

領域略称名：精密制御反応場
領域番号：2702

平成29年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る中間評価報告書

「高難度物質変換反応の開発を指向した
精密制御反応場の創出」

(領域設定期間)

平成27年度～平成31年度

平成29年6月

領域代表者 (大阪大学・基礎工学研究科・教授・真島 和志)

目 次

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	9
2. 研究の進展状況	11
3. 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	14
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	15
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	18
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	23
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	25
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	26
9. 総括班評価者による評価	27
10. 今後の研究領域の推進方策	29

研究組織 (総括：総括班、支援：国際活動支援班、計画：総括班及び国際活動支援班以外の計画研究、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 総括班	15H0579 高難度物質変換反応の 開発を指向した精密制 御反応場の創出	平成27年度～ 平成31年度	真島 和志	大阪大学大学院 基礎工学研究科 教授	15
Y00 支援班	15K21707 高難度物質変換反応の 開発を指向した精密制 御反応場の創出	平成27年度～ 平成31年度	真島 和志	大阪大学大学院 基礎工学研究科 教授	4
A01 計画	15H05796 二酸化炭素有効利用に 向けた高難度触媒反応 開発	平成27年度～ 平成31年度	野崎 京子	東京大学大学院 工学系研究科 教授	1
A01 計画	15H05797 高難度選択酸化反応の ための高機能分子触媒 の開発	平成27年度～ 平成31年度	水野 哲孝	東京大学大学院 工学系研究科 教授	2
A01 計画	15H05798 窒素分子及び水素分子 の新しい変換反応の開 発	平成27年度～ 平成31年度	西林 仁昭	東京大学大学院 工学系研究科 教授	2
A01 計画	15H05799 不活性結合活性化によ る高難度精密有機合成 反応の創出	平成27年度～ 平成31年度	中尾 佳亮	京都大学大学院 工学研究科 教授	2
A02 計画	15H05800 多座配位子の創出に基 づく金属錯体反応場の 構築と新反応開発	平成27年度～ 平成31年度	岩澤 伸治	東京工業大学 理学院 教授	2
A02 計画	15H05801 固相担持法による高活 性遷移金属錯体触媒の 創製	平成27年度～ 平成31年度	澤村 正也	北海道大学大学院 理学研究院 教授	3
A02 計画	15H05802 精密多点制御を実現す る触媒反応活性点の設 計と有用物質変換への 応用	平成27年度～ 平成31年度	松永 茂樹	北海道大学大学院 薬学研究院 教授	2

A02 計画	15H05803 高活性容積可変反応場 での分子変換反応	平成27年度～ 平成31年度	生越 専介	大阪大学大学院 工学研究科 教授	2
A03 計画	15H05804 タンパク質キャビティ ーを反応場として駆使 する新触媒の創製	平成27年度～ 平成31年度	林 高史	大阪大学大学院 工学研究科 教授	3
A03 計画	15H05805 生体触媒反応場の精密 制御に資する理論計算 手法の開発と応用	平成27年度～ 平成31年度	長谷川 淳也	北海道大学 触媒科学研究所 教授	3
A03 計画	15H05806 外部添加因子による生 体触媒反応場の制御と 高難度物質変換	平成27年度～ 平成31年度	荘司 長三	名古屋大学大学院 理学研究科 准教授	2
A03 計画	15H05807 モノクローナル抗体に 遷移金属錯体を導入し た新規ハイブリッド触 媒の創製	平成27年度～ 平成31年度	山口 浩靖	大阪大学大学院 理学研究科 教授	1
A04 計画	15H05808 金属間相乗作用を活か した多核金属クラスター 反応場の創出	平成27年度～ 平成31年度	真島 和志	大阪大学大学院 基礎工学研究科 教授	1
A04 計画	15H05810 超分子反応場による立 体選択性制御法の開拓	平成27年度～ 平成31年度	石原 一彰	名古屋大学大学院 工学研究科 教授	2
A04 計画	15H05811 らせん高分子を用いた 新キラル反応場の創出	平成27年度～ 平成31年度	杉野目 道紀	京都大学大学院 工学研究科 教授	2
総括・支援・計画研究 計 17 件					
A01 公募	16H00996 触媒的骨格転位の精密 制御による高度分子変 換法の開発	平成28年度～ 平成29年度	中村 達	東北大学大学院 理学研究科 准教授	1
A01 公募	16H00997 超活性セシウム HMDS アミド触媒を用いる高 精密芳香族 C-H 修飾 反応の開発	平成28年度～ 平成29年度	根東 義則	東北大学大学院 薬学研究科 教授	1

A01 公募	16H00998 AZADO-Cu 協奏触媒の 高度機能化による高難 度アルコール選択的 空気酸化	平成28年度～ 平成29年度	岩淵 好治	東北大学大学院 薬学研究科 教授	2
A01 公募	16H00999 フタロシアニン金属触 媒系の精密設計を基盤 とする環境調和型酸化 プロセスの開発と応用	平成28年度～ 平成29年度	徳山 英利	東北大学大学院 薬学研究科 教授	2
A01 公募	16H01001 高難度高選択的物質変 換反応の理論的設計	平成28年度～ 平成29年度	森 聖治	茨城大学 理学部 教授	1
A01 公募	16H01002 フッ素脱離過程を活用 する炭素-フッ素結合 の活性化	平成28年度～ 平成29年度	市川 淳士	筑波大学 数理物質系 教授	1
A01 公募	16H01003 フルオロカーボンの触 媒の高難度変換反応：深 化と展開	平成28年度～ 平成29年度	網井 秀樹	群馬大学大学院 理工学府 教授	1
A01 公募	16H01005 Design of Iron Catalyst for Activation of Simple Arenes and Heteroarenes	平成28年度～ 平成29年度	イリエシュ ラウレアン	東京大学大学院 理学系研究科 准教授	1
A01 公募	16H01011 芳香族カルボン酸誘導 体をカップリング剤と した高難度変換反応の 開発	平成28年度～ 平成29年度	山口 潤一郎	早稲田大学 理工学術院 准教授	1
A01 公募	16H01012 「精密水素移動場」を用 いる修飾アミノ酸類の 触媒的高効率脱水変換	平成28年度～ 平成29年度	斎藤 進	名古屋大学大学院 理学研究科 教授	2
A01 公募	16H01018 機能性配位子による金 属錯体反応場の制御と 高難度脱水素化反応に おける活用	平成28年度～ 平成29年度	藤田 健一	京都大学大学院 人間・環境学研究科 教授	1

A01 公募	16H01019 精密制御反応場の構築 によるヘテロ芳香環の 分解高機能化	平成28年度～ 平成29年度	依光 英樹	京都大学大学院 理学研究科 教授	1
A01 公募	16H01022 N-ヘテロ環カルベン 配位子が創る反応場を 用いる不活性結合の触 媒的変換	平成28年度～ 平成29年度	鳶巢 守	大阪大学大学院 工学研究科 教授	1
A01 公募	16H01023 炭素-窒素単結合の遷 移金属錯体への酸化的 付加を鍵とする飽和環 状アミン類の変換反応	平成28年度～ 平成29年度	武田 洋平	大阪大学大学院 工学研究科 准教授	1
A01 公募	16H01028 末端アルケンへの酸素 求核剤の逆マルコフニ コフ型付加反応の開発	平成28年度～ 平成29年度	浦 康之	奈良女子大学 理学部 准教授	1
A01 公募	16H01032 高化学選択性発現のた めの求核的活性法の開 拓	平成28年度～ 平成29年度	矢崎 亮	九州大学大学院 薬学研究院 助教	1
A01 公募	16H01033 新規酸素分子活性化に よる立体選択的分子変 換法の開発	平成28年度～ 平成29年度	内田 竜也	九州大学 基幹教育院 准教授	1
A01 公募	16H01037 細孔内を反応場とする 脱カルボキシル化/カル ボキシル化を伴う新 反応開発	平成28年度～ 平成29年度	佐藤 哲也	大阪市立大学大学院 理学研究科 教授	1
A01 公募	16H01040 チェーンウォーキング を活用したプロキラル なメチレンの不斉官能 基化	平成28年度～ 平成29年度	河内 卓彌	慶應義塾大学 理工学部 准教授	1
A01 公募	16H01044 ファインケミカル合成 を指向した酸素酸化用 触媒の開発	平成28年度～ 平成29年度	田中 真司	産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター 研究員	1

A02 公募	16H01004 多金属高活性反応場による低分子量分子ジョイント化学	平成28年度～ 平成29年度	荒井 孝義	千葉大学大学院 理学研究科 教授	1
A02 公募	16H01006 アルカリ金属イオンの高度不斉修飾に基づく立体選択的強塩基触媒の構築と応用	平成28年度～ 平成29年度	山下 恭弘	東京大学大学院 理学系研究科 准教授	1
A02 公募	16H01007 不活性結合変換を指向したラジカル共役型錯体触媒の創製	平成28年度～ 平成29年度	生長 幸之助	東京大学大学院 薬学系研究科 助教	1
A02 公募	16H01009 超電子吸引力S F 5基を有するフォトレドックス触媒の創製と可視光触媒反応の開発	平成28年度～ 平成29年度	小池 隆司	東京工業大学 科学技術創成研究院 助教	1
A02 公募	16H01013 電子受容性 π 共役骨格を持つ遷移金属錯体触媒を用いた分子変換反応の開発	平成28年度～ 平成29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	16H01014 金属錯体反応場の精密構築に向けたキラル多座有機配位子の開発	平成28年度～ 平成29年度	北村 雅人	名古屋大学大学院 創薬科学研究科 教授	1
A02 公募	16H01031 銅-典型金属結合種から構築される精密制御反応場	平成28年度～ 平成29年度	吉田 拓人	広島大学大学院 工学研究科 准教授	1
A02 公募	16H01038 光機能性メタロリガンドの創出に基づく金属錯体反応場の構築と新反応の開発	平成28年度～ 平成29年度	竹本 真	大阪府立大学大学院 理学系研究科 准教授	1
A02 公募	16H01039 ハーフメタロセン触媒活性サイトの自在構築と高難度物質の精密合成	平成28年度～ 平成29年度	神川 憲	大阪府立大学大学院 理学系研究科 教授	1

A02 公募	16H01043 アルキルニトリルの汎用炭素求核剤としての利用を可能にする新規触媒系の開拓	平成28年度～ 平成29年度	熊谷 直哉	微生物化学研究所 主席研究員	1
A03 公募	16H01024 生体分子が繰り出す変幻自在な反応場の機能設計	平成28年度～ 平成29年度	森内 敏之	大阪大学大学院 工学研究科 准教授	1
A03 公募	16H01025 タンパク質を機能性配位子とした精密制御反応場の創製	平成28年度～ 平成29年度	藤枝 伸宇	大阪府立大学大学院 生命環境科学研究科 准教授	2
A03 公募	16H01029 タンパク質の構造変化で動的反応場変換するバイオ触媒の開発	平成28年度～ 平成29年度	松尾 貴史	奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科 准教授	1
A03 公募	16H01030 協同効果を利用する精密制御反応場:多官能性ポルフィリン金属錯体	平成28年度～ 平成29年度	依馬 正	岡山大学大学院 自然科学研究科 教授	3
A03 公募	16H01035 反応場を意識したバイオインスパイアード触媒の構築と反応特性	平成28年度～ 平成29年度	久枝 良雄	九州大学大学院 工学研究院 教授	4
A03 公募	16H01042 自在制御可能な反応空間によって基質の形状を見分ける酵素型選択酸化触媒の開発	平成28年度～ 平成29年度	人見 穰	同志社大学大学院 理工学研究科 教授	1
A04 公募	16H01000 ナノポーラス金属触媒を反応場とする結合活性化反応の開発	平成28年度～ 平成29年度	金 鉄男	東北大学大学院 理学研究科 准教授	1
A04 公募	16H01010 複数活性点をもつ固体表面反応場のsite-isolation概念による設計と構築	平成28年度～ 平成29年度	本倉 健	東京工業大学 物質理工学院 講師	1

A04 公募	16H01015 イオン対の活用にもと づく超分子キラル反応 場の創出	平成28年度～ 平成29年度	大松 亨介	名古屋大学 トランスフォーマティブ生命分子研究所 特任准教授	1
A04 公募	16H01016 動的面不斉を有する超 分子型不斉触媒の創製	平成28年度～ 平成29年度	逢坂 直樹	名古屋大学大学院 工学研究科 講師	1
A04 公募	16H01017 サブフラロシアニンの 曲面 π 空間とフルオラ ス鎖が創る反応場	平成28年度～ 平成29年度	柴田 哲男	名古屋工業大学大学院 工学研究科 教授	3
A04 公募	16H01020 周辺部の精密修飾によ る巨大配位子の開発と 高難度分子変換反応へ の応用	平成28年度～ 平成29年度	藤原 哲晶	京都大学大学院 工学研究科 准教授	1
A04 公募	16H01021 典型元素の特異な触媒 能を活用する拡張不斉 反応場の精密設計と応 用	平成28年度～ 平成29年度	橋本 卓也	京都大学大学院 理学研究科 助教	1
A04 公募	16H01026 in-situ ナノ空間制御 法を用いた機能性分子 合成用金属ナノ粒子触 媒の創製	平成28年度～ 平成29年度	有澤 光弘	大阪大学大学院 薬学研究科 准教授	4
A04 公募	16H01027 空間デザイン可能な触 媒機能性多孔質有機塩 による超分子ナノリア クターの創製	平成28年度～ 平成29年度	藤内 謙光	大阪大学大学院 工学研究科 准教授	2
A04 公募	16H01036 ゲルのやわらかさによ る反応場の構築と合成 プロセス	平成28年度～ 平成29年度	三浦 佳子	九州大学大学院 工学研究院 教授	1
A04 公募	16H01041 精密に分子集積した表 面上での特異な触媒反 応場の創製	平成28年度～ 平成29年度	原 賢二	東京工科大学 工学部 教授	1
公募研究 計 47 件					

研究領域全体に係る事項

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。

1) 研究の学術的背景

有機合成化学は、創薬科学、材料科学、高分子科学などの物質科学を支える基盤科学技術であり、社会に対して果たすべき重要な役割は、経済的にも見合うレベルで有用化合物を安定供給すること、そして新しい機能・生理活性を有する新規化合物を創製することである。現在の有機合成化学の力量をもってすれば、どのような複雑な化合物でも必要に応じて合成可能であると言っても過言ではないが、それに費やすエネルギー、時間、そして副生する廃棄物を最小限にすべき社会的要請に応える必要がある。これらの要請に応えるために、現在、有機合成化学者に要求されている最重要課題は、可能な限り入手容易で安価な原料利用（例：炭化水素を直接利用する合成反応）、枯渇性資源非依存型の物質変換反応（例：CO₂、O₂、N₂を利用する反応）、環境負荷軽減（例：廃棄物ゼロの高原子効率反応や省エネルギー反応）等の高難度有機合成反応の開発である。

これらの課題を解決し、高難度かつ有用な物質変換反応を開発するためには、反応活性点のみならず、反応活性点と反応に密接に関わるその周辺領域を合わせた『反応場』の検討が極めて重要である。すなわち、遷移金属錯体反応場、生体反応場、固体表面反応場等を駆使した革新的な触媒が鍵を握っており、多分野の研究者を結集して反応場構築に焦点をあてた研究を多面的かつ強力に推進することが最も直截的である。本研究では特に反応活性点周辺領域に新たに設計した反応性制御部位、基質活性化部位、選択性制御部位等を精密かつ自在に構築すること（例えば、酸・塩基、疎水場、キラル環境、極性官能基、基質結合サイト等の適切な配置）により、独創的な反応場（高機能・高活性・高選択性触媒）を開発し、新反応の発見や従来達成が困難とされてきた高難度かつ有用物質変換の実現を目指す。特異な反応場の構築は、合成ルートを一変するブレイクスルーをもたらす可能性を秘めている。本新学術領域では、触媒開発で実績のある国内最強メンバーを結集し、高難度反応の開発を最終目標として一丸となって精密制御反応場に関わる研究を総合的に展開する。

