

領域略称名： 有機分子触媒 領域番号： 2304

平成25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

「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25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	p. 3
2. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	p. 5
3. 研究の進展状況	p.9
4. 若手研究者の育成に関する取組状況	p.14
5. 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）	p.15
6. 総括班評価者による評価	p.17
7. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	p.20
8. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公开发表等）	p.27
9. 今後の研究領域の推進方策	p.38
10. 組織変更等の大幅な計画変更がある場合は当該計画	p.40

1. 研究領域の目的及び概要（2ページ程度）

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、これ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」の新技术を開発できる「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。

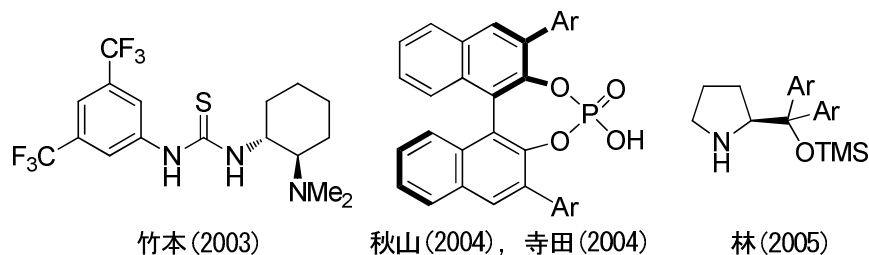
【有機分子触媒とは何か、新学術領域としての意義と目的】

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）。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500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のみ



図2. 日本人研究者が開発した有機分子触媒の代表例



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する。

【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触媒現象の解明を進展させることで、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ため、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、技術創設立国・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ている。

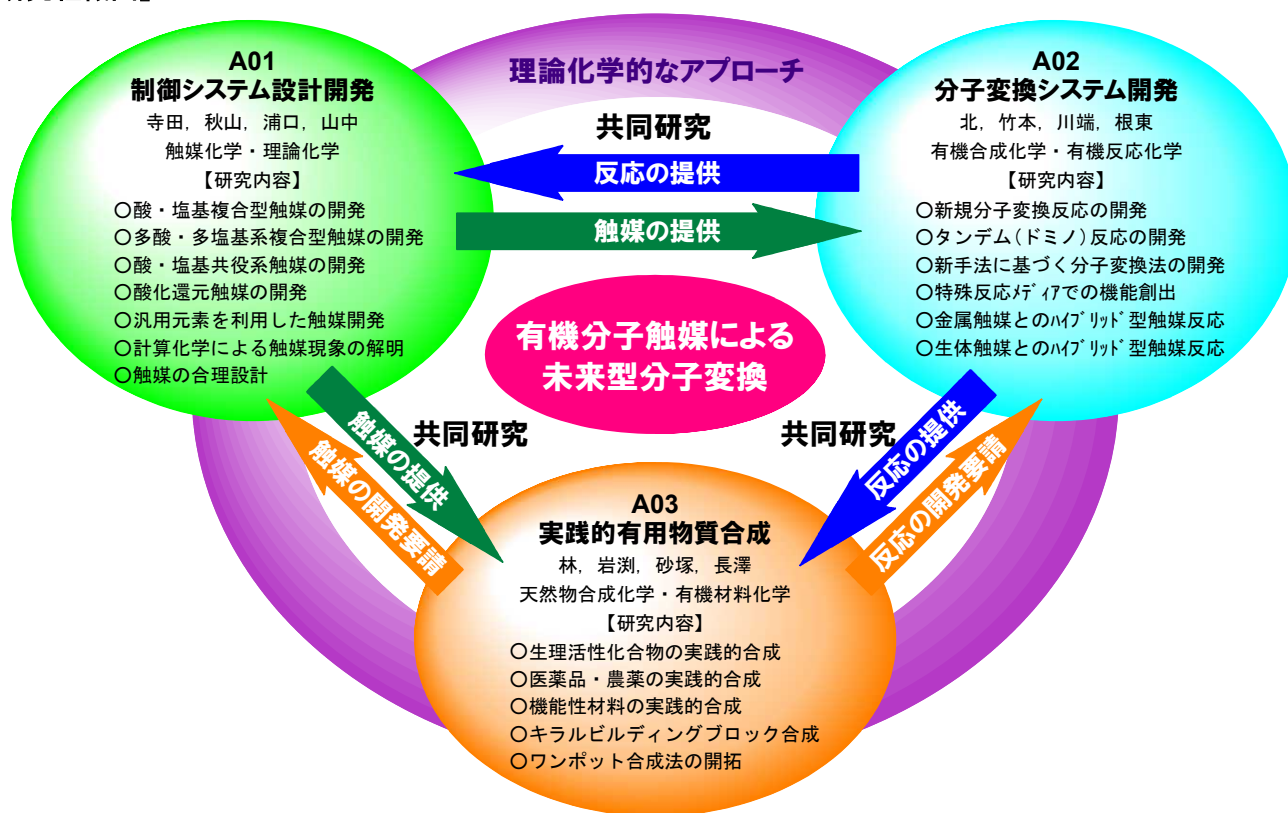
2. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況（2 ページ程度）

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、枯渇資源の使用を極力控え、地球資源と地球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ている。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が密に結びつくことで各項目間との連携を有機的・発展的に行う環境を整える。これにより、本領域の研究の対象とする「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」を現実のものとし、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。

【研究組織図】



【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る。総括班は、実施グループと評価グループから構成する。

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、議論の機会を数多く設ける。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する。

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 [2005年度~2009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 [元塩野義製薬(株)・リサーチアドバイザー])
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・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いた。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ている。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。いずれも日本プロセス化学会の副会長を務めており、製薬企業にて長らくプロセス化学に携わり本領域の目指すべき「モノづくりの未来像創出」を評価して頂く上で十分な知識と経験を有している。

【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)、秋山 隆彦 (学習院大理・教授)、浦口 大輔 (名大院工・准教授)、山中 正浩 (立教大理・准教授) (研究分担者：内丸 忠文、都築 誠二)

公募研究代表者 (15名) : 吉田 雅紀 (北大院工・助教)、小笠原 正道 (北大触研・准教授)、是永 敏伸 (岩手大院工・准教授)、鳴海 哲夫 (東京医科歯科大生体材料工学・助教)、山田 眞二 (お茶大院理・教授)、波多野 学 (名大院工・准教授)、加納 太一 (京大院理・講師)、村井 健一 (阪大院薬・助教)、今田 泰嗣 (徳島大院ソシオテクノ・教授)、松原 亮介 (神戸大院理・准教授)、植田 光洋 (阪府大院理・助教)、御前 智則 (兵庫県立大院物質理・助教)、矢内 光 (東京薬大薬・助教)、坂田 健 (星薬科大薬・准教授)、田中 富士枝 (沖縄科学技術大学院大・准教授)

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る。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、無駄の多い従来の触媒開発から脱却して合理的な触媒設計の道を切り開く。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・発展的に結びつける。

【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) (研究分担者：土肥 寿文)、竹本 佳司 (京大院薬・教授) (研究分担者：宮部 豪人、小林 祐輔)、川端 猛夫 (京大化研・教授)、根東 義則 (東北大院薬・教授)

