

領域番号	2907	領域略称名	ハイブリッド触媒
研究領域名	分子合成オンデマンドを実現するハイブリッド触媒系の創製		
研究期間	平成29年度～令和3年度		
領域代表者名 (所属等)	金井 求（東京大学・大学院薬学系研究科・教授）		
領域代表者 からの報告	<p><u>(1) 研究領域の目的及び意義</u></p> <p>医農薬や機能性材料など、人類の健康維持や豊かな社会生活に不可欠な物質の多くは、有機分子から成り立っている。これらを創り出し、安定供給するための唯一の方法が有機合成化学である。有機合成化学は、これまで永続的な発展を遂げてきているものの、未解決な重要問題も幾つか存在する。その最たるものは、フラスコ内では一つ二つの反応を行うことはできても、生体内のような複数の酵素（生体触媒）が関与する多触媒反応による有機分子の活性化や複雑な化合物の一挙合成になると、既存の触媒化学では全く歯が立たないということであろう。そのため現在の有機合成化学の力量では、必要な有機分子を必要な量、供給することは非常に困難である。この課題の解決には、有機分子の合成法の飛躍的な進歩と、それを牽引する革新的な触媒の創製が不可欠である。</p> <p>本新学術領域では、複数の触媒の働きを重奏的に活かしたハイブリッド触媒系を創製し、実現すれば大きなインパクトを持つものの、従来は不可能であった、極めて効率の高い有機合成反応を開拓する。すなわち、独立した機能を持つ複数の触媒が機能融合・重奏して作用するハイブリッド触媒系の創製により、安定な分子の活性化（反応性：A01）、反応の高次制御（選択性：A02）、ドミノ反応（連続性：A03）を達成し、構造が単純で入手容易な原料から優れた機能を持ち付加価値の高い複雑な有機分子を、要求に応じて迅速に組み上げる分子合成オンデマンドを実現する。これにより、革新的な有機合成化学、分子化学の新地平を拓く。</p>		
	<p><u>(2) 研究の進展状況及び成果の概要</u></p> <p>有機合成化学を基軸として、物理化学、無機化学、光・電気化学、高分子化学、固体・界面化学、理論科学といった多分野の融合を図りながら、新しい触媒創製概念であるハイブリッド触媒化学を推し進めてきた。公開シンポジウム、若手道場、国際シンポジウム、リトリートなどを計16回主催し、共催学会でのミーティングや個々の人的交流を含めると、ほぼ毎月のようにハイブリッド触媒を中心としたサイエンスの議論・意見交換を研究者間で繰り返してきた。この前半期間を通じて、異分野研究者間の意思疎通が十分に熟成してきたものと実感している。いよいよ後半期間では、前半で培った成熟した分野融合をもとに数多くの重要な成果が結実してくるものと確信を持っている。</p> <p>本領域の特筆すべき特色は、触媒化学を中心として、多分野の研究者が有機的に融合している点である。この強みをもとに、特に、1) 計算科学・機械学習の積極活用による、予測性を導入したハイブリッド触媒系の開発、2) 入手容易な有機分子を原料として天然物や高分子等の付加価値の高い有機分子の短工程合成に寄与するハイブリッド触媒系の開発、において顕著な進展がみられた。優れた成果に関しては積極的に二次発信をおこなっており、20件のプレスリリースと80件のメディア報道をおこなった。</p>		

科学研究費補助金審査部会 における所見	A (研究領域の設定目的に照らして、期待どおりの進展が認められる)
	<p>本研究領域は、フラスコ内で一つ二つの有機合成反応を単独で行うのではなく、生体内反応のように独立した機能をもつ複数の触媒が協働・重奏的に働く「ハイブリッド触媒」の概念のもと、有用有機化合物の触媒的「オンデマンド合成」の実現を目指している。例えば、光触媒と不斉触媒の組み合わせにより触媒的不斉 Grignard 型反応を達成するなど、従来の合成法を凌駕する優れた成果が順調に出ている。若手育成や国際的な認知度の向上も進みつつあり、期待通りの進展が認められ、今後より一層の進展が期待される。</p> <p>一方、ハイブリッド触媒の概念を拡大解釈した反応例がいくつか見受けられた。領域代表者のリーダーシップによって概念の明確化と共通化を進め、共同研究の推進、触媒の創製に留まらない学理の構築、より一層の国際的な認知度の向上が望まれる。</p>