2) 対象とする学問分野

本新学術領域研究は、有機合成手法に革新的な進展をもたらすために、斬新で独創的な「精密制御反応場」の創出により、物質変換反応を担う新たな学際領域の構築を目的としている。従来の触媒開発においては、基質の特異性に応じて触媒活性中心の金属の種類や金属に直接結合する配位子の電子・立体効果のみに着目し、反応性の向上と選択性の制御に固執する研究例が多く見られる。これに対して、本新学術領域では、反応活性点と反応活性点の周辺領域を合わせた『反応場』に焦点をあて、新現象・新反応を担う触媒開発を学問対象として取り上げる。反応活性点と反応に密接に関わる周辺領域の相乗作用により、優れた生成物の立体制御、基質選択性、反応加速（基質の活性化）、副反応の抑制、活性種の安定化等を実現するとともに、新現象・新反応の開発を目指す。そのため、関連分野の触媒開発に取り組むトップレベルの専門家を「反応場」というキーワードのもとに結集し、領域内での活発な共同研究を通じて学際的融合を誘起し、「精密制御反応場」研究グループ形成を行う。従って、本新学術領域が対象とする学問分野は、物質変換反応の中心をなす有機合成化学を基軸とし、困難な反応を達成するための触媒化学、そして反応場を設計・構築するための錯体化学、超分子化学、生化学、界面化学、理論化学の各分野から構成される。本学術領域研究では、高難度かつ有用な物質変換反応の達成を目標としており、既存の有機合成化学の枠組内の研究ではその目的を達成することは困難である。広く関連する分野の研究者が結集して、精密制御した反応場構築の課題に取り組み新

しい学術研究へと展開することが、我が国がこの分野を先導するために緊急の課題となっている。

3) 本領域の重要性・発展性

本研究領域が対象とする有機合成化学の分野は、物質科学を支える基盤科学技術である。我が国の有機合成化学の国際的優位性は、触媒反応の開発力にあり、その成果はノーベル化学賞（2001年、野依教授：Ru 錯体触媒による不斉水素化反応；2010年、鈴木教授・根岸教授：Pd 触媒による炭素-炭素カップリング反応）として高く評価されている。これらの触媒反応の開発は、基礎研究として高いレベルにあるだけでなく、その成果は医薬品や高機能物質を安価かつ安定に供給する実用化へと繋がり、社会において大きな役割を果たしている。しかしながら、触媒反応の開発に際しては、目的とする有機化合物の官能基化に合わせて、既知の触媒前駆体と配位子や反応条件を巧みに組み合わせる課題解決型の研究が主流であり、この実情では、国内外の動向から判断して、今後、我が国が国際的優位性を保ち続けることは容易ではない。当該分野において、我が国がリーダーシップを発揮し、社会から求められる要請に応え続けるためには、新反応の開拓・新現象の発見に繋がる新触媒の開発は必須であり、従来の発想とは異なる新たな研究の方向性の模索が求められている。この様な背景のもと、本新学術領域では、反応活性点と反応に密接に関わる周辺領域を含めた反応場に焦点を絞り、新たな**反応場の精密制御**に取り組む研究に総力を挙げる。昨今、国際的にも、反応活性点近傍を意識した生体触媒開発や超分子触媒開発が数多く報告されるようになり、本分野は世界的にも大きな研究の流れとなりつつある。広範囲な分野で優れた業績を持ち、世界をリードする研究者が個々の強みを最大限に活かした共同研究を行うことにより、国内外に例を見ない独創性・新規性を有する有機合成化学の新学術領域を先導することの社会的要請は極めて大きい。

4) 研究期間終了後に期待される成果等

本新学術領域研究で得られる研究の成果は、有機合成化学全体へ波及することはもちろんのこと、限られた条件下で複雑な分子を操る必要性のある天然物化学、創薬化学、生物有機化学などの分野の進展に多大な波及効果をもたらすことが期待される。さらには、今回立ち上げた新学術領域研究で提案される精密に制御された金属錯体、固体表面、生体分子、あるいは巨大合成分子が反応場として遷移状態に特異的効果をもたらす、従来は困難とされた触媒反応開発に対する新しい突破口を切り開く契機となり、様々な分野の交流と活性化につながることを確信している。さらに、共同研究を通じて世界を先導する「精密制御反応場」研究コンソーシアムを形成し、世界トップクラスの成果を目指すことにより、我が国の当該分野の若手研究者の育成や国際交流が進み、次世代研究者の国際的な認知度が向上するであろう。

新反応場の創出をトリガーとして取り組む高難度で有用な物質変換反応としては、例えば温和な条件下での飽和炭素-水素結合の直截的分子変換、炭化水素類の自在分子変換、二酸化炭素、窒素分子、酸素分子、水を物質変換反応の原料として、増炭反応、窒素固定・有機物への取り込み、エネルギー変換等を目標としている。これらの反応の開発は、学術的な意義に加えて、低エネルギー消費型物質生産の観点から、社会への波及効果が期待されるため、後半の平成 30、31 年度には、企業支援班の方々の協力を得て、実用的な合成プロセスとしてのフィージビリティを探る計画である。

従来不可能と考えられていた分子変換の実現や、従来予想もされなかった新反応を開発することは、新しい「有機化学」を切り開くチャンスであり、それ自体が研究上の大きなブレイクスルーである。このような新反応の開発により、ものづくりが刷新され、医薬、農薬、機能性化成品、高分子材料などの合成ルートが一変するなどの大きな発展が期待される。従って、新しい「**精密制御反応場**」の創出は、有機合成化学が支えている物質科学分野の研究者に対して高い機能を持った新規化合物の供給を可能にし、これらの分野の発展に大きく寄与することができる。

2. 研究の進展状況〔設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する〕（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、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。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、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

本新学術領域研究では、触媒の高活性化、予想外な反応特異性・選択性発現、新反応の発見を次々に行い、本来困難とみなされている反応、あるいは不活性と考えられる基質の変換を目指す。そのための基本戦略として、反応活性点と反応に密接に関わる周辺領域を含む反応場に着目し、今まで二次的役割として軽視されがちであった反応活性点近傍の立体構造・電子状態を自在に制御し、高難度かつ有用な物質変換反応の達成を目標とし、4つの研究項目（班）を設置し、研究を展開している。

研究項目 A01 班 高難度有用物質変換反応の開発

本班は、高難度かつ有用な物質変換反応の開発を実施し、本新領域研究の中心的役割を担う。他の3つの班の支援も受けつつ、様々な反応場を駆使して、きわめて難しい反応の開発に対しても果敢に挑戦することを当初の目的とした。この目的達成のため、有機金属化学、高分子化学、生体関連化学、固体触媒化学の各分野の国内第一線級のメンバーをそろえ、現在までに以下の成果を上げている。

野崎は「二酸化炭素の有効利用に向けた高難度触媒反応開発」に取り組み、A01 西林と共同開発した触媒を用いて、二酸化炭素の水素化反応によるギ酸合成で従来系を越える活性を達成した。水野らは「高難度選択酸化反応のための高機能分子触媒の開発」を行い、A01 野崎との共同研究で、Au-Pd触媒による脂肪族アミンの脱水素によるアニリン合成、A03 長谷川との共同研究で担持 Au 触媒を用いる β -ヘテロケトンの α,β -脱水素化を達成した。西林は「鉄及びコバルト錯体による触媒的窒素固定法の開発」において、Co 錯体を用いる初の触媒的窒素還元反応によるアンモニア合成に成功した。中尾は、「不活性結合活性化による高難度精密有機合成反応の創出」に取り組んだ。特にニトロアレーンに注目し、窒素-アレーン結合を直接活性化するクロスカップリング反応を達成した。

炭素-水素結合の直截的分子変換については、以下に記載する数多くの成果が上がっている。

・飽和炭素-水素結合の選択的な変換反応には多くの進展が見られた。矢崎は銅触媒を用いてカルボニルの α 位を酸化して水酸基とし、徳山は鉄触媒を用いてカルボニルの α 位をアリル化した。内田は鉄触媒を用いてベンジル位を選択的に酸化した。

・芳香族炭素-水素結合についても新たな知見が続々と見つかっている。中村は窒素置換基のオルト位選択的な酸化を達成した。カルボキシル基のオルト位の炭素-水素結合を炭素-炭素結合に導く手法として、イリエシュは鉄、佐藤はロジウムを用いる新触媒系を見つけた。特にイリエシュの成果は効果的なメチル化反応として、広く有機合成に用いられる可能性が期待できる。根東はケイ素活性化剤を用いて芳香族炭素-水素結合をヒドロキシアルキル基に導いた。

これまで合成的利用の限られていた炭素-酸素結合の利用としては、山口は芳香族エステルからの脱カルボニルをとまなう炭素-炭素結合形成、鳶巣、依光は環構造に含まれる sp^2 -炭素と酸素の結合を炭素-炭素結合にそれぞれ成功した。炭素-酸素結合活性化については、森が理論の立場からサポートした。武田は炭素-窒素結合の開裂を利用し、アジリジンからの β アミノボロン酸合成を達成した。

その他、岩淵による銅と窒素酸化物を用いるアルコールの選択的酸化や浦のパラジウム触媒による末端アルケンの末端選択的な酸化、藤田の新規イリジウム錯体を用いる脱水素反応は、酸化反応の新たな方向性を示すものとして意義深い。市川の炭素-フッ素結合の開裂を鍵とする環形成反応や、網井のフルオロホルムからのトリフルオロメチルアニオン等価体の調製は新たな有機フッ素化合物の合成に有効である。パラジウム触媒のチェーンウォーキングを利用した河内の炭素-炭素結合形成反

応、斉藤の環状ホスファゼンを用いる脱水反応、田中のアンモニウム触媒を用いる効率的エステル交換によるグリシジルエステル合成なども、いずれもこれまでの有機合成の壁を超えるものである。

研究項目 A02 班 精密制御金属錯体反応場の創出

本班では、これまで主として行われてきた、遷移金属錯体の金属中心に直接結合している配位子に加えて金属に直接結合していない配位子の立体・電子的な効果を精密に制御することにより、新しい金属錯体反応場の構築を行い、高難度反応の実現を目指して研究を行っている。

岩澤は、「多座配位子の創出に基づく金属錯体反応場の構築と新反応開発」に取り組み、*PNNNP*型配位子を用いる金属-金属結合を持つ遷移金属錯体反応場の構築法を開発し、これを利用して合成した *Al-Pd* 錯体を触媒とすることにより、シランによる二酸化炭素の還元反応において世界最高の触媒回転頻度 (TOF) を達成している。また、A02 澤村らの開発したポリスチレン架橋ビスホスフィン *PS-DPPBz* を用いて芳香族炭化水素の炭素-水素結合カルボキシル化反応の開発を行った。澤村は、「固相担持法による高活性遷移金属錯体触媒の創製」に取り組み、金属配位点を空間的に孤立化させて高活性金属種を生成するポリスチレン架橋ビスホスフィン *PS-DPPBz* を開発し、これが種々の第一系列遷移金属触媒の優れた配位子となることを見出した。また A01 鳶巣との共同研究で、ニッケル触媒芳香族カルバメートの脱炭酸によるアニリン合成を実現した。生越は、「高活性容積可変反応場での分子変換反応」に取り組み、結合の回転により通常の Lewis 酸-塩基対から frustrated Lewis pair へと変換可能な、嵩高いホスフィンオキシド側鎖を持つカルベン配位子を合成し、水素分子の活性化に適用した。松永は「精密多点制御を実現する触媒反応活性点の設計と有用物質変換への応用」に取り組み、*Cp*Co* 錯体を触媒とする芳香族ヘテロ環化合物の C-H アルケニル化やアリル化反応を開発した。また、官能基化に必須な触媒活性点の空き配位場を確保した上で、活性点周辺にキラル環境を付与するために、A04 石原のキラルアニオンを適用し、C-H 活性化-付加型の反応における不斉化に初めて成功した。既存のキラル配位子を合成する触媒設計法とは一線を画する、班間の共同研究ならではの成果である。

その他、山下、北村、神川、熊谷は、それぞれ独自のキラルな金属錯体反応場を創出し、さまざまな高エナンチオ選択的な反応の開発に成功し、光学活性な有用化合物の合成手法を確立した。また、小池、竹本の研究により、機能性遷移金属錯体反応場に基づいた光エネルギーの分子変換反応への利用法についても大きな進展が見られた。

以上のように、独自の配位子設計に基づき、独創的な遷移金属錯体反応場の開発がさまざまに進んでおり、さらに研究を発展させるのに必要な基盤が十分に確立されつつある。A01 班の班員とはこれら遷移金属錯体反応場を用いた高難度反応を目指して、また A03 班や A04 班の班員とは、これら遷移金属錯体反応場を生体分子反応場や巨大分子反応場に導入し特徴的な反応の開発を目指して、共同研究による連携も順調に進んでいる。

研究項目 A03 班 精密制御生体分子反応場の創出

当初の設定目標は、「タンパク質などの生体分子のキャビティを反応場として利用し、水中かつ温和な条件下で酵素類似の反応、天然を凌駕する反応、あるいは天然には見られないような反応をつかさどる生体触媒の開発を目指す。化学的視点からの遺伝子工学や実験室進化の手法も取り入れる。」であり、林は、アポミオグロビンやニトロバインディンのタンパク質空孔を反応場とする人工金属触媒の開発を進め、国際共同研究として Okuda (RWTH Aachen) らと不活性 C-H 結合の活性化やメタセシス反応、水素発生などを実施している。また、A01 の中尾との共同研究として、タンパク質内に有機金属錯体を挿入した C-C 結合形成 (環化反応) も積極的に開始している。長谷川は、A03 の依馬と

の共同研究で、理論の分野から生体触媒の反応場における触媒機構の解析として、金属錯体の配位子結合に焦点をあて、特に CO₂ の固定化のメカニズムを精査している。荘司は、P450 酵素の反応場改変による非天然基質の酸化や Mn ポルフィリンを有する P450 の開発を精力的に進めている。山口は、モノクローナル抗体を反応場とし、Pd 錯体を挿入し、水中での C-C 結合形成を試みている。

その他、人工生体触媒の構築として、森内はオリゴペプチドを用いた金属錯体反応場の設計、藤枝は非天然 Os 金属錯体をタンパク質に挿入して酸化反応を実施、松尾は Co サレン錯体をアデニル酸キナーゼに挿入する試みを行っている。また、生体模倣触媒としては、依馬は生体類似反応場をポルフィリン状に構築し、CO₂ の固定化を実現した。久枝は B12 誘導体を用いたバイオインスパイアード触媒の開発、人見は Mn 錯体の配位子構造を工夫した新しい生体類似酸化反応の実現に挑戦している。

それぞれ生体分子および生体類似分子反応場とした金属錯体の触媒反応を探索し、幾つかの難易度の高い反応が実現しつつある。したがって、今後 3 年間の課題研究に必用な基盤が十分に準備されつつあり、今後、A01 や A02 班の班員が提供する金属錯体と生体分子を組み合わせた共同研究の進行が楽しみである。

