

科学研究費助成事業（特別推進研究）研究進捗評価

課題番号	17H06091	研究期間	平成29(2017)年度 ～令和3(2021)年度
研究課題名	分子活性化を基軸とする次世代型触媒反応の開発		
研究代表者名 (所属・職)	茶谷 直人 (大阪大学・工学研究科・教授)		

【令和2(2020)年度 研究進捗評価結果】

該当欄		評価基準
	A+	当初目標を超える研究の進展があり、期待以上の成果が見込まれる
○	A	当初目標に向けて順調に研究が進展しており、期待どおりの成果が見込まれる
	A-	当初目標に向けて概ね順調に研究が進展しており、一定の成果が見込まれるが、一部に遅れ等が認められるため、今後努力が必要である
	B	当初目標に対して研究が遅れており、今後一層の努力が必要である
	C	当初目標より研究が遅れ、研究成果が見込まれないため、研究経費の減額又は研究の中止が適当である

(評価意見)

本研究は、配向基を導入した反応基質を設計し、これに遷移金属触媒を作用させることにより、炭素－水素結合や炭素－フッ素結合などの、通常であれば不活性な化学結合を活性化すること、そしてそれを起点とする、触媒的に有機分子を変換する反応の開発を目指したものである。これまでの研究で、種々の系について、興味ある基礎的知見が蓄積されている。今後、多くの事例を総合し、理論化学者との共同研究も含め、配向基の構造の違いによる活性化機構の変化などを基に、「不活性結合の活性化」の本質に迫り、そこから一般的原理や触媒開発の指針などが導き出されるよう期待する。

【令和5(2023)年度 検証結果】

検証結果	当初目標に対し、期待どおりの成果があった。
A	従来の有機合成化学分野では反応性の高い結合の活性化が主に取り扱われてきたが、本研究では不活性な化学結合の活性化に取り組み、①芳香族アミド類のオルト位にあるメチル基の炭素－水素結合とメタ位の炭素－水素結合の活性化を伴う新規な環化反応の開発、②アシルイミダゾールを新しい配向基とする分子変換反応の開発、③ニッケル触媒によるアミデート配向基を用いた炭素－水素結合ならびに炭素－フッ素結合の活性化が温和な条件下で進行する画期的な反応系を見いだした。特に、③の系は、炭素－酸素結合、炭素－シアノ結合、炭素－硫黄結

合の活性化にも適用できる汎用性の高い手法であることを見いだした。さらに、遷移金属触媒を使わない炭素－水素結合のボリル化反応を達成することができた。以上の成果は、医農薬、天然物、機能性有機材料、高分子材料の合成など有用物質を必要とする周辺分野に大きな波及効果を与えられる。カーボンニュートラル、グリーンイノベーション分野の進展にも大きく寄与する研究であり、期待された成果が上がったと認められる。