公募研究代表者 (11名) : 金井 求 (東大院薬・教授)、三宅 由寛 (名大院工・准教授)、工藤 一秋 (東大生産研・教授)、矢倉 隆之 (富山大院薬・教授)、柴田 哲男 (名工大院工・教授)、滝澤 忍 (阪大産研・准教授)、雨夜 徹 (阪大院工・助教)、菅 誠治 (岡山大院自然科学・教授)、徳永 信 (九大院理・教授)、田中 正一 (長崎大院医歯薬・教授)、中島 誠 (熊本大院生命科学・教授)

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する。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タンデム (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実現する。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する。

【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）計画研究分担者（1名）： 班長：林 雄二郎（東北大院理・教授）、岩淵 好治（東北大院薬・教授）、砂塚 敏明（北里大生命研・教授）、長澤 和夫（東京農工大院工・教授）（研究分担者：五月女 宣裕）

公募研究代表者（9名）： 佐藤 敏文（北大院工・教授）、岡 夏央（岐阜大工・准教授）、間瀬 暢之（静岡大工・准教授）、原口 直樹（豊橋技大院工・助教）、小槻 日吉三（高知大・理）、畑山 範（長崎大院医歯薬・教授）、石川 勇人（熊本大院自然科学・准教授）、濱島 義隆（静岡県立大薬・教授）、鈴木 由美子（上智大理工・准教授）

有機分子触媒を用いて実践的な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する。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する。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、タンデム（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おり、トータル効率に優れた分子変換が期待される。A01 班ならびに A02 班で見出された知的基盤を共有、統合化し、A03 班による実践的な有用物質合成へと発展的に展開することで、合成プロセスとして真に優れた分子変換を実現する。

【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いる。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 1 にまとめる。領域内共同研究が順調に進められていることは①→②→③と増加傾向にあることから明白である。併せて本領域外との共同研究の実施状況も併記する。公募に漏れた人材で、今後、本領域に加わるべき研究者の潜在数を示していると考えられ、来年度に控える公募の再募集の際に採択件数を増やすなど、熟慮すべき案件である。

表 1. 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	6	7	21	34
	A02 班/A02 班	0	0	2	2
	A03 班/A03 班	0	0	5	5
	小計	6	7	28	41
研究項目間 共同研究	A01 班/A02 班	5	4	16	25
	A01 班/A03 班	3	10	11	24
	A02 班/A03 班	0	1	5	6
	小計	8	15	32	55
領域内共同研究	総計	14	22	60	96
領域外共同研究	A01 班/領域外	38	37	32	107
	A02 班/領域外	32	41	26	99
	A03 班/領域外	36	14	28	78
	総計	106	92	86	284

○主な共同研究論文（領域内の共同研究による原著論文の抜粋）

- (1) "Kinetic Resolution in Chiral Brønsted Acid Catalyzed Aldol Reaction: Enantioselective Robinson-type Annulation Reaction."
[A01/A01] Yamanaka, M.; Hoshino, M.; Katoh, T.; Mori, K.; *Akiyama, T.
Eur. J. Org. Chem. **2012**, (24), pp.4508-4514.
- (2) "Enantioselective Synthesis of Multisubstituted Biaryl Skeleton by Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Desymmetrization/Kinetic Resolution Sequence."
[A01/A01] Mori, K.; Ichikawa, Y.; Kobayashi, M.; Shibata, Y.; Yamanaka, M.; *Akiyama, T.
J. Am. Chem. Soc. **2013**, *135* (10), pp.3964-3970.
- (3) "CCSD(T) Level Interaction Energy for Halogen Bond between Pyridine and Substituted Iodobenzenes: Origin and Additivity of Substituent Effects."
[A01/A01] *Tsuzuki, S.; Uchimaru, T.; Wakisaka, A.; Ono, T.; Sonoda, T.
Phys. Chem. Chem. Phys. **2013**, *15* (16), pp.6088-6096.
- (4) "Selective *o*-Difluoromethylation of 1,3-Diones by Bromodifluoromethylating Reagents."
[A01/A02] Liu, G.; Wang, X.; Xu, X.-H.; Lu, X.; Tokunaga, E; Tsuzuki, S.; *Shibata, N.
Org. Lett. **2013**, *15* (5), pp.1044-1047.
- (5) "Ruthenium-Triggered Ring-Opening of Ethynylcyclopropanes: [3+2] Cycloaddition with Aldehydes and Aldimines Involving Metal-Allenylidene Intermediates."
[A01/A02] Miyake, Y.; Endo, S.; Moriyama, T.; Sakata, K.; *Nishibayashi, Y.
Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, *52* (6), pp.1758-1762.
- (6) "Investigation of the Carboxylate Position during the Acylation Reaction Catalyzed by Biaryl DMAP Derivatives with an Internal Carboxylate."
[A01/A02] 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.
- (7) "An Organocatalytic, Enantioselective Intramolecular [6+2] Cycloaddition Reaction for the Formation of Tricyclopentanoids and Insight on its Mechanism from a Computational Study."
[A01/A03] *Hayashi, Y.; Gotoh, H.; Honma, M.; Sankar, K.; Kumar, I.; Ishikawa, H.; Konno, K.; Yui, H.; Tsuzuki, S.; *Uchimaru, T.
J. Am. Chem. Soc. **2011**, *133* (50), pp.20175-20185.
- (8) "Organocatalytic 1,4-Addition Reaction of $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ -Diunsaturated Aldehyde versus 1,6-Addition Reaction."
[A01/A03] *Hayashi, Y.; Okamura, D.; Umemiya, S.; *Uchimaru, T.
ChemCatChem. **2012**, *4* (7), pp.959-962.
- (9) "Fluorogenic probes for chemical transformations: 9-anthracene derivatives for monitoring reaction progress by an increase in fluorescence."
[A01/A03] *Mase, N.; Takabe, K.; *Tanaka, F.
Tetrahedron Lett. **2013**, in press.

他5報

3. 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毎に整理する〕（3 ページ程度）

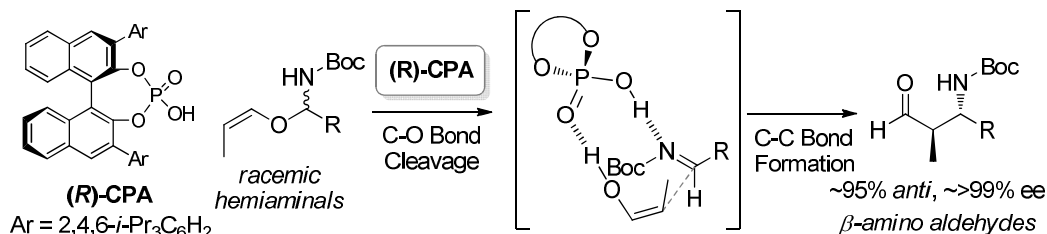
研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在どこまで研究が進展しているのか記述してください。また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らして、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究毎に記述してください。

【A01：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ことで、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ことにより、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ている。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ている。今後、更に、班内外の共同研究を強力に推進する事により、実験および理論化学の協同作業により有機分子触媒反応の反応機構、立体制御の機構を明らかにし、生体触媒を凌駕する新たな効率的な有機分子触媒の開発を目指していく予定である。