研究項目 A04 班 精密制御巨大分子反応場の創出

当初の設定目標は、「 dendrimer、金属クラスター、キラル高分子などの巨大分子の内孔や界面を精密に制御し形成されるユニークな反応場を構築し、低分子触媒では得られない、反応性、選択性、あるいは新反応の発見を目指す。」である。真島は、「金属間相乗作用を活かした多核金属クラスター反応場の創出」に取り組み A01 野崎と共同研究で亜鉛とセリウムから形成される異種金属クラスターによる二酸化炭素とエポキシドの交互共重合反応を達成し、反応機構の解明を進めている。また、国際共同研究として、Togni (ETH) と、ロジウム二核錯体による配向基をもたない単純オレフィンの不斉水素化反応を達成し、反応機構の解明を進めている。石原は、「超分子反応場による立体選択性制御法の開拓」に取り組み、ビナフチルビススルホン酸やビナフチルビスリン酸モノエステルなどのキラル二塩基酸を利用して酸塩基複合型超分子触媒を精密設計し、その活性中心近傍の特異な反応場を用いて、スチレン類と *N*-Boc アルジミンの不斉付加環化反応に成功し、生成物の加水分解により対応する光学活性アミノアルコールを合成する反応を開発した。杉野目は、「らせん高分子を用いた新キラル反応場の創出」に取り組み、らせん高分子を配位子としたニッケル触媒を用いることにより、トリインの不斉環化異性化による光学活性ヘリセン類の不斉合成反応を開発した。

この他、原はビピリジン配位子を導入したメゾポーラスシリカ反応場の開発（企業班員、稲垣との共同研究）、三浦は、高分子ゲルを金属の担持場として開発、藤内は、有機物の酸と塩基を組み合わせた多孔質の有機塩を反応場、有澤は、A04 真島と共同研究で、金表面に高分子マトリクスを形成しながら金属ナノ粒子を形成する方法を鉄に拡張している。橋本は、キラルインダノール骨格を有するヨウ素触媒を開発している。藤原は、 dendrimer 的な嵩高さを持つ配位子を有する特殊反応場の構築を進めている。柴田は、曲面 π 空間を用いたホウ素反応場、逢坂は、配位高分子化を介したロジウム二核錯体の動的なキラリティ制御による反応場、大松は、トリアゾニウム塩を用いた反応場の構築、本倉は、複数活性点をもつ固体表面反応場、Jin はナノポーラス金触媒の開発を進めている。

以上のように、金属クラスター、キラル高分子、ビススルホン酸やビスリン酸などの巨大分子によるユニークな反応場の開発が進んでおり、今後 3 年間の研究推進に必用な基盤が十分に確立されつつある。A01 班をはじめとする班員との共同研究による連携が進んでおり、新しい巨大分子反応場の構築が着実に進んでいる。

3. 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（2 ページ以内）

審査結果の所見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)

本研究領域は、これまで成し得なかった高難度の物質変換を高効率的に実現させるために、触媒活性中心のみならず、反応に密接に関わる周辺領域も含めた精巧な反応場に着目し、精密制御反応場を設計・開発していく意欲的な試みである。新学術領域研究「直截的物質変換をめざした分子活性化法の開発」（平成 22～26 年度）の成果の上に立脚しつつ、更に広範囲の有機反応を対象とし、周辺領域も含めた反応場の考察に重点を置く新しい学術領域の開拓を目指しており、有機合成化学に新たな触媒設計や触媒反応を提案することが期待される。反応活性点の近傍も含めた反応場を精密制御するという新学術領域が広がれば、その応用範囲は広く、多くの関連する他分野にも大きな波及効果が期待される。

(i) 研究組織は 4 つの研究項目で構成され、それらに属する各研究計画間の密接な交流と共同研究推進を図る機能的な総括班が組織されている。 (ii) 企業研究者の研究支援による実用的な物質変換反応の確立など具体的な目標設定がなされており、領域全体の効率的な推進が期待できる。 また、(iii) 領域代表者の広い視野に立った力強いマネジメントも期待できる。

[審査結果の所見への対応]

いただいた所見内容は、とても良き評価がなされており、改めて目標に向かって努力する所存である。そのためにも、以下の幾つかの項目において、領域全体として意識的に活動を進めている。

- (i) 領域内での共同研究（計画班員-公募班員、計画班員間、公募班員間）を強く奨励している。特に、平成 28 年 5 月の全体会議では、班員全員でのポスターセッションの時間を長く取り、非常に多くの共同研究の提案がなされ、実際に 152 件の共同研究が始まっている。まだ、領域としては、公募班員の参画から若干 1 年が経過したところではあるが、すでに 20 報の共同研究論文（投稿中 5 報、投稿準備中 23 報）、40 件の共同研究に関する学会発表を行っている。さらに、総括班からは、公募班員については、必要に応じて共同研究の打合せの国内旅費を支援することにより、さらなる共同研究の立案・実行を促している。
- (ii) 応用に向けた研究や、シーズとニーズの出会いを意識し、本領域では企業班員を募り、発足当時は 10 社であったが、その後企業側からの申し出もあり、現在 15 社の企業の研究者が賛同し、企業班員として参画している。実際には、毎月のニュースレターや年度末の成果報告書の配信の他に、公開シンポジウム、国際シンポジウムの案内を行い、シンポジウムに出席いただいている。たとえば、本年 5 月の国際シンポでは、計 9 名（全体参加者 100 名：除学生）の企業からの出席があった。次の公開シンポジウムからは、企業班員の方の依頼講演も設定し、産学連携の和を広げたい。
- (iii) 新学術領域分野の若手研究者の育成も、この領域の一つの柱と考えている。特に、年 1 回国際若手セミナーを開催し、若手研究者の国内外の交流と活性化を図っている。本セミナーは 30 代及び 40 代前半に参加者（若手班員および班員の分担・連携研究者）に限定し（班長のみオブザーバーとして参加）、海外から研究者を招へいし、合宿形式のセミナーを若手研究者で企画運営を行っている。昨年の秋には 26 名の参加者が集い、3 名の海外からの研究者を招へいし、熱い議論が交わされた。本年も 11 月に同様なセミナーを開催予定である。また、若手研究者の欧米への海外レクチャーシップも総括班として支援している。

4. 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〕

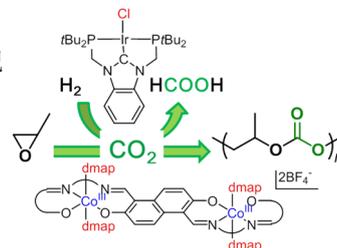
（3 ページ以内）

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。

研究項目 A01 班 高難度有用物質変換反応の開発

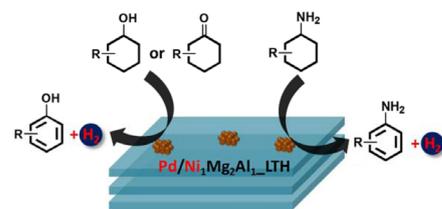
A01-1（計画・野崎）

- ・高活性 CO₂ 水素化触媒の開発：A01 計画（西林）と共同研究：PC(II)P ピンサー配位子の Ir 錯体を用い、有機アミンで中和する Ir 系としては過去最高の触媒活性を達成した（投稿準備中）。
- ・CO₂/エポキシドの交互共重合触媒開発：従来の Co^{II} 錯体の酸素酸化の代替として Cp₂Fe(III) を利用し（Chem. Eur. J. 2016）、複核 Co 錯体が形成する反応場が重合に有利なことを示した（投稿中）。



A01-2（計画・水野）

- ・フェノール、アニリン合成のための高機能脱水素触媒の開発：A01 計画（野崎）と共同研究 担持 Au-Pd 合金触媒ならびに担持 Pd 触媒を用い、6 員環状アルコールならびにアミンからの酸化剤を用いない脱水素反応開発に成功した（Chem. Commun. 2017, Chem. Sci. 2017）。
- ・活性水素の引き抜きを伴う脱水素触媒の開発：A03 計画（長谷川）と共同研究 担持 Au 触媒を用い、β-ヘテロ元素置換ケトン の α,β-不飽和化に成功した（Chem. Commun. 2016）。脱水素を鍵とする高効率なワンポット反応系も開発した（ACIE 2015, ACIE 2016）。



A01-3（計画・西林）

- ・Co 錯体、鉄錯体を用いる N₂ からアンモニアへの直接変換：ピロリド PNP ピンサー配位子を用い、Co 触媒、Fe 触媒による窒素のアンモニアへの変換に初めて成功した（Nature Commun. 2016, ACIE 2016）。
- ・Co 錯体、Fe 錯体を用いる N₂ からシリルアミンへの変換：A02 計画（岩澤）と共同研究 PSiP ピンサー配位子 Co, Fe 触媒による N₂ からのシリルアミン生成を開発（投稿済）。



A01-4（計画・中尾）

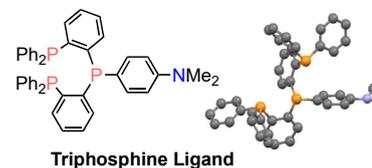
- ・ニトロアレーンを求電子剤とする鈴木宮浦クロスカップリング反応の開発：BrettPhos/Pd 錯体を用い、ニトロアレーンの鈴木宮浦クロスカップリング反応に成功した（投稿中）。
- ・芳香族化合物の直鎖選択的 C 芳香アルキル化反応：インドール（JACS 2015、国際共著論文）やベンゼンの直鎖選択的 C-H アルキル化反応が、Ni/N-ヘテロ環状カルベン触媒によって進行することを見出した。従来の Friedel-Crafts 型反応とは完全に相補的な位置選択性及び直鎖選択性で進行することも明らかにした。

A01（公募・森）

- ・Rh-BINAP 触媒の反応機構に関する理論的研究：A02 計画（澤村）との共同研究 アリルアミンの不斉異性化機構について、AFIR 法を用いてこの反応機構を探索し、得られた反応経路ネットワークをグラフ理論の手法を用いて解析し、反応機構を解明した（Chem. Sci. 2017）。
- ・メトキシナフタレンの C-O 結合活性化の機構解明：A01 公募（鳶巣）との共同研究 当該反応の CsF の添加効果、配位子の効果を明らかにした（論文投稿中）。

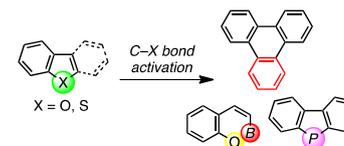
A01（公募・イリエシュ）

- ・鉄触媒を用いる単純アレーンの C-H 結合活性化：3 座ホスフィン配位子の鉄錯体存在下 Me₃Al をアルキル化剤として用い、芳香族カルボニル化合物のカルボニルのオルト位のメチル化に成功した（JACS 2016）。



A01（公募・依光）

- ・含 16 族ベンゾ縮環ヘテロールの炭素-ヘテロ元素結合の活性化：ベンゾフランやジベンゾフランの C-O 結合をニッケル触媒で活性化し、環状化合物に改変することに成功した（JACS 2016, OL 2017）。ジベンゾチオフェンからホスホールを得た（Asian JOC 2017）。



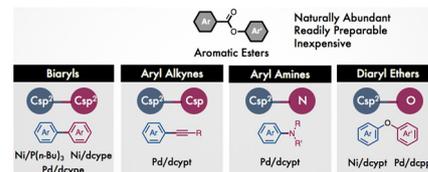
A01（公募・鳶巣）

- ・NHC 配位子の不活性結合の活性化に及ぼす影響の解明：NHC/Ni 触媒を用い、ジヒドロピランの C-O 結合の活性化と C-アリール化、Rh を用いるカルバメートの C-O 結合の活性化と C-アリール化、Pt を用いるベンゼン環の C-H 結合の活性化と C-ボリル化を達成した（Chem. Lett. 2016, JOC 2016, ACIE 2017, BCSJ 2017）。



A01 (公募・山口)

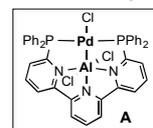
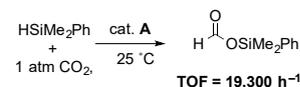
・芳香族カルボン酸エステルをカップリング剤とした C-C 結合形成反応の開発: Pd, Ni 触媒を用いて ArCOOPh から ArM 種を発生させ脱カルボニルによる各種カップリング (OL 2016, Chem. Lett. 2017)、Ar¹OAr² 合成に成功した (JACS 2017)。



研究項目 A02 班 精密制御金属錯体反応場の創出

A02-1 (計画・岩澤)

・金属-金属結合を持つ遷移金属錯体反応場の構築法とその利用: PNNNP-多座配位子を用いて金属-金属結合を持つ遷移金属錯体反応場の構築法を開発し、Al-Pd 錯体を触媒とすることにより、シランによる二酸化炭素の還元反応において世界最高の触媒回転頻度を達成した (JACS 2017)。



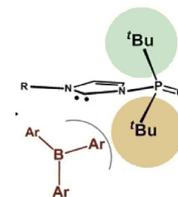
A02-2 (計画・澤村)

・ポリスチレン架橋ビスホスフィンを配位子とする遷移金属錯体反応場の構築 ポリスチレン架橋ビスホスフィンを用いることで、通常では進行しない反応が効率良く進行することを見出した (ACS Catal. 2017)。また、多くの班員との共同研究により、この反応場の優位性を明らかにした (投稿準備中)。



A02-3 (計画・生越)

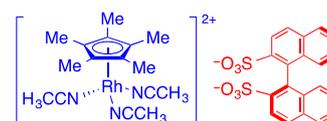
・外部刺激応答型錯体反応場の構築とその利用: 結合の回転により通常の Lewis 酸-塩基対から frustrated Lewis pair へと変換可能な、嵩高いホスフィンオキシド側鎖を持つカルベン配位子を合成し、水素分子の活性化に適用した (ACIE 2015)。



A02-4 (計画・松永)

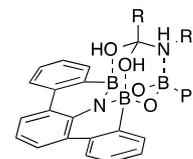
・Cp*Co^{III}錯体を用いる炭素-水素結合活性化-付加型反応の開発: Cp*Co^{III} 錯体を用いて様々なヘテロ芳香環化合物の C-H 結合活性化と引き続いてのアルケニル化やアリル化の開発を行った (OL 2016, ACIE 2017)。

・キラルアニオンを利用する炭素-水素結合活性化-付加反応の不斉化: A04計画 (石原) と共同研究 活性点周辺にキラル環境を付与するために、A04班石原のキラルアニオンを適用し、C-H 活性化-付加型反応の不斉化に初めて成功した (投稿準備中)。



A02 (公募・熊谷)

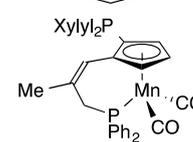
・1,3-ジオキサ-5-アザ-2,4,6-トリボリナン (DATB) 誘導体を用いる脱水反応の開発 DATB 誘導体の B₃NO₂ 環が効率的な反応場として働き、カルボン酸とアミンからさまざまなアミドが簡便に合成できることを見出した (Nature Chem. 2017)。



A02 (公募・神川)

・面不斉に基づくホスフィン-オレフィンキラル配位場の構築とその利用

CpMn(CO)₂ 錯体由来する面不斉を持つホスフィン-オレフィン二座配位子を用いてロジウム触媒によるボロン酸の高選択的不斉 1,4-付加反応を実現した (JACS 2017)。また、この配位子を用いて、多くの研究者と共同研究を行っている。



A02 (公募・小池)

・メソポーラス有機材料反応場での選択的フォトドックス触媒反応の開発: A04 公募 (原)、企業支援班豊田中研 (稲垣) と共同研究 有機メソポーラス材料にフォトドックス触媒を担持した Ru-BPy-PMO がスチレンのヒドロキシトリフルオロメチル化に有効で、基質によって均一系触媒反応と異なる選択性で生成物が得られた (投稿準備中)。

