり、企業パートナーとの協業が望まれる。触媒の供給では、研究者の間では融通されていたものの、最近になりアカデミックの研究がきっかけとなり試薬メーカーから販売される有機分子触媒の種類が増えた。これにより、触媒を企業が購入して反応を試すことができるようになり、触媒の産業での利用を推進するものである。その上で企業と触媒発明者との共同研究が進むことを願っている。なお、本学術領域のリーダーの先生方が編集されたCSJカレントレビュー22巻「有機分子触媒の化学」が化学同人から発売されることを追記する。

【日本プロセス化学会 副会長 [元エーザイ株式会社・創薬研究本部・顧問] 左右田 茂 氏】

本領域研究成果の質と量は、ニュースレター（2012/1：第1号～2016/4/4：第51号）ならびにHPの研究業績から知ることができる。過去5年間の Original papers (1305件), Books (132件), Reviews/Accounts (152件), Conference/Symposium/Lecture (外国語講演：542件、日本語講演：294件), Patent (85件), Prize (75件), Media (122件)は、カッコ内に示した件数に上る。これらアクティビティの質的な高さは各機関の評価水準をクリアしていることから、本報告書で述べるまでもなく高いものである。一方、班員が47名(平成24-25年度)～67名(平成26-27年度)であることを念頭におくと、量的側面からも、班員各位が不断に活発な研究活動を行い研究助成金を有効且つ有功に生かしたことを受け止めることができる。

先の中間評価報告書で「領域設定期間終了時の評価は①本領域研究の学術成果が、有機合成化学の新たな可能性を世界に提示できること ②研究は学問間の境界を超えた研究者の協同を土壌とし、基礎研究、応用研究、実用化研究のコミュニケーションの醸成を行い、延いては“実業の製造現場で用いられる実現性”をも視野におけること ③本領域で鍛えられた人材と構築された研究ネットワークが、さらに進化した学術領域の可能性を示せることをポイントにしたい」と記した。

“有機合成化学の新たな可能性”は、余すことなく業績一覧に示された。“実業の製造現場で用いられる実現性”は、現在、企業二社が班員の開発した新規触媒のキット化を検討中であり、実業で用いられる現実性を高めている。“さらに進化した学術領域の可能性”は、本領域研究テーマであるところの高い触媒活性・取り扱いの容易さ・立体化学制御能の「研究思考プロセス」を、有機合成化学分野に留めることなく生化学/生体内反応/疾病メカニズム/治療薬開発へと進展させる期待を持てる。本領域研究HPに、「触媒現象の解明によって基質/触媒間の相互作用と活性化の本質を理解し・・・」との記述があるが、公開シンポジウムや全体会議での意見交換を通じ、in vivoに生かせるとの意を強くした。有機分子触媒による未来型分子変換の領域研究が、「モノづくり」科学の発展を牽引したことを高く評価するだけでなく、他に生かせる発想や思考プロセスを醸成した点に注目できる。

【ドイツ・マックスプランク研究所 元研究所長 Benjamin List 氏】

I would like to provide my evaluation of the project, Grant-in-Aid for Scientific Research on the Innovative Area “Advanced Molecular Transformations by Organocatalysts”. I think I would be one of the most suitable researchers to evaluate this project, since I have initiated a similar research priority program in Germany funded by the German Research Foundation DFG from 2005 to 2010.

Chemical Sciences in Japan are traditionally very strong, especially in the area of synthesis and catalysis, and this fact is clearly confirmed once again by Prof. Masahiro Terada's program. Thanks to these efforts, Japan continues to be among the leading nations (if not *the* leading nation) in the area of organocatalysis.

First of all, the project is well-organized and very productive in the research field of organocatalysis. A broad variety of research related to organocatalysis has been covered ranging from catalytic design, mechanistic investigations, novel catalytic systems, development of transformations, and their application to natural product synthesis. The project offers an efficient platform for the exchange of ideas between specific areas to enhance not only the research progress but also the quality of the achievements. In addition, broad generations ranging from established professors to young researchers are working on the project. This is very important to stimulate extensive interaction between the subgroups beyond the generation gap, in particular, to encourage the younger researchers.

There is no doubt that the represented achievement of this project is excellent and Japanese researchers have played a leading role in the field of organocatalysis. A lot of outstanding developments have originated from the project based on the excellent platform mentioned above. I hope and certainly expect no less than that, even after completion of the research program, the program members will continue to lead to new advances into undiscovered areas that will be of great significance for the proceedings of the research field of organocatalysis.