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：是永 敏伸 准教授との共同研究）

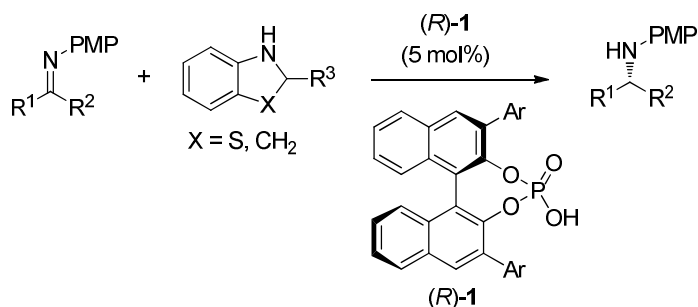
我々は有機分子触媒の制御システム開発を目指しているが、高度な立体化学制御を実現する上で、反応機構の解明は大きな課題となっ



ている。特に我々が主たる研究対象としているキラルブレンステッド酸触媒では、反応基質と触媒は比較的自由度の高い水素結合を介して相互作用しており、制御機構の理解が今後の開発研究において不可欠である。一方で、我々は高エナンチオ選択的アザ Petasis-Ferrier 転位反応の開発に成功しているが、この転位反応ではラセミ体のヘミアセタールから出発しても高いエナンチオ選択性で β -アミノアルデヒドが得られるという特異なエナンチオ収束機構で進行することを見出している。C-O 結合開裂と C-C 結合生成の 2 段階から成る本転位反応の機構解明を、実験的なアプローチと併行し、計算化学による理論的な解析を是永敏伸准教授（A01 班）との共同研究によって進めた結果、エナンチオ収束機構を明らかにした（学会発表済み）。今後の制御システム設計開発において重要な研究成果を挙げることに成功した。

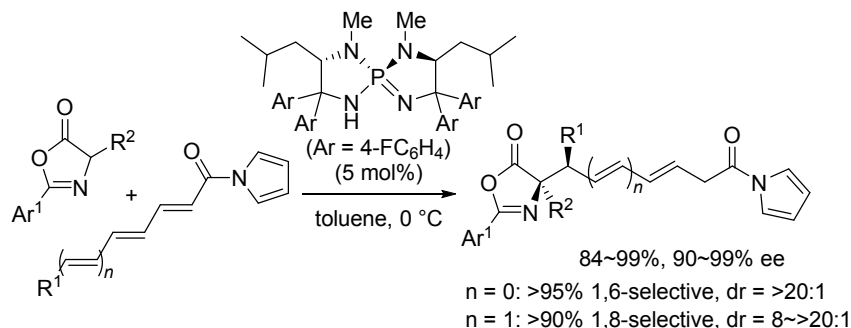
秋山 隆彦：キラルブレンステッド酸触媒の理論的制御システム設計（A01 班：山中 正浩 准教授との共同研究）

リン酸をブレンステッド酸触媒として、ベンゾチアゾリン（X=S）を水素供与体として用いる事により、ケトイミンの水素移動型還元反応が効率良く進行し、対応するアミン類が極めて高い光学純度で得られる事を見出した。様々なケトイミンの還元反応に有効である事を明らかにしている。また、炭素類縁体であるインドリン（X=CH₂）が安定かつ優れた水素供与体として機能する事も見出している。立教大学山中准教授（A01 班）が立体制御機構の理論的解析を担当し、共同で研究を進めている。



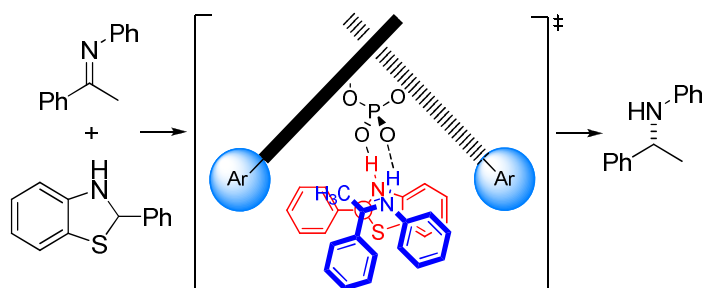
浦口 大輔：機能型キラルオニウム塩の設計に基づく高選択的分子変換法の開拓 (A01 班：山中 正浩 准教授、坂田 健 准教授との共同研究)

キラルテトラアミノホスホニウムイオンの「共役塩基の触媒作用」を利用することで、電子不足な二重結合への共役付加反応における三つの選択性 (位置・ジアステレオ・エナンチオ選択性) を同時に制御することに初めて成功した (*JACS* **2012**, *134*, 19370)。本反応では、4 位に置換基を持つアズラクトンを様々な δ -アルキル置換ジエニルアシルピロールへほぼ完全な 1,6 および立体選択性で付加させる上で、天然型のロイシンから簡単に合成できるキラルイミノホスホランが有機強塩基触媒として決定的な役割を果たす。さらに、この知見を ζ -アルキル置換トリエニルアシルピロールを用いる 1,8 選択的共役付加反応へと展開させ、反応条件をわずかに調整するのみで高い立体選択性の獲得に成功した。現在、反応の詳細に理論化学的に迫るため、山中准教授・坂田准教授 (A01 班) と共同研究を進めている。



山中 正浩：キラルブレinstेट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, A02 班：川端 猛夫 教授, A03 班：林 雄二郎 教授との共同研究)

理論研究と実験研究の緊密な連携のもとに、様々な不斉有機触媒反応の制御システム (基質/触媒間の相互作用や活性化、立体制御機構) の本質を解明し、得られた知見に基づく合理的・革新的な有機分子触媒の設計へと展開する。これまでに、キラルリン酸触媒やプロリノール系触媒を中心に秋山教授 (A01 班)、川端教授 (A02 班)、林教授 (A03 班) らとの共同研究が進展している。特に、キラルリン酸触媒によるケチミンの水素移動型不斉還元反応については、秋山 (A01 班) が見出したベンズチアゾリンを水素源とする不斉還元反応について理論的検討を行い、本反応がリン酸の酸・塩基複合機能による二重活性化機構で進行することを見出した。また、反応基質とキラルリン酸触媒の 3,3'-位置置換基との立体相互作用によって、ベンズチアゾリンの一方の光学活性体が優先的に反応して高立体選択性を達成していることを解明した。さらに得られた知見に基づき、水素源をインドリンに替えることで類例のないインドリンの酸化的速度論分割へと展開し、秋山教授 (A01 班) による実験検討と連携して理論的検討を推進している。



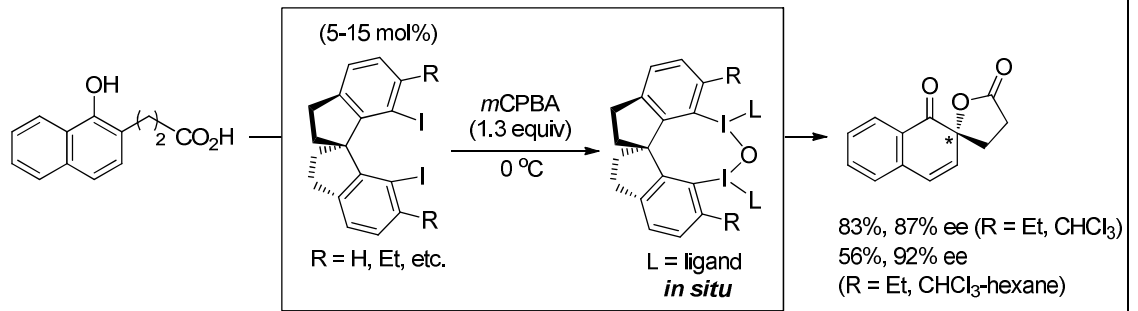
【A02：有機分子触媒による分子変換システム開発】

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、触媒反応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未開拓な分子変換反応の開発を行う。