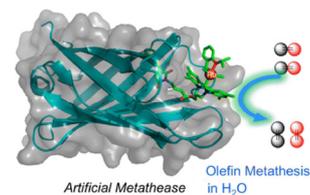


研究項目 A03 班 精密制御生体分子反応場の創出

A03-1 (計画・林)

・Ru 錯体を導入した β バレリタンパク質のメタセシス活性評価: 国際アドバイザーとの共同研究 ニトロバインディンの空孔内部にグラブス触媒を共有結合で修飾し、開環メタセシス反応活性を評価した。グラブス触媒に比べ、水中で高活性があることが示した (ACS Catal. 2015)。

・メチオニン合成酵素のモデル反応: A03 公募 (久枝) との共同研究 コバルトコリン錯体含有ミオグロビンは、Co(III)-CH₃ 錯体のメチル基が、ヘムポケット内で His64 イミダゾール環に転移することを見出した (Inorg. Chem. 2016)。

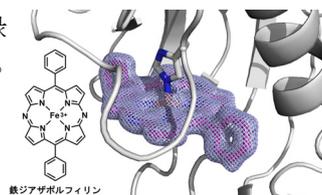


A03-2 (計画・長谷川)

・六重結合を持つ複核金属錯体を理論計算に基づいて提案: A01 計画 (水野) との共同研究 新しい触媒物質の候補となり得る、金属間多重結合をもつ遷移金属錯体を分子設計し、W-W や Mo-Mo などを基本骨格とする遷移金属錯体が 6 重結合を持つことを明らかにした (PCCP 2017)。

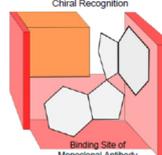
A03-3 (計画・荘司)

- ・ヘム獲得蛋白質と合成金属錯体複合体の開発: A02 公募 (三宅) との共同研究 緑膿菌ヘム獲得蛋白質 HasA が、鉄ジザポルフィリンを捕捉することを明らかにした。
- ・P450BM3 によるガス状アルカン水酸化のための疑似基質の開発: A02 公募 (網井) との共同研究 フランやチオフェン環を有するフッ素化合物が P450BM3 に取り込まれガス状アルカン水酸化を促進することを明らかにした。



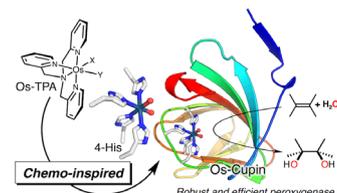
A03-4 (計画・山口)

- ・キラルスピロ化合物合成反応場の創製—スピロ化合物のキラル識別が可能なモノクローナル抗体の作製: A02 計画 (松永) との共同研究 スピロ化合物の一方の光学異性体の特異的に結合するモノクローナル抗体の作製に成功した。抗体キラル識別能の利用により、生理活性をもつ有用なスピロ誘導体の不斉合成に向けたテーラーメイド反応場を創製できた (投稿準備中)。



A03 (公募・藤枝)

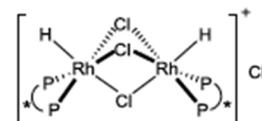
- ・オスミウムキュピタンパク質錯体—超安定オスミウムペルオキシダーゼ: キュピタンパク質を配位子としてオスミウム錯体はヒスチジン 4 配位の単核中心を有しており、高い熱安定性を示す。当量の過酸化水素存在下で末端選択的なアルケンのジオール化を効率良く触媒することが明らかとなった (JACS 2017)。



研究項目 A04 班 精密制御巨大分子反応場の創出

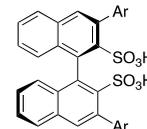
A04-1 (計画・真島)

- ・亜鉛とセリウムから形成される異種金属クラスターの触媒機能: A01 計画 (野崎) との共同研究 二酸化炭素とエポキシドの交互共重合を達成した (投稿準備中)。
- ・塩素架橋ロジウム(III)二核錯体を用いた単純オレフィンの不斉水素化反応: 3 置換の配向基を持たない単純オレフィンの不斉水素化を達成した (ACIE 2016)。
- ・有機ケイ素還元剤による塩の副生を伴わない還元反応を用いた触媒開発: ETH との国際共同研究によりシリカに担持したタングステンを温和な条件下でオレフィンメタセシス触媒とすることに成功した (ACS Central Sci. 2016)。さらに、有澤 (A04)、原 (A04) とケイ素化合物による卑金属の還元について共同研究を進めている。
- ・ニッケル触媒によるアリルアルコールのアミノ化反応: A02 計画 (生越) との共同研究 アリルアルコールのアミノ化反応を達成した (Chem. Eur. J. 2015)。



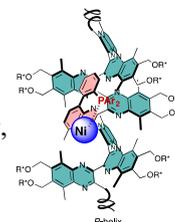
A04-2 (計画・石原)

- ・キラルピナフチルジスルホン酸を用いる新規不斉触媒の開発: A04 公募 (本倉) との共同研究 キラルピナフチルジスルホン酸をもちいて、スチレンと *N*-Boc アルジミンの不斉付加環化反応を達成した。環化により得られる生成物の加水分解により対応する光学活性アミノアルコールを合成する新しい反応である。固体担持型不斉触媒への開発を本倉 (A04) と共同研究を進めている。



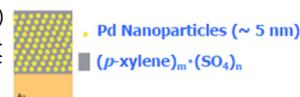
A04-3 (計画・杉野目)

- ・トリインの不斉環化異性化による光学活性ヘリセン類の不斉合成: チェコ科学アカデミーの Ivo Stary, Irena Stara との国際共同研究により、らせん高分子 PQX を配位子とするニッケル触媒が高い不斉収率を示すことを明らかにした。長谷川 (A03) との共同研究により、らせん高分子が形成するキラル反応場の構造解析を進めている (投稿準備中)。



A04 (公募・有澤)

- ・硫黄修飾金に担持した自己組織的多層状金属ナノ粒子触媒の開発: A04 計画 (真島) との共同研究 リガンドフリー鈴木—宮浦カップリングが進行する Ru のナノ粒子触媒系を開発した (ACIE 2016)。



A04 (公募・柴田)

- ・サブタロシアンを用いる赤色光でのトリフルオロメチル化反応の開発: サブタロシアン類が、650 nm 付近に極大吸収値を示すため、赤色光による CF₃I の末端オレフィンや内部オレフィンへの付加反応を見いだした (Chemistry Open 2017)。

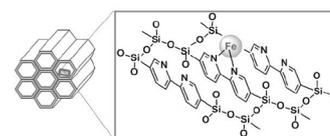


A04 (公募・藤原)

- ・高分子で置換した二座ホスフィン配位子による立体効果を最大にした触媒系の構築: A02 計画 (澤村) との共同研究 従来の嵩高い配位子とは性質が異なる触媒系を次々と見いだした。

A04 (公募・原)

- ・規則性メソポーラス有機シリカ(PMO)上に固定化した鉄錯体による触媒反応の開発: A04 計画 (真島) との共同研究 多様な遷移金属の固定化に成功している。真島 (A04) と共同研究で、鉄の還元を鍵とする触媒反応の開発を進めている。



5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開發表等）（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。

<発表論文>（計 344 件、すべて査読有り）

研究項目 A01 班 高難度有用物質変換反応の開発（計画班）

- ◎▲"Remarkable Catalytic Activity of Dinitrogen-Bridged Dimolybdenum Complexes Bearing NHC-Based PCP-Pincer Ligands toward Nitrogen Fixation" Eizawa, A.; Arashiba, K.; Tanaka, H.; Kuriyama, S.; Matsuo, Y.; Nakajima, K.; *Yoshizawa, K.; *Nishibayashi, Y. *Nature Commun.*, **2017**, 8, 14874
- ▲"para-Selective C-H Borylation of (Hetero)Arenes by Cooperative Iridium/Aluminum Catalysis" Yang, L.; Semba, K.; *Nakao, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, 56, 4853–4857
- ◎▲"Versatile Routes for Synthesis of Diarylamines through Acceptorless Dehydrogenative Aromatization Catalysis over Supported Gold-palladium Bimetallic Nanoparticles" Taniguchi, K.; Jin, X.; *Yamaguchi, K.; Nozaki, K.; *Mizuno, N. *Chem. Sci.*, **2017**, 8, 2131–2142
- ◎▲"A Ni–Mg–Al Layered Triple Hydroxide-supported Pd Catalyst for Heterogeneous Acceptorless Dehydrogenative Aromatization" *Jin, X.; Taniguchi, K.; *Yamaguchi, K.; Nozaki, K.; *Mizuno, N. *Chem. Commun.*, **2017**, 53, in press
- ▲"Copolymerisation of Ethylene with Polar Monomers by Palladium Catalysts Bearing an N-Heterocyclic Carbene–Phosphine Oxide Bidentate Ligand" Tao, W.; Akita, S.; Nakano, R.; Ito, S.; Hoshimoto, Y.; Ogoshi, S.; *Nozaki, K. *Chem. Commun.*, **2017**, 53, 2630–2633.
- "C3-Selective Alkenylation of N-Acyloindoles with Unactivated Internal Alkynes by Cooperative Nickel/Aluminium Catalysis" Inoue, F.; Saito, T.; Semba, K.; *Nakao, Y. *Chem. Commun.*, **2017**, 53, 4497–4450
- "para-Selective Alkylation of Sulfonylarenes by Cooperative Nickel/Aluminum Catalysis" Okumura, S.; *Nakao, Y. *Org. Lett.*, **2017**, 19, 584–587
- ◎▲"Catalytic Transformation of Dinitrogen into Ammonia and Hydrazine by Iron-Dinitrogen Complexes Bearing Pincer Ligand" Kuriyama, S.; Arashiba, K.; Nakajima, K.; Matsuo, Y.; Tanaka, H.; Ishii, K.; *Yoshizawa, K.; *Nishibayashi, Y. *Nature Commun.*, **2016**, 7, 12181
- ◎▲"para-Selective Alkylation of Benzamides and Aromatic Ketones by Cooperative Nickel/Aluminum Catalysis" Okumura, S.; Tang, S.; Saito, T.; Semba, K.; *Sakaki, S.; *Nakao, Y. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138, 14699–14704.
- ◎▲"Direct Transformation of Molecular Dinitrogen into Ammonia Catalyzed by Cobalt Dinitrogen Complexes Bearing Anionic PNP Pincer Ligands" Kuriyama, S.; Arashiba, K.; Tanaka, H.; Matsuo, Y.; Nakajima, K.; *Yoshizawa, K.; *Nishibayashi, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, 14291–14295
- ▲"Nickel- and Photoredox-Catalyzed Cross-Coupling Reactions of Aryl Halides with 4-Alkyl-1,4-dihydropyridines as Visible Light-Mediated Formal Nucleophilic Alkylation Reagents" Nakajima, K.; Nojima, S.; *Nishibayashi, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, 14106–14110
- ◎▲"Construction of Chiral Tri- and Tetra-arylmethanes Bearing Quaternary Carbon by Using Copper-Catalyzed Enantioselective Propargylation of Indoles with Propargylic Esters" Tsuchida, K.; Senda, Y.; Nakajima, K.; *Nishibayashi, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, 9728–9732
- ◎▲"Supported Gold Nanoparticles for Efficient α -Oxygenation of Secondary and Tertiary Amines into Amides" Jin, X.; Kataoka, K.; Yatabe, T.; Yamaguchi, K.; *Mizuno, N. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55, 7212–7217.
- ◎▲"Au-Pd alloy Nanoparticles Supported on Layered Double Hydroxide for Heterogeneously Catalyzed Aerobic Oxidative Dehydrogenation of Cyclohexanols and Cyclohexanones to phenols" Jin, X.; Taniguchi, K.; Yamaguchi, K.; *Mizuno, N. *Chem. Sci.*, **2016**, 7, 5371–5383.
- ◎▲"Gold Nanoparticles on OMS-2 for Heterogeneously Catalyzed Aerobic Oxidative α,β -Dehydrogenation of β -Heteroatom-substituted Ketones" Yoshii, D.; Jin, X.; Yatabe, T.; Hasegawa, J.; *Yamaguchi, K.; *Mizuno, N. *Chem. Commun.*, **2016**, 52, 14314–14317.
- ◎"Reactions of 2-Methyltetrahydropyran on Silica-Supported Nickel Phosphide in Comparison with 2-Methyltetrahydrofuran" Bui, P. P.; *Oyama, S. T.; Takagaki, A.; Carrow, B. P.; Nozaki, K. *ACS Catal.*, **2016**, 6, 4549–4558.
- ▲"Iron-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition Reactions of Dienes with Oxyphosphaethynes to Construct 2-Phosphaphenol Derivatives" Nakajima, K.; Liang, W.; *Nishibayashi, Y. *Org. Lett.*, **2016**, 18, 5006–5009
- ▲"Anti-Markovnikov Hydroheteroarylation of Unactivated Alkenes with Indoles, Pyrroles, Benzofurans, and Furans Catalyzed by a Nickel-N-Heterocyclic Carbene System" Schramm, Y.; Takeuchi, M.; Semba, K.; *Nakao, Y.; *Hartwig, J. F. *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, 137, 12215–12218

研究項目 A01 班 高難度有用物質変換反応の開発（公募班）

- ▲"Decarbonylative Diaryl Ether Synthesis by Pd and Ni Catalysis" Takise, R.; Isshiki, R. Muto K.; *Itami, K.; *Yamaguchi, J. *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139, 3340–3343.
- ◎▲"Nickel-Mediated Decarbonylation of Simple Unstrained Ketones through the Cleavage of Carbon–Carbon Bonds" Morioka, T.; Nishizawa, A.; Furukawa, T.; *Tobisu, M.; *Chatani, N. *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139, 1416–1419.

21. ©▲"Total Synthesis of (–)-Histriocotixin through a Stereoselective Radical Translocation–Cyclization Reaction" Sato, M.; Azuma, H.; Daigaku, A.; Sato, S.; Takasu, K.; Okano, K.; *Tokuyama, H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 1087–1091
22. ▲"Rhodium(III)-Catalyzed Ortho-Alkenylation of Anilines Directed by a Removable Boc-Protecting Group" Morita, T.; *Sato, T.; *Miura, M. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 1800–1803.
23. ▲"Aromatic Metamorphosis of Dibenzofurans into Triphenylenes Starting with Nickel-Catalyzed Ring-Opening C–O Arylation" Kurata, Y.; Otsuka, S.; Fukui, N.; Nogi, K.; *Yorimitsu, H.; Osuka, A. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 1274–1277
24. ▲"Construction of Bisbenzofuro[2,3-*b*:3',2'-*e*]pyridines by Palladium-Catalyzed Double Intramolecular Oxidative C–H/C–H Coupling" Kaida, H.; Goya, T.; Nishii, Y.; Hirano, K.; Sato, T.; *Miura, M. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 1236–1239.
25. ©"Selective Monoarylation of Aromatic Ketones and Esters via Cleavage of Aromatic Carbon-Heteroatom Bonds by Trialkylphosphine Ruthenium Catalysts" Kondo, H.; Kochi, T.; *Kakiuchi, F. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 794–797.
26. ▲"Nickel-Catalyzed Boron Insertion into the C2-O Bond of Benzofurans" Saito, H.; Otsuka, S.; Nogi, K.; *Yorimitsu, H. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 15315–15318
27. ▲"Metal-Free Approach to Biaryls from Phenols and Aryl Sulfoxides by Temporarily Sulfur-Tethered Regioselective C–H/C–H Coupling" Yanagi, T.; Otsuka, S.; Kasuga, Y.; Fujimoto, K.; Murakami, K.; Nogi, K.; *Yorimitsu, H.; Osuka, A. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 14582–14585
28. ▲"Iron-Catalyzed ortho C-H Functionalization of Aromatics Bearing a Simple Carbonyl Group with Methylaluminum and Tridentate Phosphine Ligand" Shang, R.; *Ilies, L.; *Nakamura, E. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 10132–10135.
29. ©▲"Bioinspired Total Synthesis of the Dimeric Indole Alkaloid (+)-Haplophytine by Direct Coupling and Late-Stage Oxidative Rearrangement" Satoh, H.; Ojima, K.; Ueda, H.; *Tokuyama, H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 15157–15161
30. "Synthesis of 1,3-Cycloalkadienes from Cycloalkenes: Unprecedented reactivity of Oxoammonium Salts" Nagasawa, S.; Sasano, Y.; *Iwabuchi, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 13189–13194
31. ©▲"Pictet-Spengler Synthesis of Quinoline-Fused Porphyrins and Phenanthroline-Fused Diporphyrins" Gao, K.; Fukui, N.; Jung, S. I.; *Yorimitsu, H.; *Kim, D.; *Osuka, A. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 13038–13042
32. ©▲"Palladium-catalyzed regioselective and stereo-invertive ring-opening borylation of 2-arylaziridines with bis(pinacolato)diboron: experimental and computational studies" *Takeda, Y.; Kuroda, A.; Sameera, W. M. C.; *Morokuma, K.; *Minakata, S. *Chem. Sci.*, **2016**, *7*, 6141–6152.
33. ©▲"Aluminium-mediated Aromatic C–F Bond Activation: Regioswitchable Construction of Benzene-fused Triphenylene Frameworks" Suzuki, N.; Fujita, T.; Amsharov, K.; *Ichikawa, J. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 12948–12951
34. ▲"Synthesis of Difluorinated Enynes through Sonogashira-Type Coupling" Fujino, T.; Hinoue, T.; Usuki, Y.; *Sato, T. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 5688–5691.
35. ▲"Regioselective Synthesis of Benzophosphole Derivatives via Direct ortho-Alkenylation and Cyclization of Arylthiophosphinamides" Unoh, Y.; Yokoyama, Y.; *Sato, T.; Hirano, K.; *Miura, M. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 5436–5439.
36. "Palladium-Catalyzed Decarbonylative Cross-Coupling of Azinecarboxylates with Arylboronic Acids" Muto, K.; Hatakeyama, T.; *Itami, K.; *Yamaguchi, J. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 5106–5109.
37. ▲"Ruthenium-Catalyzed Cross-Coupling of Maleimides with Alkenes" Morita, T.; Akita, M.; *Sato, T.; Kakiuchi, F.; *Miura, M. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 4598–4601.
38. ©▲"Copper(I)-Catalyzed [4 + 1] Cycloaddition of Silyl Dienol Ethers with Sodium Bromodifluoroacetate: Access to β,β -Difluorocyclopentanone Derivatives" Fuchibe, K.; Aono, T.; Hu, J.; *Ichikawa, J. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 4502–4505.
39. ▲"Cyanation of Phenol Derivatives with Aminoacetonitriles by Nickel Catalysis" Takise, R.; *Itami, K.; *Yamaguchi, J. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 4428–4431.
40. "Chemo- and Regioselective Direct Functional Groups Installation through Catalytic Hydroxy Group-Selective Conjugate Addition of Amino Alcohols to α,β -Unsaturated Sulfonyl Compounds" Li, Z.; *Yazaki, R.; *Ohshima, T. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 3350–3353.
41. ▲"Palladium-Catalyzed ipso-Borylation of Aryl Sulfides with Diborons" Bhanuchandra, M.; Baralle, A.; Otsuka, S.; Nogi, K.; *Yorimitsu, H.; Osuka, A. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 2966–2969.
42. ▲"Platform for Ring-Fluorinated Benzoheterole Derivatives: Palladium-Catalyzed Regioselective 1,1-Difluoroallylation and Heck Cyclization" Fujita, T.; Sugiyama, K.; Sanadas, S.; Ichitsuka, T.; *Ichikawa, J. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 248–251.

研究項目 A02 班 高難度有用物質変換反応の開発(計画班)

1. "Synthesis of α -Quaternary Formimides and Aldehydes through Umpolung Asymmetric Copper Catalysis with Isocyanides" Hojoh, K.; *Ohmiya, H.; *Sawamura, M. *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 2184–2187
2. ©▲"Stereoselective Synthesis of Tetrasubstituted Alkenes via Cp*Co^{III}-Catalyzed C–H Alkenylation/Directing Group Migration Sequence" Ikemoto, H.; Tanaka, R.; Sakata, K.; Kanai, M.; *Yoshino, T.; *Matsunaga, S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, in press.
3. ©"Mechanistic Study of the Rhodium-Catalyzed Carboxylation of Simple Aromatic Compounds with Carbon Dioxide" Suga, T.; Saitou, T.; Takaya, J.; *Iwasawa, N. *Chem. Sci.*, **2017**, *8*, 1454–1462
4. ▲"Metallic Reductant-Free Synthesis of α -Substituted Propionic Acid Derivatives through Hydrocarboxylation of Alkenes with Formate Salt" Takaya, J.; Miyama, K.; Zhu, C.; *Iwasawa, N. *Chem. Commun.*, **2017**, *53*, 3982–3985.
5. ©▲"Copolymerisation of ethylene with polar monomers by using palladium catalysts bearing an N-heterocyclic carbene-phosphine oxide bidentate ligand" Tao, W.; Akita, S.; Nakano, R.; Ito, S.; Hoshimoto, Y.; Ogoshi, S.; *Nozaki, K. *Chem. Commun.*, **2017**, *53*, 2630–2633
6. ©▲"A Polystyrene-Cross-Linking Bisphosphine: Controlled Metal Monochelation and Ligand-Enabled First-Row Transition Metal Catalysis" *Iwai, T.; Harada, T.; Shimada, H.; Asano, K.; *Sawamura, M. *ACS Catal.*, **2017**, *7*, 1681–1692
7. ©▲"Construction of a Visible Light-Driven Hydrocarboxylation Cycle of Alkenes by the Combined Use of Rh(I) and Photoredox Catalysts" Murata, K.; Numasawa, N.; Shimomaki, K.; Takaya, J.; *Iwasawa, N. *Chem. Commun.*, **2017**, *53*, 3098–3101
8. "Strategic Utilization of Multifunctional Carbene for Direct Synthesis of Carboxylic-Phosphinic Mixed Anhydride from CO₂" *Hoshimoto, Y.; Asada, T.; Hazra, S.; Kinoshita, T.; Sombut, P.; Kumar, R.; Ohashi, M.; *Ogoshi, S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 16075–16079
9. "Copper-Catalyzed Enantioselective Allyl–Allyl Coupling between Allylic Boronates and Phosphates with a Phenol/N-Heterocyclic Carbene Chiral Ligand" Yasuda, Y.; *Ohmiya, H.; *Sawamura, M. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 10816–10820.

10. ▲ "Re(I)-Catalyzed Generation of α,β -Unsaturated Carbene Complex Intermediates from Propargyl Ethers for Preparation of Cycloheptadiene Derivatives" Sogo, H.; Iwasawa, N. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 10057–10060
11. ◎ ▲ "Ni(0)-catalyzed intramolecular reductive coupling of alkenes and aldehydes or ketones with hydrosilane" Hayashi, Y.; Hoshimoto, Y.; Kumar, R.; Ohashi, M.; Ogoshi, S. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 6237–6240
12. ◎ ▲ "Site- and Regioselective Monoalkenylation of Pyrroles with Alkynes via Cp*Co^{III} Catalysis" Tanaka, R.; Ikemoto, H.; Kanai, M.; Yoshino, T.; Matsunaga, S. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 5732–5735
13. ▲ "Cp*Co^{III}-Catalyzed Dehydrative C–H Allylation of 6-Arylpyrines and Aromatic Amides Using Allyl Alcohols in Fluorinated Alcohols" Bunno, Y.; Murakami, N.; Suzuki, Y.; Kanai, M.; Yoshino, T.; Matsunaga, S. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 2216–2219.
14. "Phosphine-Catalyzed Vicinal Acylcyanation of Alkynoates" Murayama, H.; Nagao, K.; Ohmiya, H.; Sawamura, M. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 1706–1709
15. "Catalytic Asymmetric Iterative/Domino Aldehyde Cross-Aldol Reactions for the Rapid and Flexible Synthesis of 1,3-Polyols" Lin, L.; Yamamoto, K.; Mitsunuma, H.; Kanzaki, Y.; Matsunaga, S.; Kanai, M. *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137*, 15418–15421
16. "Catalytic Transformation of Aldehydes with Nickel Complexes through η^2 Coordination and Oxidative Cyclization" Hoshimoto, Y.; Ohashi, M.; Ogoshi, S. *Acc. Chem. Res.*, **2015**, *48*, 1746–1755
17. "Synthesis of 1,1-Diborylalkenes through a Brønsted-base-catalyzed Reaction between Terminal Alkynes and Bis(pinacolato)diboron" Morinaga, A.; Nagao, K.; Ohmiya, H.; Sawamura, M. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, *54*, 15859–15862
18. "Cp*Co^{III} Catalyzed Site-Selective C-H Activation of Unsymmetrical O-Acyl Oximes: Synthesis of Multisubstituted Isoquinolines from Terminal and Internal Alkynes" Sun, B.; Yoshino, T.; Kanai, M.; Matsunaga, S. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2015**, *54*, 12968–12972.
19. "A Strategy to Control the Reactivation of Frustrated Lewis Pairs from Shelf-Stable Carbene Borane Complexes" Hoshimoto, Y.; Kinoshita, T.; Ohashi, M.; Ogoshi, S. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2015**, *54*, 11666–11671
20. "Fluorine-Controlled C–H Borylation of Arenes Catalyzed by PSiN-Pincer Platinum Complex" Takaya, J.; Ito, S.; Nomoto, H.; Saito, N.; Kirai, N.; Iwasawa, N. *Chem. Commun.*, **2015**, *51*, 17662–17665.
21. "Silica-supported Triptycene-type Phosphine. Synthesis, Characterization, and Application to Pd-Catalyzed Suzuki–Miyaura Cross-coupling of Chloroarenes" Iwai, T.; Konishi, S.; Miyazaki, T.; Kawamorita, S.; Yokokawa, N.; Ohmiya, H.; Sawamura, M. *ACS Catal.*, **2015**, *5*, 7254–7264.
22. "Copper(I)-Catalyzed Intramolecular Hydroalkoxylation of Unactivated Alkenes" Murayama, H.; Nagao, K.; Ohmiya, H.; Sawamura, M. *Org. Lett.*, **2015**, *17*, 2039–2041.
- 研究項目 A02 班 高難度有用物質変換反応の開発(公募班)**
23. ◎ "Unique Physicochemical and Catalytic Properties Dictated by the B₃NO₂ Ring System" Noda, H.; Furutachi, M.; Asada, Y.; Shibasaki, M.; Kumagai, N. *Nat. Chem.*, **2017**, *9*, 571–577.
24. ◎ ▲ "Planar-Chiral Phosphine-Olefin Ligands Exploiting a (Cyclopentadienyl)manganese(I) Scaffold to Achieve High Enantioselectivity" Kamikawa, K.; Tseng, Y.-Y.; Jisn, J.-H.; Takahashi, T.; Ogasawara, M. *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 1545–1553.
25. "Catalytic Direct-type 1,4-Addition Reactions of Alkylazaarenes" Suzuki, H.; Igarashi, R.; Yamashita, Y.; Kobayashi, S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 4520–4524.
26. "Reversible Stereoselective Folding/Unfolding Fueled by the Interplay of Photoisomerism and Hydrogen Bonding" Opie, C. R.; Kumagai, N.; Shibasaki, M. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 3349–3353.
27. "Catalytic Asymmetric Synthesis of CF₃-Substituted Tertiary Propargylic Alcohols via Direct Aldol Reaction of α -N₃ Amide" Noda, H.; Amemiya, F.; Weidner, K.; Kumagai, N.; Shibasaki, M. *Chem. Sci.*, **2017**, *8*, 3260–3269
28. ◎ ▲ "Catalytic Asymmetric Synthesis of Chiral 2-Vinylindole Scaffolds by Friedel–Crafts Reaction." Arai, T.; Tsuchida, T.; Miyazaki, T.; Awata, T. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 758–761
29. ▲ "Direct Catalytic Asymmetric Aldol Reaction of α -Alkylamides" Liu, Z.; Takeuchi, T.; Pluta, R.; Arteaga, F. A.; Kumagai, N.; Shibasaki, M. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 710–713.
30. ◎ ▲ "Ruthenium-Sulfonamide-Catalyzed Direct Dehydrative Condensation of Benzylic C-H Bonds with Aromatic Aldehydes" Takemoto, S.; Shibata, E.; Nakajima, M.; Yumoto, Y.; Shimamoto, M.; Matsuzaka, H. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 14836–14839.
31. ◎ "Transition Metal-free Tryptophan-selective Bioconjugation of Proteins" Seki, Y.; Ishiyama, T.; Sasaki, D.; Abe, J.; Sohma, Y.; Oisaki, K.; Kanai, M. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 10798–10801.
32. ◎ ▲ "Catalytic Asymmetric Synthesis of 3-Indolyl Methanamines Using Unprotected Indoles and N-Boc Imines under Basic Conditions." Arai, T.; Kakino, J. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 15263–15267
33. "Development of a Divergent Synthetic Route to the Erythrina Alkaloids: Asymmetric Syntheses of 8-Oxo-erythrinine, Crystamidine, 8-Oxo-erythraline, and Erythraline" Umihara, H.; Yoshiko, T.; Shimokawa, J.; Kitamura, M.; Fukuyama, T. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 6915–6918
34. "Copper-Catalyzed Reaction of Trifluoromethylketones with Aldehydes via a Copper Difluoroenolate" Doi, R.; Ohashi, M.; Ogoshi, S. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2016**, *55*, 341–344
35. "Construction of Quaternary Stereogenic Carbon Centers through Copper-Catalyzed Enantioselective Allylic Alkylation of Azoles" Ohmiya, H.; Zhang, H.; Shibata, S.; Harada, A.; Sawamura, M. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 4777–4780
36. "Enantioselective Total Synthesis of (+)-Hinckdentine A via a Catalytic Dearomatization Approach" Douki, K.; Ono, H.; Taniguchi, T.; Shimokawa, J.; Kitamura, M.; Fukuyama, T. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 14578–14581.
37. ◎ ▲ "Copper-Catalyzed B(dan)-Installing Carboboration of Alkenes" Kageyuki, I.; Osaka, I.; Takaki, K.; Yoshida, H. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 830–833.
38. ◎ ▲ "Pyridine-Ni(OAc)₂-Catalyzed Michael/Aldol Reaction of Methyleneindolinones and Thioalicylaldehydes for Stereochemically Divergent Thiochromanyl-spirooxindoles" Arai, T.; Miyazaki, T.; Ogawa, H.; Masu, H. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 5824–5827.
39. "Direct Catalytic Asymmetric Mannich-Type Reaction of Alkylamides" Arteaga, F. A.; Liu, Z.; Brewitz, L.; Chen, J.; Sun, B.; Kumagai, N.; Shibasaki, M. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 2391–2394.