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 (超原子価ヨウ素触媒、アミノチオ尿素触媒、DMAP 触媒、オニウム塩触媒) に焦点をあて、触媒構造を改変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、さらには新反応の開発もすでに幾つか達成している。また、触媒活性化機構や触媒—基質間相互作用の詳細を明らかにするため、新学術領域内あるいは研究課題によっては領域外の研究者間で共同研究が活発に行われており、すでに異分野研究者間での学術交流と共同研究実施の駆動力になりつつある。今後は、本領域研究に必要な共同研究者を新たに発掘・確保することでこの現象をさらに加速させ、有機分子触媒研究の更なる発展と多様な研究者による新たな視点や手法を活用した共同研究の推進や学際領域の創成を目指したい。

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

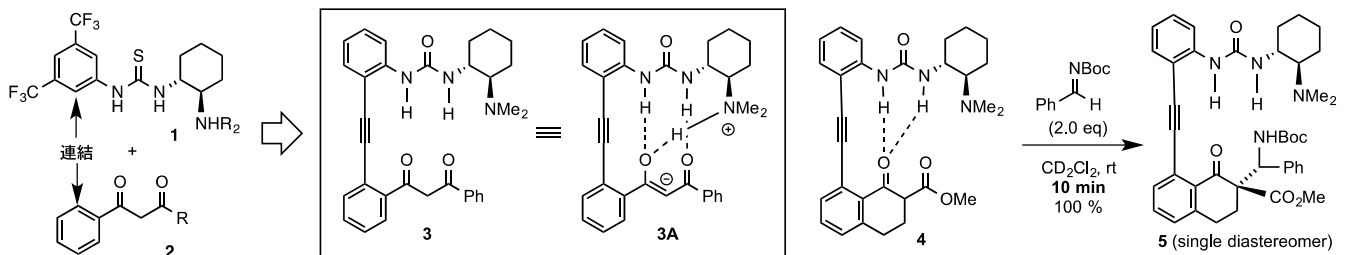
我々は、酸素架橋構造を有する二核超原子価ヨウ素化合物がフェノール類に対して高い反応性と化学選択性を示すことを明らかにしている。今回その構造修飾を行



い、ヨウ素のオルト位の置換基が大きく不斉収率を向上させることを見出した。これにより室温付近で世界最高水準の触媒的な分子内スピロ環化に成功し、共同研究で行った X 線構造解析の結果より、フェノール脱芳香族化の不斉誘起メカニズムを明らかにした。

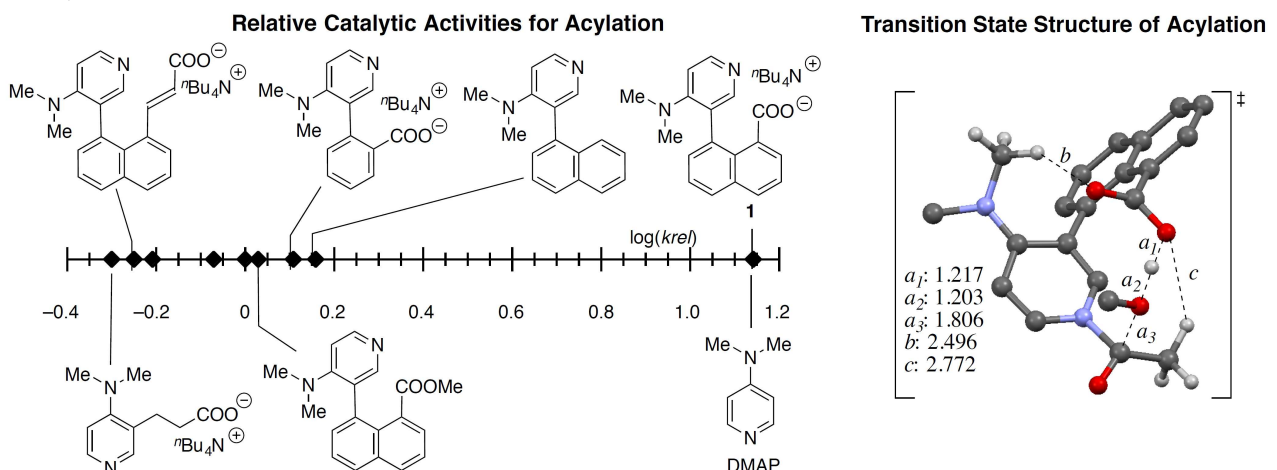
竹本 佳司：分子間相互作用ネットワークを駆使した革新的有機分子触媒による新反応開発 (A01 班：坂田 健准教授との共同研究)

我々が世界に先駆けて開発したチオ尿素触媒 **1** が多くの触媒的不斉反応に有効であることを報告してきたが、その詳細な不斉発現機構は明らかではなく、より優れた新触媒を設計する障害となっていた。今回この問題を解決するため、触媒 **1** と基質 **2** を連結した擬似中間体モデル **3, 4** を合成し、その構造解析から **3, 4** が水素結合とイオン結合からなる多点相互作用により興味深い立体構造 **3A** と **4** をとることを明らかにした。さらに A01 班の坂田らと計算化学的手法を用いた共同研究を実施することにより、不斉 Mannich 反応の全エネルギープロファイルを求め、最も確からしい不斉発現メカニズムを含む触媒反応機構を提唱した。



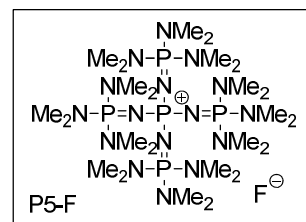
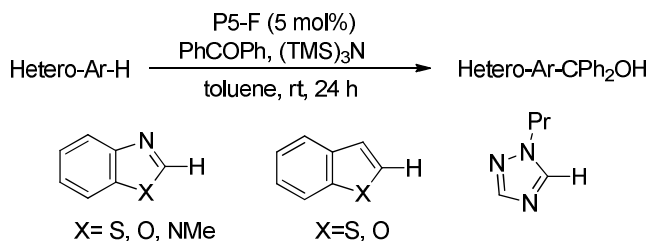
川端 猛夫：基質認識型有機触媒による位置選択的分子変換 (A01 班：山中 正浩 准教授との共同研究)

DMAP と酸無水物を用いるアルコールのアシル化では、活性種 *N*-アシルピリジニウムイオンのカウンターアニオンが一般塩基として作用し、アシル化を加速すると推測される。実際に、DMAP 部とカルボキシレート部を連結した一連の触媒の中で、ピリジン環に近接するカルボキシレートを持つ触媒 **1** が特異的に高いアシル化の触媒活性を示した。山中正浩准教授 (A01 班) との共同研究で進めた DFT 計算により求めた遷移状態はこの仮説を裏付けた。



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

フッ化オニウムとアミノシランから系内で発生させたオニウムアミドを用い芳香環とカルボニル化合物との有機触媒的な付加反応が円滑に進行することを見出した。このオニウムアミドを用いる触媒系は、比較的酸性度の高い sp³ 炭素の修飾反応にも適用可能であり、アルケン類、エナミン類の合成にも有用と考えられる。