研究項目 A03 班 精密制御生体分子反応場の創出(計画班)

1. ◎▲"Redox Potentials of Cobalt Corrinoids with Axial Ligands Correlate with Heterolytic Co–C Bond Dissociation Energies" Morita, Y.; Oohora, K.; Sawada, A.; Kamachi, T.; Yoshizawa, K.; *Hayashi, T. *Inorg. Chem.*, **2017**, *56*, 1950–1955
2. "Photocatalytic Properties of TiO₂ Composites Immobilized with Gold Nanoparticle Assemblies Using the Streptavidin–Biotin Interaction" Harada, H.; *Onoda, A.; Uematsu, T.; Kuwabata, S.; *Hayashi, T. *Langmuir*, **2016**, *32*, 6459–6467.
3. ▲"Electronic Polarization Effect of the Water Environment in Charge-Separated Donor-Acceptor Systems: An Effective Fragment Potential Model Study" Yanai, K.; Ishimura, K.; Nakayama, A.; Schmidt, M.; Gordon, M.; *Hasegawa, J. *J. Phys. Chem. A*, **2016**, *120*, 10273–10280
4. ◎▲"Gold nanoparticles on OMS-2 for heterogeneously catalyzed aerobic oxidative α , β -dehydrogenation of β -heteroatom-substituted ketones" Yoshii, D.; Jin, X.; Yatabe, T.; Hasegawa, J.; *Yamaguchi, K.; *Mizuno, N. *Chem. Comm.*, **2016**, *52*, 14314–14317.
5. ◎"Improved oxidation of aromatic and aliphatic hydrocarbons using rate enhancing variants of P450Bm3 in combination with decoy molecules" S. D. Munday, O. Shoji, Y. Watanabe, L. L. Wong, *S. G. Bell. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 1036–1039.
6. ▲"Spin-blocking effect in CO and H₂ binding reactions to molybdenocene and tungstenocene: A theoretical study on the reaction mechanism via minimum energy intersystem-crossing point" Watanabe, K.; *Nakatani, N.; Nakayama, A.; Higashi, M.; *Hasegawa, J. *Inorg. Chem.*, **2016**, *55*, 8082–8090
7. ◎"A Highly Active Biohybrid Catalyst for Olefin Metathesis in Water: Impact of a Hydrophobic Cavity in a β -Barrel Protein" Sauer, D. F.; Himiyama, T.; Tachikawa, K.; Fukumoto, K.; Onoda, A.; Mizohata, E.; Inoue, T.; Bocola, M.; Schwaneberg, U.; *Hayashi, T.; *Okuda, J. *ACS Catal.*, **2015**, *5*, 7519–7522
8. "Manual Control of Catalytic Reactions: Reactions by an Apoenzyme Gel and a Cofactor Gel" Kobayashi, Y.; Takashima, Y.; Hashidzume, A.; Yamaguchi, H.; *Harada, A. *Sci. Reports*, **2015**, *5*, 16254.
9. "Meso-dibenzoporphycene has a Large Bathochromic Shift and a Porphycene Framework with an Anomalous Cis Tautomeric Form" Oohora, K.; Ogawa, A.; Fukuda, T.; *Hasegawa, J.; *Hayashi, T. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2015**, *54*, 6227–6230.
10. ◎"Energy Migration within Hexameric Hemoprotein Reconstituted with Zn Porphyrinoid Molecules" Oohora, K.; Mashima, T.; Ohkubo, K.; Fukuzumi, S.; *Hayashi, T. *Chem. Commun.*, **2015**, *51*, 11138–11140.
11. "Adhesion between Semihard Polymer Materials Containing Cyclodextrin and Adamantane Based on Host–Guest Interactions" Kakuta, T.; Takashima, Y.; Sano, T.; Nakamura, T.; Kobayashi, Y.; Yamaguchi, H.; *Harada, A. *Macromolecules*, **2015**, *48*, 732–738.
12. ◎"Synergy of Vicinal Oxygenated Groups of Catalysts for Hydrolysis of Cellulosic Molecules" Kobayashi, H.; Yabushita, M.; *Hasegawa, J.; *Fukuoka, A. *J. Phys. Chem. C*, **2015**, *119*, 20993–20999

研究項目 A03 班 精密制御生体分子反応場の創出(公募班)

13. ◎▲"A Well-Defined Osmium-Cupin Complex: Hyperstable Artificial Osmium Peroxygenase" *Fujieda, N.; Nakano, T.; Taniguchi, Y.; Ichihashi, H.; Sugimoto, H.; Morimoto, Y.; Nishikawa, Y.; Kurisu, G.; *Itoh, S. *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 5149–5155.
14. ◎▲"Electronic Tuning of Zinc Porphyrin Catalysts for the Conversion of Epoxides and CO₂ into Cyclic Carbonates." *Maeda, C.; Sasaki, S.; *Ema, T. *ChemCatChem*, **2017**, *9*, 946–949
15. ◎"Covalently-Attached Porphycene–Ferrocene Dyads: Synthesis, Redox-Switched Emission, and Observation of the Charge-Separated State" *Abe, M.; Yamada, H.; Okawara, T.; Fujitsuka, M.; *Majima, T.; *Hisaeda, Y. *Inorg. Chem.*, **2016**, *55*, 7–9.
16. ◎"Preparation of Fine Particles of Sheelite-Monoclinic Phase BiVO₄ via an Aqueous Chelating Method for Efficient Photocatalytic Oxygen Evolution under Visible-light Irradiation" Okunaka, S.; *Tokudome, H.; Hitomi, Y.; *Abe, R. *J. Mater. Chem. A*, **2016**, *4*, 3926–3932.

研究項目 A04 班 精密制御生体分子反応場の創出(計画班)

1. ◎▲"Single-Handed Helical Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s Bearing Achiral 4-Aminopyrid-3-yl Pendants as Highly Enantioselective, Reusable Chiral Nucleophilic Organocatalysts in the Steglich Reaction" Yamamoto, T.; Murakami, R.; *Suginome, M. *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 2557–2560
2. ◎▲"Regioselective Synthesis of *o*-Benzenediboronic Acids via Ir-catalyzed *o*-C–H Borylation Directed by a Pyrazolylaniline-Modified Boronyl Group" Yamamoto, T.; Ishibashi, A.; *Suginome, M. *Org. Lett.*, **2017**, *19*, 886–889
3. "Chemoselective Reduction of Tertiary Amides to Amines Catalyzed by Triphenylborane" Mukherjee, D.; Shirase, S.; Mashima, K.; *Okuda, J. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 13326–13329
4. "Chloride-bridged Dinuclear Rhodium(III) Complexes Bearing Chiral Diphosphine Ligands as New Rhodium(III) Catalyst Precursors for Asymmetric Hydrogenation of Simple Olefins" Kita, Y.; Hida, S.; Higashihara, K.; Sekhar Jena, H.; Higashida, K.; *Mashima, K. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 8299–8303.
5. ◎"Three-Way Switchable (Right/Left/OFF) Selective Reflection of Circular Polarized Light on Solid Thin Films of Helical Polymer Blends" *Nagata, Y.; Uno, M.; *Suginome, M. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 7126–7130
6. ◎▲"Low Temperature Activation of Supported Metathesis Catalysts by Organosilicon Reducing Agents" Mougel, V.; Chan, K.-W.; Siddiqi, G.; Kawakita, K.; Nagae, H.; Tsurugi, H.; *Mashima, K.; *Safonova, O.; *Coperet, C. *ACS Cent. Sci.*, **2016**, *2*, 569–576.
7. ◎"Mixed Ligated Tris(amidinate)dimolybdenum Complexes as Catalysts for Radical Addition of CCl₄ to 1-Hexene: Leaving Ligand Lability Controls Catalyst Activity" Rej, S.; Majumdar, M.; Kando, S.; Sugino, Y.; *Tsurugi, H.; *Mashima, K. *Inorg. Chem.*, **2016**, *56*, 634–644
8. "Magnesium Hydridotriphenylborate [Mg(thf)₆][HBPh₃]₂: A Versatile Hydroboration Catalyst" Mukherjee, D.; Shirase, S.; Spaniol, T. P.; Mashima, K.; *Okuda, J. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 13155–13158
9. ◎"Salt-free Reduction of Base Transition Metal Compounds: Generation of Amorphous Ni Nanoparticles for Catalytic C–C Bond Formation" Yurino, T.; Ueda, Y.; Shimizu, Y.; Tanaka, S.; Nishiyama, H.; Tsurugi, H.; *Sato, K.; *Mashima, K. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, *127*, 14437–14441
10. "Majority-Rule-Type Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s as Highly Efficient Chiral Amplification System for Asymmetric Catalysis" Ke, Y.-Z.; Nagata, Y.; Yamada, T.; *Suginome, M. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2015**, *54*, 9333–9337
11. "2,2'-Bipyridyl Formation from 2-Arylpyridines through Bimetallic Diyttrium Intermediate" Shibata, Y.; Nagae, H.; Rochat, R.; *Tsurugi, H.; *Mashima, K. *Chem. Sci.*, **2015**, *6*, 5394–5399

12. ©"Mixed-ligand Complexes of Paddlewheel Dinuclear Molybdenum as Hydrodehalogenation catalysts for Polyhaloalkanes" *Tsurugi, H.; Hayakawa, A.; Kando, S.; Sugino, Y.; *Mashima, K. *Chem. Sci.*, **2015**, *6*, 3434–3439
- 研究項目 A04 班 精密制御巨大分子反応場の創出(公募班)
13. ▲"Boraformylation and Silaformylation of Allenes" *Fujihara, T.; Sawada, A.; Yamaguchi, T.; Tani, Y.; Terao, J.; *Tsuji, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 1539–1543
14. ©▲"Unsupported Nanoporous Gold Catalyst for Chemoselective Hydrogenation Reactions under Low Pressure: Effect of Residual Silver on the Reaction" Takale, B. S.; Feng, X.; Lu, Y.; *Bao, M.; Jin, T.; Minato, T.; *Yamamoto, Y. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 10356–10364.
15. "Carboxyzincation Employing Carbon Dioxide and Zinc Powder: Cobalt-Catalyzed Multicomponent Coupling Reactions with Alkynes" Nogi, K.; *Fujihara, T.; Terao, J.; *Tsuji, Y. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 5547–5550
16. ©"Heterogeneous Catalysis for Water Oxidation by an Iridium Complex Immobilized on Bipyridine-Periodic Mesoporous Organosilica" Liu, X.; Maegawa, Y.; Goto, Y.; Hara, K.; *Inagaki, S. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 7943–7947
17. ©"Redox Switching of Orthoquinone-Containing Aromatic Compounds using Gas Energy" Urakawa, K.; Sumimoto, M.; Arisawa, M.; *Matsuda, M.; *Ishikawa, H. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 7432–7436
18. ©"Organocatalytic Enantioselective Nucleophilic Alkynylation of Allyl Fluorides Affording Chiral Skipped Ene-yne" Okusu, S.; Okazaki, H.; Tokunaga, E.; Soloshonok, V. A.; *Shibata, N. *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2016**, *55*, 6744–6748
19. "A Modular Strategy for the Direct Catalytic Asymmetric α -Amination of Carbonyl Compounds" Ohmatsu, K.; Ando, Y.; Nakashima, T.; *Ooi, T. *Chem*, **2016**, *1*, 802–810
20. "Successive C–C Bond Cleavage, Fluorination, Trifluoromethylthio- and Pentafluorophenylthiolation under Metal-free Conditions to Provide Compounds with Dual Fluoro-functionalization" Saidalimu, I.; Suzuki, S.; Tokunaga, E.; *Shibata, N. *Chem. Sci.*, **2016**, *7*, 2106–2110
21. ©▲"Hierarchical Construction of SHG-active Polar Crystals by Using Multi-component Crystals." Miyano, T.; Sakai, T.; Hisaki, I.; Ichida, H.; Kanematsu, Y.; *Tohnai, N. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 13710–13713
22. ©▲"Helix-helix Inversion of an Optically-inactive π -Conjugated Foldamer Triggered by Concentration Changes of a Single Enantiomeric Guest Leading to a Change in the Helical Stability" Liu, L. J.; *Ousaka, N.; Horie, M.; Mamiya, F.; *Yashima, E. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 11752–11755.
23. "Alignment of Paired Molecules of C60 within a Hexagonal Platform Networked through Hydrogen-bonds." *Hisaki, I.; Nakagawa, S.; Sato, H.; Tohnai, N. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 9781–9784
24. ©"Photoinduced Electron Transfer in Porous Organic Salt Crystals Impregnated with Fullerenes" Hasegawa, T.; Ohkubo, K.; Hisaki, I.; Miyata, M.; *Tohnai, N.; *Fukuzumi, S. *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 7928–7931
25. "N-Methyl Transfer Induced Copper-Mediated Oxidative Diamination of Alkynes" Ho, H. E.; Oniwa, K.; Yamamoto, Y.; *Jin, T. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 2487–2490
26. ©"Non-metathesis Heterocycle Formation by Ruthenium-Catalyzed Intramolecular [2+2] Cycloaddition of Allenamide-enes to Azabicyclo[3.1.1]heptanes" Nada, T.; Yoneshige, Y.; Ii, Y.; Matsumoto, T.; Fujioka, H.; Shuto, S.; *Arisawa, M. *ACS Catal.*, **2016**, *6*, 3168–3171
27. "Design and Synthesis of Cyclopropane Congeners of Resolvin E2, an Endogenous Proresolving Lipid Mediator, as Its Stable Equivalents" Fukuda, H.; Muromoto, R.; Takakura, Y.; Ishimura, K.; Kanada, R.; Fushihara, D.; Tanabe, M.; Matsubara, K.; Hirao, T.; Hirashima, K.; Abe, Arisawa, M.; Matsuda, T.; *Shuto, S. *Org. Lett.*, **2016**, *18*, 6224–6227
28. ©"Identification of a Potent and Selective GPR4 Antagonist as a Drug Lead for the Treatment of Myocardial Infarction" Fukuda, H.; Ito, S.; Watari, K.; Mogi, Arisawa, M.; Okajima, F.; Kurose, H.; *Shuto, S. *ACS Med. Chem. Lett.*, **2016**, *7*, 493–497
29. ©"Design, Synthesis, and Identification of 4" α -azidoethyl-Cyclic ADP-Carbocyclic-Ribose as a Highly Potent Analogue of Cyclic ADP-Ribose, a Ca²⁺-mobilizing Second Messenger" Sato, T.; Watanabe, M.; Tsuzuki, T.; Takano, S.; Murayama, T.; Sakurai, T.; Kameda, T.; Arisawa, M.; Fukuda, H.; *Shuto, S. *J. Med. Chem.*, **2016**, *59*, 7282–7286

<書籍> (計 5 件)

- 「Catalytic Transformations of Molecular Dinitrogen by Iron and Cobalt–Dinitrogen Complexes as Catalysts」 Kuriyama, S.; Nishibayashi, Y. 「Topics in Organometallic Chemistry – Nitrogen Fixation」, Nishibayashi, Y., Springer Nature, 2017
- 「Hydroarylation」 Nakao, Y. 「Science of Synthesis: N-Heterocyclic Carbenes in Catalytic Organic Synthesis Vol. 1」, Nolan, S. P., Cazin, C. S. J., Georg Thieme Verlag KG, 2017.