【A03：有機分子触媒による実践的有用物質合成】

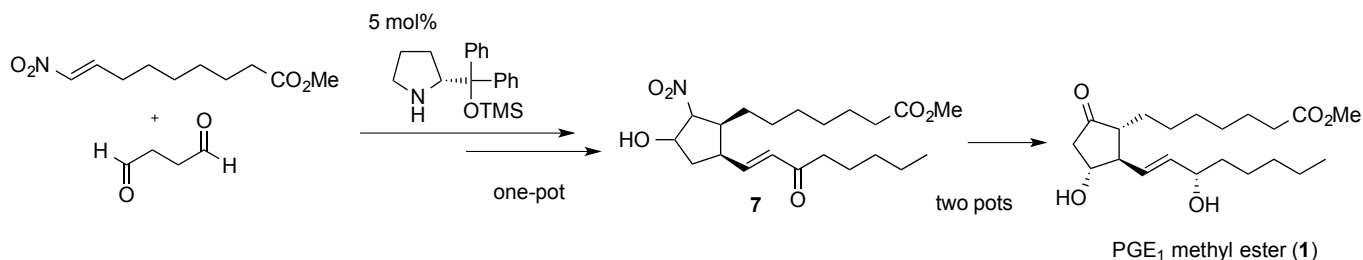
A03 班では、有機分子触媒を用いて実践的な有用物質合成へと応用展開することを主たる研究項目とし、A01、A02 班で開発された有機分子触媒あるいは触媒反応系を駆使し、医薬品などの生理活性化合物や機能性材料などの有用物質合成へと展開する。

このような目標のもと、平成 23 年 8 月より研究を開始し、A03 班の計画班員 4 名が有機分子触媒を実際の医薬品・天然有機化合物の合成に適用し、以下の優れた成果をあげている。

diphenylprolinol silyl ether を用いたプロスタグランジンの短工程合成、アルカロイド触媒を用いる (–)-englerine A の既知合成中間体への効率的変換を達成した。従来法では困難であった抗寄生虫活性、抗昆虫活性を有する Avermectin の位置選択的アシル化を達成し、創薬化学への展開の足がかりが得られた。グアニジン型新規触媒を用いた β-ケトエステルの不斉酸化反応を開発し、Daunomycin の鍵中間体の合成に成功した。これらの研究において、反応機構解析を A01 班と共同研究で行っている例が 2 例、さらに A02 班の開発した触媒を天然物合成に利用した共同研究があり、成果が着実に上がっている。領域内だけでなく、領域外さらには海外との共同研究にも発展している。これらの共同研究を通して、領域の研究が多いに進展している。

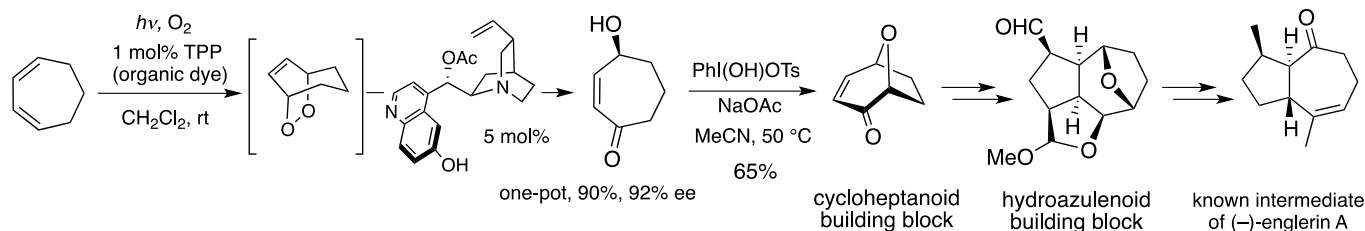
林 雄二郎：有機触媒を用いた有用物質の独創的合成 (A01 班：内丸 忠文 博士との共同研究)

プロスタグランジンは多種多様な生理活性を有する天然物であり、種々な誘導体が知られている。今回我々の研究室で開発した diphenylprolinol silyl ether という有機触媒を用いる形式的な不斉触媒[3+2]付加環化反応を鍵反応とすることにより、短工程でのプロスタグランジン E1 メチルエステルの合成に成功した。従来の合成法では 20 段階近くの反応を必要としていたが、有機触媒を用いる one-pot 合成を駆使することにより、わずか 3 ポットでの合成を達成した。なお、diphenyl prolinol silyl ether を用いる不斉触媒反応の反応機構解明に関して内丸忠文博士 (A01 班) との共同研究を推進している。



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

有機色素増感光-酸素付加反応と有機触媒による不斉 Kornblum-DeLaMare 反応をワンポットで行い、高光学純度を有するシクロヘプタノンを経由して 10 グラムスケールで獲得した。超原子ヨウ素試薬による新規分子内架橋エ



ーテル化により多機能キラルシクロヘプタノイド素子を合成し、このものとシクロペンタジエンの Diels-Alder 反応を経て、初期に設定した bicyclo[5.3.0]decane 型合成素子を獲得することに成功した。これより腎腫瘍治療薬リードとして期待される(-)-englerine A の既知合成中間体に導き、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)

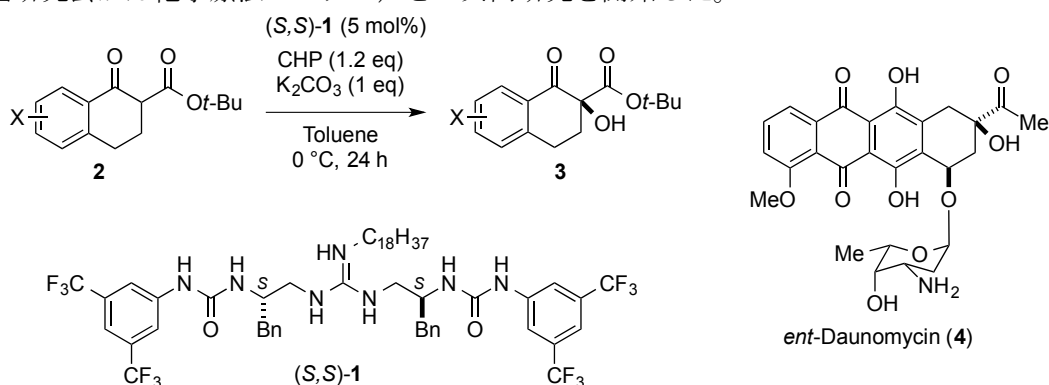
計画班の川端猛夫教授 (A02 班) らによって開発された光学活性ピリジン誘導体を利用し、北里研究所で発見された顕著な抗寄生虫活性、抗昆虫活性を有する Avermectin (現在世界で 2.5 億人に投与) の天然テトラオール類縁体である Avermectin B2a (**1**) の位置選択的モノアシル化を検討した。その結果、アシル基および光学活性有機分子触媒の選択により Avermectin B2a の位置選択的アシル基導入が可能となった。現在、さらに北里で開発した農薬の ME5343 の簡便な合成法を開発するため川端触媒を用いて検討を行っている。

また、北里研究所で発見された新規アセチルコリンエステラーゼ (AChE) 阻害剤 Arisugacin 類を標的化合物とし、簡便かつ効率的でしかも誘導体合成にも応用可能な収束的な全合成ルートの開発を行った結果、鍵反応に有機触媒を用いた所、一挙に多くの環が縮環した Arisugacin 骨格を効率的に構築する方法を確立し、初めて全合成を達成した。

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 准教授との共同研究)