<ホームページ・新聞等> (計 157 件)

- 日刊工業新聞 (2017 年 4 月 22 日、朝刊)「阪大、ロジウム触媒で光学活性の有機化合物を合成 – 医薬品・液晶の応用に期待」真島和志
- テレビ出演 TBS「EARTH Lab」 「CO₂からプラスチックを作る」野崎京子, 2015 年 6 月 25 日
- テレビ出演 読売テレビ報道局 ニュース「ten」(テン)「二酸化炭素を 29%含むプラスチックについて」野崎京子, 2015 年 7 月 20 日

<主催シンポジウム等の状況> (計 7 回)

- 第 2 回精密制御反応場国際シンポジウム, 2017 年 5 月 12,13 日, 大阪大学銀杏会館 (吹田キャンパス)
- 日本化学会第 97 春季年会特別企画 (共催), 2017 年 3 月 19 日, 慶應義塾大学日吉キャンパス
- 第 2 回公開シンポジウム, 2017 年 1 月 25, 26 日, 名古屋大学
- 三領域合同シンポジウム, 2016 年 11 月 18,19 日, 大阪大学シグマホール (豊中キャンパス)

<アウトリーチ活動> (計 46 件)

- 小・中・高向け授業・実験・実習, 真島和志, SEEDS プログラム高校生の受入, 2016 年 10 月 15 日~2016 年 10 月 22 日, 大阪大学豊中キャンパス, 豊中市, 大阪
- 小・中・高向け授業・実験・実, 西林仁昭, 2016 年 8 月 1 日, 東京大学, 東京都

6. 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、研究組織間の連携状況について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。

研究組織（公募研究を含む）

本新学術領域研究では、触媒の高活性化、予想外な反応特異性・選択性発現、新反応の発見を次々に行い、本来困難とみなされている反応、あるいは不活性と考えられる基質の変換を目指す。そのための基本戦略として、反応活性点と反応に密接に関わる周辺領域を含む反応場に着目し、今まで二次的役割として軽視されがちであった反応活性点近傍の立体構造・電子状態を自在に制御し、高難度かつ有用な物質変換反応の達成を目指して、次の4つの研究項目(班)を構成している。

研究項目 A01 班：高難度有用物質変換反応の開発（計画研究と公募研究）

研究項目 A02 班：精密制御金属錯体反応場の創出（計画研究と公募研究）

研究項目 A03 班：精密制御生体分子反応場の創出（計画研究と公募研究）

研究項目 A04 班：精密制御巨大分子反応場の創出（計画研究と公募研究）

本領域では、A01 班が新反応開発の中心に位置し、高分子化学、有機金属化学、生体関連化学、固体触媒化学の各分野の国内第一線級のメンバーをそろえ、それぞれの強みを活かした反応場により高難度物質変換反応の開発に挑戦する。A02～A04 班は、金属錯体反応場、生体分子反応場、巨大分子反応場の種類ごとに研究項目を設定し、研究項目に応じて独創的な反応場の開発を行い、A01 班の反応開発をそれぞれの立場から支援する位置づけである。その上で、A02～A04 班で得られる成果や知見・概念を、班内・班間で積極的に共有し、A01 班がコアとなって共同研究を推進し、従来実現困難とされていた反応の達成を目指す。本領域で研究対象とする反応場は、金属表面、複雑な配位子、生体分子のキャビティー、 dendroliマーや金属クラスターなど、多種多様であり、それぞれが一見別物にとらえがちである。しかし、そこで発生する反応活性種や反応のメカニズムは、驚くほど似ており、まずは、分野の異なる計画班員が一堂に会して、概念や技術、成果や将来展望を共有することは、「今まで不可能と思われてきた触媒反応の開発」に対するセレンディピティが生まれる重要な契機と位置づけている。さらに、計画班員だけではカバーしきれない触媒関連分野の研究者、あるいは若い世代の活発な研究者が公募班員として参画することにより、優れた反応場を有する触媒の構築と高難度反応の開発を加速する体制を取っている。以下に、本申請領域での研究項目(班)ごとの目標を示す。

研究項目 A01 班 高難度有用物質変換反応の開発： 高難度かつ有用な物質変換反応の開発を実施し、本新領域研究の中心的役割を担う。以下の3つの研究項目の支援も受けつつ、様々な反応場を駆使して、きわめて難しい反応の開発に対しても果敢に挑戦している。様々な種類の反応場を用いて高難度反応を開発する力量の高い第一線の研究者が担当している。公募班員を最も多く採択している。

研究項目 A02 班 精密制御金属錯体反応場の創出： 金属錯体反応場の構築を目指す。これまで、遷移金属錯体の金属中心に直接結合している配位子の影響を検討してきたが、ここでは、金属に直接結合していない配位子の立体・電子的な効果を精密に制御することにより、新しい金属錯体反応場の構築を目指している。

研究項目 A03 班 精密制御生体分子反応場の創出： タンパク質などの生体分子のキャビティーを反応場として利用し、水中かつ温和な条件下で酵素類似の反応、天然を凌駕する反応、あるいは天然には見られないような反応をつかさどる生体触媒の開発を目指している。化学的視点からの遺伝子工学や実験室進化の手法も取り入れている。

研究項目 A04 班 精密制御巨大分子反応場の創出： 金属クラスター、キラル高分子などの巨大分子の内孔や界面を精密に制御し形成されるユニークな反応場を構築し、低分子触媒では得られない、反応性、選択性、あるいは新反応の発見を目指している。

図 6-1 に示すような研究組織を構築して本新学術領域研究を推進している。まず、A02 班、A03 班、A04 班は、それぞれの目的に沿った反応場を基盤としたユニークな触媒開発を強力に実施する。そこで得られる知見や成果を A01 班と一緒に議論し、密接な連携（共同研究：触媒の提供、情報交換、人的交流）を通じて、極めて難しいとされてきた反応や、エネルギーまたは時間を要する反応を速やかに進行させ、有用な化合物を合成する領域全体の目標の達成を目指して研究を推進している。

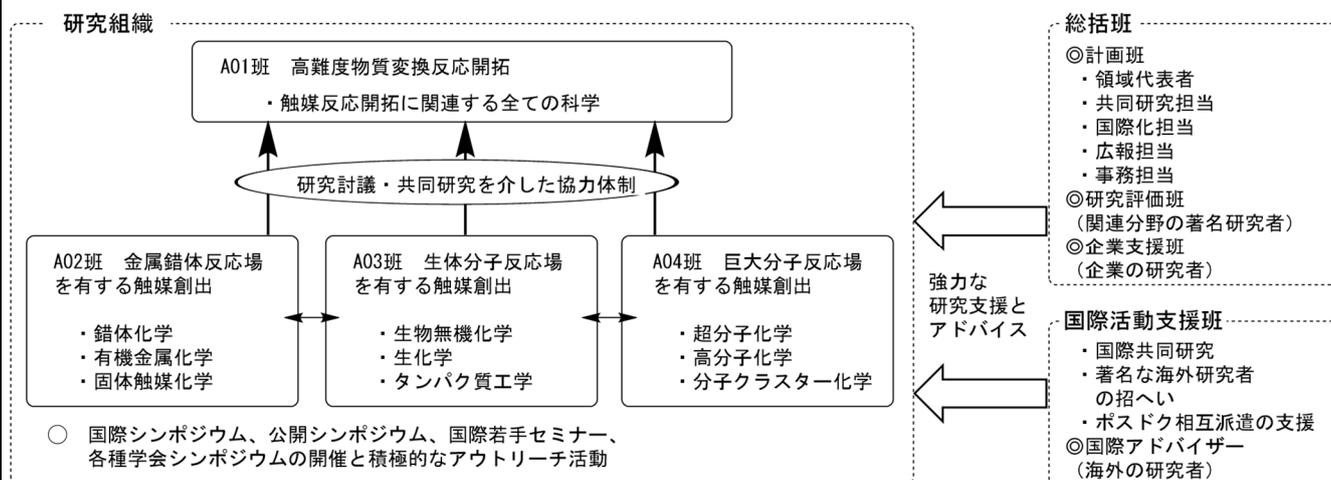


図 6-1. 領域相関図

各研究項目の連携状況

平成 27 年度は、計画班員でキックオフミーティングを開催し、お互いの研究について理解を深めるとともに、それぞれの専門分野を活かした共同研究の模索を行った。特に、A02 班の有機金属化学、錯体化学の立場から、反応活性点とその近傍の精密制御を意識した反応場の構築、A03 班のタンパク質が有するキャビティーを活かした生体反応場の構築、A04 班の巨大合成分子が提供するユニークな反応場の構築を、それぞれの研究グループとして積極的に展開した。また A01 は、CO₂ の固定、N₂ の固定や不活性な C-H 結合の活性化など、それぞれ高難度の反応に果敢に挑戦し、一定の成果を既に収めている。

平成 28 年度において、初年度の共同研究を推進するとともに、平成 28 年度からは、公募班員と計画班員、公募班員間の有機的な情報交換と積極的な共同研究の実施を目指し、5 月に非公開の研究発表会（全員の発表）を口頭およびポスター発表形式で行った。これにより班員間のマッチングが進み、多くの共同研究の提案が行われた。特に、公募班員間の具体的な共同研究提案については、公募班員の国内旅費を総括班から支援することにより、単にサンプルなどの交換にとどまらず、直接的な議論とアイデアを共有する形で、共同研究の推進を行った。実際に支援を受けた公募班員から、大変有意義な議論を行えたとの声があり、今後も継続して支援を続ける計画である。

現在、152 件の共同研究が領域内で検討・実施されており、領域立ち上げ当時に、A02 班は錯体・有機金属、A03 班は生体分子、A04 班は巨大分子・超分子とカテゴリー化した¹が、班内だけでなく、班間の交流も活発に行われ、予想以上の班員同士の研究討議が始まり、共同研究の新しい文化が根付き始めている。

7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1 ページ以内）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

若手研究者の育成として、主に次の2点について取り組みを行っている。

（1）海外レクチャーシップ賞：

若手公募班員に対して、海外での1週間～2週間のセミナーツアーの旅費を支援する「海外レクチャーシップ賞」を設定し、海外の大学・研究機関でのセミナー発表と研究討議の機会を与え、国際的な学術交流を通じて、若手研究者のモチベーションの向上と成長の応援を行うことを目的としている。



図 7-1. ホストの Sigman [左端] と A01 班河内 (右から 2 番目)

平成 28 年度は、A01 班 河内 [慶應大] が受賞し、1 月にアメリカの名門大学 (Univ. Utah, Caltech, UC Irvine, Scripps Res. Inst. US Berkeley) を巡るレクチャーシップを実施した (右写真参照)。また、今年度は、以下の 3 名が受賞し、これからそれぞれ希望する大学へのセミナーの計画・準備に入っている。

A02 班 熊谷 [微生物化学研] (Princeton Univ., Univ. Michigan, Caltech, Univ. Utah)

A04 班 橋本 [京大] (Max-Planck Inst., Int. Chem. Res. Catalonia, Ecole Polytechnique, Lausanne, ETH)

A01 班 浦 [奈良女子大] (Univ. Washington, Univ. Maryland, N. Carolina State Univ., Washington Univ.)

（2）国際若手セミナー：

本領域では、若手研究者の交流のために、毎年 1 回秋に、以下の示すような国際若手セミナーを企画・開催を行っている。本セミナーは 45 歳以下の計画・公募班員とその共同研究者のみで構成し、4 名の班長がオブザーバーとして可能な限り参加する。平成 28 年度は、11 月に大阪において開催し、



図 7-2. 平成 28 年 11 月の国際若手セミナー

同年代の欧米外国人若手研究者を 2 名、シニアの著名外国人研究者を 1 名招待し、1 泊 2 日の合宿形式で、計 26 名の参加者がつどい、熱く本領域の将来性を語り、精密制御反応場構築のための新しい配位子や、これを活用した新しい分子変換手法、反応機構について活発な情報交換を実施した (右写真参照)。平成 29 年度も 11 月に、第 2 回目の国際若手セミナーを計画している。

（その他）人事昇進：

これらの取り組みの成果は、研究期間中 (平成 29 年 4 月 1 日時点まで) の領域内若手班員 (同時点で 45 歳以下) の教授昇進 1 件 (大阪大学)、講師・准教授昇進 4 件につながった。また、同期間中に文部科学大臣表彰若手科学者賞受賞者 2 件、Tetrahedron Young Investigator Award 1 件、Banyu Chemist Award 2 件など、自然科学全般および有機合成化学分野において顕著な成果を挙げている 40 歳以下の研究者に与えられる国内および国際的な賞が、領域内の若手班員に与えられている。

8. 研究費の使用状況（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総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

1. 研究領域内の設備・装置の購入・実験資料の共用について

以下の大型機器については、ニュースレター上で、班員に公開し、共同測定の提案を行っている。

・高分解能核磁気共鳴装置（NMR） — [東京工業大学]

日本電子社製（平成28年3月納入）

東京工業大学理学院に設置し、学内外の班員、および学内の構成員にオープンにしている。

・核スピン共鳴装置（ESR） — [大阪大学]

ブルカーバイオスピン社製（平成27年12月納入）

大阪大学工学研究科分析センターに設置し、学内外の班員（A03班、林、森内、松尾、藤枝ら）が共有している。また、班員のみならず、広く公開し、大阪大学の構成員にもオープンにしている。

・X線結晶構造解析装置 — [大阪大学]

リガク社製（平成27年11月納入）

大阪大学基礎工学研究科に設置し、学内の班員（A03班、林）や企業班員の所属企業からの依頼、また、学外の班員からも使用依頼を受けている。さらに、大阪大学のオープンファシリティーとして登録予定であり、広く大阪大学の構成員にもオープンにしている。

・GC-MSシステム — [北海道大学]

島津製作所社製（平成27年10月納入）

現在は、A02班 松永の研究室に設置しているが、今後北海道大学のオープンファシリティーに登録することになっている。

2. 総括班経費の主な使途

総括班の主な活動経費は、以下の通りである。

（1）班員内外の交流、企業研究者、海外研究者との研究討議を目的とした、国際シンポジウム、公開シンポジウム、若手国際シンポジウム主催の経費（会場費、招へい者の旅費、会議費、要旨集・ポスター印刷とその郵送費等）

（2）新しい取り組みとして、他領域との交流を企図し、3領域の合同シンポジウム（本領域と分子アーキテクトニクス、高次複合光応答）（平成28年11月）の開催にかかわる経費。

（3）若手支援のための海外派遣（若手レクチャーシップ賞）旅費（2年間で4名欧米に派遣）や、共同研究の企画・議論のための双方の訪問旅費の支援（計3件）

（4）広報活動として、ホームページの作成・更新とニュースレターの領域ホームページ上への掲載、年度末の成果報告書の作成と郵送（企業にも配付）

（5）本領域研究の広報の一環として、関連学会でのシンポジウムの企画とその際の演者招へい費

これらの取り組みの成果として、平成29年5月末までに、本新学術領域の研究グループの若手研究者や大学院生を中心に、国内学会や国際学会の会議において講演賞やポスター賞を77件（国内学会63件、国際学会14件）受賞している。また、学協会の若手に与えられる賞についても46件の受賞の報告があり、若手育成に貢献できていると考えている。また、これらの結果から、計画班に留まらず、計画班と公募班、公募班内といった領域全体にわたり計152件の共同研究が進行している。このような活発な共同研究は有機化学を主体とする研究分野においては画期的であり、本新学術領域研究の発展に直接繋がり、既に国内・国際学会での報告（40件）や学術論文（20報）に結実している。

9. 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。

大高幸一郎（京都大学・副学長、大学院総合生存学館・特定教授）

まず47名もの公募班員を受け入れていただいていることを有り難く思います。本領域の研究の裾野を広げることに大きな効果をもたらすと信じます。計画班員ならびに公募班員それぞれが独創性と新規性のある研究を推進されており、シンポジウムも楽しく聞かせていただきました。同じ班の班員間ならびに異なる班の班員間での共同研究を強力に進められており、これらが大きく発展することを期待しています。