強力な二本鎖 DNA インターカレータ能をもつ Daunomycin (**4**) の母骨格を基盤に、一本鎖からなる DNA グアニン四重鎖構造に対する選択的新規リガンドの創製を目的とし、不斉触媒 **1** を用いたテトラロン誘導体 **2** から **3** への不斉酸化反応を検討した。その結果、対応する **3** が 85-97% 収率、76-90% ee で得られた。

さらに本触媒反応を基盤とし、**4** の鍵中間体の不斉合成に成功した。なお本反応の立体選択性、エナンチオスイッチングの効果発現の可能性について、山中正浩准教授 (A01 班) との共同研究により理論的な考察を検討中である。また **4** の類縁化合物を用いた DNA グアニン四重鎖に対する安定可能、抗腫瘍活性について、清宮啓之博士 (癌研究会がん化学療法センター) との共同研究を開始した。



4. 若手研究者の育成に係る取組状況（1 ページ程度）

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。

【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：有機分子触媒の最先端」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」を実施している。

【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、開催している。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ている。実際に本セミナーをきっかけとして、4件の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ている。さらに領域外の産学から招待・依頼講演も実施しており、学術界のみならず産学連携への裾野の拡大も期待される。

○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

招待講演1件：内山真伸教授（東大院薬）“元素の特性を活かした合成化学・物質科学・生命科学”

依頼講演2件：澁谷正俊准教授（名大院創薬）“高機能型高活性有機ニトロシルラジカル触媒の開発”

吉川直樹氏（武田薬品工業）“有機分子触媒反応を鍵工程とする効率的な大量合成プロセスの開発”
一般講演7件：領域内の若手研究者

○第2回有機分子触媒 若手セミナー（平成25年9月14日～15日開催予定）：ラフォーレ伊東 参加者50名

【日本化学会春季年会における特別企画「有機分子触媒の最先端」の開催】

本領域に関わる若手研究者を中心に、領域外の講演者3名を含む計8件の講演を「有機分子触媒の最先端」と題し、日本化学会第93春季年会の特別企画として開催した（平成25年3月25日）。

【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、ポスドク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＞）

第1回国際会議（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＞）

【研究代表者のプロモーション】

本領域発足後、下記の教員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24年5月：是永 敏伸 准教授（岡山大学・大学院自然科学・助教）

→岩手大学・大学院工学研究科・准教授

平成24年8月：今田 泰嗣 教授（大阪大学・大学院基礎工学研究科・准教授）

→徳島大学・大学院ソシオテクノサイエンス研究部・教授

平成25年4月：佐藤 敏文 教授（北海道大学・大学院工学研究院・准教授）

→北海道大学・大学院工学研究院・教授

平成25年4月：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：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

なお、下記1名の研究代表者は公募研究採択時にプロモーションしたので、参考までに掲載した。

平成24年4月：鈴木 由美子 准教授（静岡県立大学・薬学部・講師）

→上智大学・理工学部・准教授

5. 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 ページ程度）

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。

【予算配分】

表 2. 平成 23, 24 年度予算配分

	平成 23 年度	平成 24 年度
総括班	4,200,000 円	5,200,000 円
計画班	126,400,000 円	130,800,000 円
公募班	0 円	125,000,000 円
領域合計	130,600,000 円	261,000,000 円

【予算使用状況】

下記の通り、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は順調に進展している。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。なお、平成 24 年度の繰り越し分は主に人事異動に伴う研究活動の停滞によるものであり、25 年度以降は研究活動の再開によって研究計画に従い、順調に予算消化されるものと考えられる。

表 3. 平成 23 年度予算使用状況

平成 23 年度	物品費	旅費	人件費・謝金	その他	合計
総括班	638,830	236,360	640,938	2,683,872	4,200,000
計画班	110,242,702	6,150,580	5,332,696	4,674,022	126,400,000
領域合計	110,881,532	6,386,940	5,973,634	7,357,894	130,600,000

表 4. 平成 24 年度予算使用状況

平成 24 年度	物品費	旅費	人件費・謝金	その他	合計*
総括班	852,232	1,315,891	1,335,830	1,696,047	5,200,000
計画班	94,019,967	9,386,590	15,202,771	7,782,212	126,391,540**
公募班	103,340,153	13,248,884	281,100	3,474,471	120,344,608**
領域合計	198,212,352	23,951,365	16,819,701	12,952,730	251,936,148

*利子 167 円を含む。 **繰り越し分の差額（計画班：4,408,460 円、公募班：4,655,559 円）が発生。

【領域内共同利用機器】

研究の迅速な推進のため、下記、(1)～(7)の共同利用装置を平成 23 年度に購入し、班員間の共同利用を図った。なお、(8)ならびに(9)の解析用コンピューターについては、共同研究による使用頻度が大幅に上がったため、平成 24 年度に追加購入し、研究活動の円滑な推進に努めた。

- (1) 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・化学専攻
- (2) 超臨界クロマトグラフ 日本分光(株)製 SFC システム一式
設置場所：東北大学・大学院理学研究科・化学専攻
- (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・化学科
- (4) 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・薬科学専攻
- (5) マルチ分取システム YMC(株)製 LC-Forte/R UVRI HPLC 一式
設置場所：京都大学・大学院薬学研究科・薬科学専攻
- (6) 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・化学科

- (7) 高速液体クロマトグラフ 島津(株)製 Prominence4 液低圧グラジェントシステム 27A1203 一式
 設置場所：名古屋大学・大学院工学研究科・応用化学専攻
- (8) 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・化学科
- (9) 高性能コンピューター DELL(株)製 DELL-HPC-ProServer
 設置場所：独立行政法人 産業技術総合研究所 (筑波)



(1) 超高速液体クロマトグラフ



(2) 超臨界クロマトグラフ



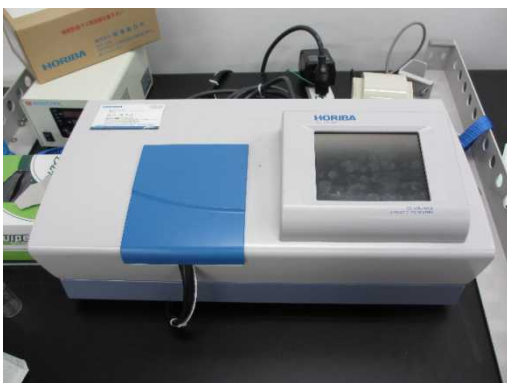
(3) 高性能コンピューター
HPC7000-XW



(4) 核磁気共鳴装置



(5) マルチ分取システム



(6) 自動旋光計



(7) 高速液体クロマトグラフ



(8), (9) 高性能コンピューター



(8) HPC7000-XW864R5S (9) DELL-HPC-ProServer

6. 総括班評価者による評価（2 ページ程度）

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】

今世紀、急速に発展した有機触媒には複数の互いに独立した分野が含まれている。その内、プロリン型触媒とブレンステッド酸型触媒はどちらも有機触媒として中心的役割を果たしているが、同時にどちらも我が国が世界をリードしている。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、この優位性は明らかであり例えば、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、抜群の成果を出している。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大きな成果があり、今後の大規模な工業的応用が期待される。また、これまでは比較的に見過ごされてきた有機触媒を用いる酸化反応においても多くの新しい知見が得られている。今後の研究でこれらの分野でさらに多くの有機触媒の成果が期待できる。また、有機触媒に付随する分野においても注目すべき多くの成果を上げている。特に、有機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も大きな進展があった。以上、我が国が有機分子触媒において、世界を先導する上で、今後の発展に寄与する重要な要素技術の発見があり、本新学術領域研究は初期の目標を半ば達成しており、今後の研究期間でさらに飛躍した成果が期待できる。