茶谷直人（大阪大学大学院工学研究科・教授）

「精密制御反応場」は、精密に制御された反応場の創出に基づいて入手容易な原料の利用、枯渇性資源非依存型の物質変換反応の開発、環境負荷軽減等の高難度有機合成反応の実現などを目的としている。わが国が強い触媒的な有機合成研究領域をさらに発展させて、新反応の発見、あるいは従来達成が困難とされてきた高難度物質変換反応の実現をめざしている。真島領域代表の指導力もあり、当初の研究目的は順調に進捗しており、成果も十分に上がっていると評価される。また、共同研究、若手育成ともに順調に進捗している。ただ、今後、本領域が何を目標としてどのような反応を開発していくのかなど全班員の意識を共有することが必要であると思われる。

檜山爲次郎（中央大学研究開発機構・機構教授）

これまで不可能であった分子変換が実現できれば、「有機化学」の現状を打破し化学に大きなブレークスルーをもたらす。新反応開発により、医薬・農薬・機能化成品・高分子材料などのものづくりが一変する。本新学術領域の研究者が一丸となって「精密制御反応場」を創出すれば、斬新な物質変換が大きく発展するだろう。本新学術領域のヒアリング時に真島代表が語ったように、「このメンバーが一丸となって共同研究をすれば、世界の機能物質創製を先導できる」ことになるだろう。実際、各研究者が知恵を絞り研究アイデアの洗練に注力し邁進するとともに共同研究の可能性を探っている。成果はどんどん蓄積しつつある印象をつよく持つ。共同研究もすすんでいる。アウトリーチ活動も積極的におこなわれている。評価委員としてこの新学術領域研究の革新的成果に胸を膨らませて期待している。現在のところ、その期待を裏切らない活動が展開されている。後半の成果が楽しみである。

福住俊一（名城大学理工学部・特任教授、梨花女子大学・特別教授）

永年の懸案である窒素固定について着実な研究の進展が見られるなど、世界最先端の研究成果が上がっている。今後の一層の発展が期待できる。一部メンバーでは論文が見られない場合があるが、その場合はいかにチャレンジングなテーマに取り組んでいるかを明記する必要がある。

丸岡啓二（京都大学大学院理学研究科・教授）

本領域研究では、平成27年度より約2年の間に数多くの優れた研究成果を得ており、領域全体の研究が順調に進んでいることが判る。研究者間の連携についても、「精密制御反応場」の概念の共有化とともに共同研究に関する実現化の努力がなされている。領域の運営については健全になされており、国際若手セミナーの開催や日本化学会での特別企画を通して領域の次世代を育てる努力も盛込まれ、実践されている。本領域としては、遷移金属錯体反応場、生体反応場、固体表面反応場等を駆使した革新的な触媒開発という点において、最初の2年間で基本的な部分での研究成果は十分達成できたため、今後はこの領域の更なる深化と力強い展開に向けて、計画班員・公募班員が一丸となり、新しい学術領域を打ち立ててもらいたい。

山口雅彦（東北大学大学院薬学研究科・教授）

新学術領域研究「精密制御反応場」のめざすところは、次世代の環境調和した高効率触媒反応の開発にある。我が国の化学産業が世界トップレベルにあること、輸出産業として重要な位置を占めていることに鑑みると本研究には高い期待が寄せられる。我が国を代表する研究者の集団であり、ここでは既存の研究を大きく発展させる成果を与えるとともに、金属触媒化学と生体触媒化学の融合も効果的になされている。極めて優れた成果がトップジャーナルに数多く報告され、多くの国際学会発表が行われており、期待以上の成果をあげている。また、若手研究者の育成ならびにアウトリーチ活動によって国民に発信することも積極的に行われている。以上により、本新学術領域研究は高く評価され、今後の更なる発展が期待できる。

渡辺芳人（名古屋大学・理事、副総長、大学院理学研究科・教授）

我が国の化学研究は、国際的にも競争力が高い分野である。特に、有機金属化合物を使った有機合成は、世界のフロントランナーとして多くの新しい合成プロセスを生み出している。新学術領域研究

「精密制御反応場」では、当該研究分野の先頭を切って活躍する40代や50代前半の研究者を意識的に結集し、相互のライバル意識をかき立てながら、同時にお互いから多くのことを学ぶ場を提供している。この戦略は十分に成功を収めつつあり、インパクトのある論文が多数発表されているのみならず、10年後の日本の化学を牽引する人材が育っていることを実感している。

Jean-François Carpentier (University of Rennes 1, France)

The symposium was well designed and very interesting. On a short, 2-day, well suited time period, it first offered a nice opportunity to listen a series of lectures from international (including Japanese) senior scientists on topical research fields, with very recent and exciting results. The topics covered were diverse but all revolved around molecular catalysis for organic transformations, so that all of them were of high interest to me (and I believe to the whole audience). Second, regarding the Japanese program itself “Precisely Designed Catalysts with Customized Scaffolding”, the series of lectures, oral and poster presentations delivered during the symposium were also all of high interest. They clearly demonstrated that the teams involved in this program are topnotch and that they address topical, challenging research. New directions, which were not necessarily in the traditional portfolio of some research groups a few years ago, have been initiated. The scientific achievements, and the resulting papers that have been published since the program was launched, are most significant and clearly at the highest international level for many of them. My feeling is that this national program is developing very well and will have an impact on the international playground. Finally the symposium was very well organized and its format allowed ideal interaction between all participants, senior and junior ones; I believe this is an important aspect to accustom the younger Japanese scientists to international science.

Thomas R. Ward (University of Basel, Switzerland)

Herewith I would like to thank you for your generous invitation to deliver a lecture in the context of the 2nd International Symposium on Precisely Designed Catalysts with Customized Scaffolding, held in Osaka on May 12-13 2017. I was most impressed by the quality of the presentations and posters of the members of the MEXT network “Precise Formation of a Catalyst Having a Specified Field for Use in Extremely Difficult Substrate Conversion Reactions” Clearly, the quality of the science achieved within this Japan-wide network is best-in-class. The various discussions that I had during the poster sessions and the social events unambiguously demonstrate the excellent scientific level and high motivation of the younger generation of scientists involved in this exciting initiative. Building upon its long tradition of outstanding innovation in organometallic catalysis, I was highly impressed, among others, by the following presentations: i) Masaya Sawamura (Hokkaido University, catalyst compartmentalization using polystyrene cross-linked phosphine ligands), ii) Laurean Ilies (Tokyo University, C–H activation using iron complexes) and iii) Junichiro Yamaguchi (Waseda University, decarbonylative coupling using aromatic esters). In addition, several groups presented fascinating progress in the development of alternative catalytic systems including, enzymatic, photocatalytic and hybrid catalytic systems: i) Osami Shoji (Nagoya University, Decoy strategy to hydroxylate short alkanes by cytochrome P450 BM3), ii) Norio Shibata (Nagoya University, trifluoromethylation of alkenes and alkynes using subphthalocyanines and red-light irradiation), iv) Shunsuke Kato (Osaka University, C–H activation using a {Cp–Rh} covalently embedded in a β -barrel protein) and v) Koji Yamaoka (Doshisha University, highly efficient C–H activation using a novel Fe-carboxamido complex). Overall, I am deeply impressed by the quality of the science that was presented by the MEXT members during the symposium. I wish to congratulate you and wish you much success in the continuation of this exciting project.

Qi-Lin Zhou (Nankai University, PR China)

The catalysis plays a key role in the creation of new substances and the transformations of substances. The “Precise Formation of a Catalyst Having a Specified Field for Use in Extremely Difficult Substrate Conversion Reactions” supported by JSPS is a unique program, which focus on the development of highly efficient catalysts to solve those extremely difficult substrate conversion reactions. This program will deeply influence the development of the catalysis science worldwide. From the reports presented in the 2nd International Symposium on Precisely Designed Catalysts with Customized Scaffolding, the program team lead by Prof. Kazushi Mashima already accomplished a remarkable progress in various catalysis area. The researches happening in many groups are impressive and definitely high level.

10. 今後の研究領域の推進方策（2 ページ以内）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

研究領域の推進方策

我が国は、世界の最先端をリードする研究を推進する有機合成化学分野の研究者が極めて多い。しかし欧米に比べると関連分野の横のつながりは必ずしも強くない。革新的触媒開発において、錯体化学、超分子化学、生物化学、界面化学、理論化学等との分野横断的な連携は必須である。各分野から、単独でも十分に世界を先導できる研究者を新学術領域というコンソーシアムの枠組みに結集し、情報交換や共同研究を積極的かつ有機的に推進する。その結果、触媒開発研究における融合とブレークスルーが誘発され、有用物質変換を質的に転化発展させる強力なチームが誕生すると確信している。

(A) 共同研究の推進

異分野・関連分野の共同研究を支援するためのプラットフォームとして、新学術領域研究を組織し以下の項目について引き続き重点的に取り組む計画である。世界を先導できる研究者を新学術領域の枠

組みに結集する重要な理由は、共同研究を積極的におこなえるプラットフォームを提供することである。これにより、「精密制御反応場」の飛躍的発展を目指している。この目的のために計画研究については、採択直後の平成 27 年 9 月に、計画班員全員の発表会を非公開で開催し、具体的な共同研究の提案を促した。研究開始当初は、総計 25 件の共同研究の提案が行われた。さらに、平成 28 年度に採択された公募班員と計画班員、公募班員間の有機的な情報交換と積極的な共同研究の実施を目指し、昨年 5 月に非公開の全体会議を全員が口頭かつポスター発表形式で行った。この結果、班員間のマッチングが予想以上に進み、多くの共同研究の提案が行われた（総数 152）。公募班員間の共同研究提案については、公募班員の国内旅費を総括班から支援し、単にサンプルなどの交換にとどまらず、直接議論することにより、アイディアの共有を促した。その結果、支援を受けた公募班員から、「大変有意義な議論を行えた」との反響があり、今後もこのような支援を継続する計画である。

これらの実績を踏まえ、平成 29 年以降についても班員間の共同研究を推進する計画であり、それにより、有機合成化学の研究分野では従来活発でなかった共同研究を行うことの有効性が認識され、活発化する契機とし、より高いレベルの反応場研究へと発展させることにより、世界を先導し続けることを企図している。

○ 他領域との交流による異分野間共同研究の推進

異分野の交流による新しい研究領域の開拓を企図し、新学術領域の 3 領域[分子アーキテクトニクス：単一分子の組織化と新機能創成(茅田代表)・高次複合光応答分子システムの開拓と学理の構築(宮坂代表)・高難度物質変換反応を指向した精密制御反応場の創出(真島代表)]が集う合同シンポジウム（大阪大学豊中キャンパスシグマホール：平成 28 年 11 月 18 日（金）・19 日（土））を開催した。今後も、複数領域の開催することにより異分野間の共同研究を

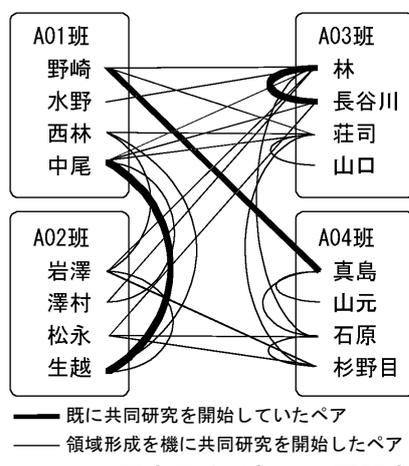


図 10-1. 研究開始当初の共同研究

新学術領域研究：三領域合同シンポジウム

分子アーキテクトニクス：単一分子の組織化と新機能創成
高次複合光応答分子システムの開拓と学理の構築
高難度物質変換反応を指向した精密制御反応場の創出

日時：平成28年11月18日～11月19日
会場：大阪大学シグマホール（豊中キャンパス）

11月18日（金曜日）
18:00 茅田 博（阪大院基礎工） 趣旨説明と領域紹介
19:00 宮坂 博（阪大院基礎工） 領域紹介と高次複合光応答について
20:00 真島和志（阪大院基礎工） 領域紹介と多様な金属錯体の特異な触媒機能
21:00 林 高史（阪大院工） 光駆動触媒の構築を目指した人工光触媒系の構築
22:00 田中清文（九工大院生命体工） SWNT/ポリ(ピロリジン)ネットワークによる
超分子ナノ構造の構築

11月19日（土曜日）
10:00 山口和也（阪大院工） 極微構造固体触媒による高効率酸化反応
11:00 家 裕隆（阪大院研） 分子アーキテクトニクスに向けた機能性ユニットの開発
12:00 休息
13:00 松田健児（阪大院工） 2次元、3次元に集積したフォトリソミック化合物の高次光応答
14:00 山田 亮（阪大院基礎工） 単分子ダイオード 外部電界による分子軌道の変形を利用した整流特性の発現
15:00 総括

MolArch PhotoSynnergetics

図 10-2. 三領域合同シンポジウムポスター

推進する計画である。

(B) 企業研究者との積極的な交流

本新学術領域研究は、新しい「精密制御反応場」の創出による高難度物質変換反応の開発を目的としているので、社会で必要とされる触媒反応の開発という視点は常に重要である。そこで、総括班内に企業の研究者を中心とした企業支援班を置くことにより、このような社会のニーズに合致した研究の推進を確保する。また、本学際研究の成果を企業の最先端の研究に活かすことが可能であるか、上記企業班員に積極的に助言を求める計画である。

(C) 積極的な広報活動

○ 公開シンポジウム

班員による研究成果を発表する公開シンポジウムを年に二回開催する。これまでも以下の日程で公開シンポジウムを開催してきた。今後も継続して開催する計画である。

第一回（東京工業大学、平成 28 年 1 月）、第二回（名古屋大学、平成 29 年 1 月）

第三回（大阪大学、平成 29 年 5 月）、第四回（東京大学、平成 30 年 1 月）

第五回（北海道大学、平成 30 年春予定）、他

○ 国際シンポジウムの開催

国内外の関連研究者を招聘して行う国際シンポジウムを毎年開催する計画である。これまでの実績は、以下の通りである。

第一回国際シンポジウム（大阪市、平成 28 年 7 月）、

第二回国際シンポジウム（大阪大学、平成 29 年 5 月）

○ 国際若手セミナーの開催

少人数の選りすぐりの若手研究者による勉強会を定期的実施する。これまでも以下の日程で若手セミナーを開催してきた。今後も継続して開催する計画である。

第一回若手セミナー（大阪府箕面市、平成 28 年 11 月 11 日、12 日）(海外から 3 名招聘)

第二回若手セミナー（愛知県西浦市、平成 29 年 11 月 17 日、18 日）(海外から 2 名招聘)

○ 海外での国際シンポジウムの開催

平成 29 年 11 月 20 日～22 日、シンガポールの NTU において、本学術領域とシンガポールおよびドイツと合同で、触媒反応に関する国際シンポジウムを開催する計画である。

○ 若手研究者の海外での講演会

少人数の選りすぐりの若手研究者を欧米を中心とした海外の短期間派遣し、複数の大学等で講演会と研究討議を行なうことを計画している。昨年度は河内が、米国西海岸の 5 大学を訪問した。本年度は、浦、熊谷、橋本の 3 名が北米および欧州の大学を訪問する。今後も継続する計画である。

○ ニュースレターの発刊とホームページによる広報

これまでと同様に、今後も毎月ニュースレターを発刊するとともに、ホームページによる情報発信・広報を行う計画である。

○ アウトリーチングへの取り組み

領域共通のポスターを準備し、これを班員に配布している。大学説明会や高校生への啓蒙活動の際などで積極的に取り組むように促しており、平成 28 年度の実績は 76 回であった。これを継続していく計画である。