【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、この 10 年間、欧米のみならず中国や韓国、シンガポール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。そういった意味で、日本における「有機分子触媒」の新学術領域研究が最近、始まったことは、まことにタイムリーであろう。本領域研究では、平成 23 年度より 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、「有機分子触媒の未来型分子変換」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。しかし、こういった共同研究を積極的に促進させるための費用を総括班費で賄えるようにする等の措置が必要であろう。私も以前、特定領域研究の領域代表を務めた折、研究者間の連携を目指した共同研究のための費用捻出には頭を痛めた経緯があり、それ以前は認められていた総括班費から共同研究費用を負担させる制度を復活させるべきだと思われる。領域の運営については健全になされており、若手セミナーの開催や日本化学会での特別企画（若手研究者中心の講演）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、有機分子触媒の創製と新方法論の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。

【日本プロセス化学会 副会長 [元塩野義製薬株式会社・リサーチアドバイザー] 鴻池 敏郎 氏】

「有機分子触媒による未来型分子変換」領域は発足以前より、計画班を中心として順調に研究は進展し多くの成果を積み上げてきた。それに加えて、本年は公募班が発足しこれまでになかった有機触媒の新しい分野の若手研究者が加わり、新規なテーマの発表が続いている。特にこの 1 年は公募班の参加とその活躍とともに、他機関との交流が顕著であった。

本領域は成果発表の機会を国内だけでなく、海外まで広く求め、広範な研究者や聴衆層の違いも意識し最新の成果を公開講演会や月刊 NewsLetter などで発表し、班友の情報共有、活性化に役立てている。その活性化の指標として近年の化学会年会と薬学会年会での有機触媒と有機分子触媒の発表件数を調査すると、化学会年会では 2009~2013 年で 72,54,74,86,82 件と推移している。天災による 2011 年会の中止による 2012 年会への持越し発表や、関西開催の年会（2010,2013 年）への参加者数と発表数が少ないことを考慮すると 2013 年は最多数の発表件数と見做すことができる。薬学会年会での発表数は 2011~2013 年で 16,20,15 件と推移しており同様に本領域の研究が年々活発になったのを示している。

今後の期待は、従来の主要な不斉有機触媒反応を深化するとともに、イオン性反応だけでなく、協奏反応、ラジカル反応など他のタイプの反応にも有機触媒が展開されることである。また、他の反応促進の方法、例えば金属触媒、固相反応、光、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て発明された革新的反応が産業化され、日本発の完成技術として世界で用いられることを期待したい。それには、技術の深化、

触媒の最適化、大量供給などが必須であり、体力のある企業パートナーとの更なる協業が望まれる。

以上の目標を達成するために他の領域研究や学会と交流を深める計画がある。一つは新学術領域研究「直截的物質変換を目指した分子活性化法の開発」との合同シンポジウム、他は日本プロセス化学会との合同シンポジウムであり、それぞれ金属触媒やプロセス開発のプロフェッショナルとの交流により、共同研究が進展し、技術が実用化された事例が出てきた。また本領域は海外の研究者との交流に積極的であり、国際シンポジウムを開催し、主要メンバーの優れた発表を起点として公私の隔てのない関係を築いている。共に、若手研究者へのポスター優秀賞の授与など研究者の育成も努力しており、次世代の研究者の成長が期待される。

【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】

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呈示できること ②研究は学問間の境界を越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”をも視野に置くこと 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開拓の可能性を示せること」をポイントにしたい。

上述の趣旨を鑑みた時、大学関係者 2 名、国内企業関係者 2 名、海外有識者 1 名を評価者に据えたのは的を射ている。また、評価機会はシンポジウムに限ることなく、月一回に刊行される「News Letter」で得られるなど、評価体制に不備はない。研究領域評価では、特に今回は若手・中堅（30 代・40 代）班員のアクティビティに注目できる。これは本研究領域を組織化した効果の表れであろう。その傍証として、班員の研究成果が国内外で高評価を得ている。発足から今日まで、私の知る限り 15 件の表彰が班員にあった。このことは、研究領域テーマの進取性と成果の高質性の客観的評価を盤石にしている。本領域の年齢構成は 30 代 16 名、40 代 16 名、50 代 12 名、60 代 3 名であり、専門性はバラエティに富む。これらの条件は、世代の知恵と専門的技術の融合を容易にしている。すでにその吉兆を感じるが、本年 11 月に日本プロセス化学会との合同シンポジウムを開催することは 融合の広がりや産業界にも求めた点で高く評価する。

【ドイツ・マックスプランク研究所 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.

Although 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, further outstanding developments will originate from the project based on the excellent platform mentioned above. I hope and certainly expect no less than that this research program 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.

【以下は First International Conference on Organocatalysis に参加した海外の講演者から頂いたコメント】

○[基調講演] Jon Antilla 教授(University of South Florida)から頂いたコメント

I would like to provide my evaluation of the International Conference on Organocatalysis in Otsu, Japan that I attended recently.

Firstly I was very impressed by the large turnout for the conference. A good mixture of senior Professors, junior Professors, postdoctoral associates, and graduate students were at the conference. This led to very good discussions at the conference, and in the after-hours, and also at the poster sessions. The participation was 100% at the conference, which is rare except for Japan. The quality of the presentations was outstanding. The science presented was cutting-edge and often unpublished in some of the cases (or somewhat preliminary updates). This is important for stimulating interest and for seeing the new directions of Organocatalysis.

A conference like this is very necessary to researchers like myself and those attending because one can see where the field is transforming. And Japan is possibly the best place for organocatalytic research in my field. It was why I decided to fund much of my own trip to Japan for this conference. The quality of the achievements in the last few years in organocatalysis in Japan is really amazing. The new developments presented in the talks and on the posters represented a new shift into undiscovered areas that will be of importance going forward in the next years. I am sure many at the conference as a result of this endeavor gathered many additional ideas.

○[基調講演] Jeffrey N. Johnston 教授(Vanderbilt University)から頂いたコメント

I attended the International Conference on Organocatalysis held in Otsu, May 27-28. The meeting was well-attended and provided a balanced number of lecturers from Japan and abroad. In my opinion, the conference organizers did an outstanding job in choosing speakers based on past accomplishments and their continuing groundbreaking work in the field of organocatalysis. It is difficult to select a highlight among the research presented, as each lecture included both detailed discussion of published work, and additional unpublished work. The poster presentations were also of exceptionally high quality and relevant to the field of organocatalysis. The conference organizers are also to be commended for the hospitality that they afforded the speakers and attendees. The location was superb and the accommodations encouraged extensive interaction between speakers, poster presenters, and attendees. I met many of these leaders in organocatalysis for the first time in person. This provided the unique opportunity to engage in detailed discussion and exchange of ideas and unpublished details. I think Bruce Alberts recent editorial in *Science* summarizes the conference and its value succinctly: “...most important is the critical role that face-to-face scientific meetings play in stimulating a random collision of ideas and approaches” Bruce Alberts *Science* **2013**, 339, 737.

○[基調講演] Michael Krische 教授(The University of Texas at Austin)から頂いたコメント

Thank you for the opportunity to participate in the recent symposium in Otsu entitled: “Advanced Molecular Transformations by Organocatalysts: 1st International Conference on Organocatalysis.” This symposium provided an excellent overview of developments in the field of organocatalysis. In addition to core areas, emerging sub-disciplines in the field were represented at this symposium. The presentations were uniformly outstanding, and it is my feeling that the introduction of foreign speakers offers different, new ideas that will stimulate a further growth in this field. Finally, it was pleasure interacting with students at the poster session. From the student perspective, interacting with English speakers during the poster presentation was a valuable experience. Chemists in Japan play a leading role in the field of organocatalysis and symposia such as the one in Otsu will solidify and accelerate the role of Japanese scientists in the important new field of research.

○[基調講演] Tomislav Rovis 教授(Colorado State University)から頂いたコメント

The meeting was highlighted by a strong international contingent as well as young Japanese researchers. It is clear that the field continues to evolve. Powerhouse researchers like Terada and Hayashi showed why Japan remains a trendsetter in organic chemistry. Young researchers like Haraguchi and Kano were a taste of things to come for the next generation. The poster session was also rich. Evident was a migration from the old (traditional secondary amine organocatalysis) to the new (phosphoric acid catalysis, carbene catalysis, boronic acid catalysis, etc.). The conference was invigorating and fruitful and a harbinger of things to come.

○[基調講演] Ying Yeung Yeung 博士(National University of Singapore)から頂いたコメント

It was my great pleasure to be invited to attend this organocatalysis conference. In my experience, the quality of this conference is equal or even higher than the well-known big conferences such as ACS and Tetrahedron symposiums.

This conference focused on various aspects related to organocatalysis ranging from catalyst design, mechanistic investigation, and its application towards natural product synthesis. I found that the conference offered an excellent platform for intensive discussion among each specific area. This is unique which could significantly enhance the idea exchanging. In addition, I think the poster section was a great idea as it could encourage the students to discuss more with different chemists and share ideas. I wish my country can also have a similar symposium supported by the government.

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

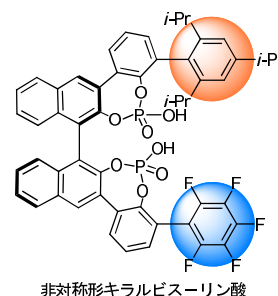
（3 ページ程度）

現在実施している新学術領域研究（公募研究含む）の研究課題を元に発表した研究成果（発明及び特許を含む）について、図表などを用いて研究項目毎に計画研究・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。

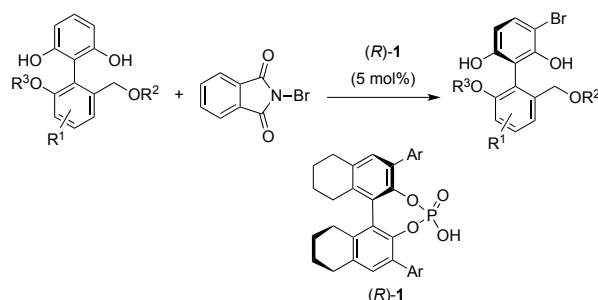
【A01 班：有機分子触媒の制御システム設計開発】

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 17 名と有機反応の理論化学計算を専門とする研究者 2 名（および研究分担者 2 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ことで、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ことにより、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ている。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、触媒開発に威力を発揮しつつある。今後、班内外の研究者間の共同研究を更に推進する事により、有機分子触媒の触媒作用の本質を理解し、未来型の効率的な有機分子触媒の開発を目指していく予定である。

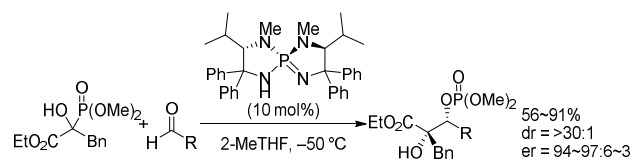
寺田 眞浩（計画研究） 水素結合のネットワーク形成を基盤とした多酸系複合型有機分子触媒の設計開発を推進した結果、非対称形キラルビスーリン酸触媒による高度な立体化学制御が可能であることを明らかにした。導入した置換基の化学的性質によって二つのリン酸の役割分担が明確になされていることを示しており、今後の触媒分子設計の指針とするべく、制御機構について 山中正浩准教授（A01 班）との共同研究により解析を進めている。



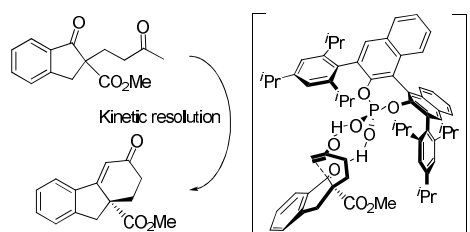
秋山 隆彦（計画研究） キラルリン酸をブレンステッド酸触媒として用いたビフェノール誘導体の臭素化反応により、対応する光学活性ビアリアル誘導体が光学純度良く得られる事を見出した (*J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 3964)。本研究は、山中正浩准教授（A01 班）との共同研究により、山中准教授が立体制御機構の理論的解析を行った。



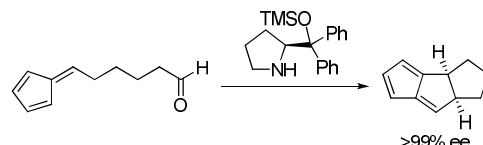
浦口 大輔（計画研究） キラルアミノホスホニウムイオンの共役塩基的作用により、 α -ヒドロキシトリアルキルホスホノアセテートから *P*-Brook 転位を経てグリコレートイオンが生成することを見出し、これを起点とする高立体選択的アルドール反応を実現した (*ACIE* **2012**, *51*, 4685. 米国 J. S. Johnson 教授（領域外）との共同研究)。本反応は、ホスホリル基の転位を二回伴う極めて興味深い機構で進行し、保護アルドール体が得られる点に特徴がある。



山中 正浩（計画研究） A01 班の秋山らによって、キラルリン酸触媒が 1,3-ジカルボニル化合物の不斉マイケル付加反応に続く分子内アルドール縮合によって不斉ロビンソン型環化反応を促進することが見出されている。秋山隆彦教授（A01 班）と連携し、本反応が分子内アルドール縮合過程における速度論的光学分割によって高エナンチオ選択性を発現しており、キラルリン酸触媒とマイケル付加体の置換基の立体反発によって立体制御されることを解明した。



内丸 忠文（計画研究・分担） A03 班の林教授らは、ジフェニルプロリノールシリルエーテルを触媒として、6 位に δ -ホルミルアルキル基をもつフルベンを処理すると、2 番目と 3 番目の 5 員環が選択的に *cis* に



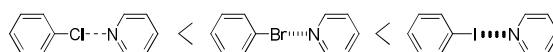
縮環した三環性生成物トリシクロペンタノイド骨格が、収率、不斉収率、ともに良好に得られることを見出した。本反応は、有機分子触媒を用いる[6+2]付加環化反応の初めての例である。A01 班の内丸らは、林雄二郎教授 (A03 班) との共同研究によりこの反応について計算化学的解析を行い、[6+2]付加環化の反応機構や、反応の立体選択性および不斉識別のメカニズムを明らかにした。

都築 誠二 (計画研究・分担) 弱い分子間相互作用の一つである

ハロゲン結合の詳細 (作用機構、相互作用の強さ、方向依存性) について *ab initio* 分子軌道法による精密解析を行い、 $\text{Cl} < \text{Br} < \text{I}$

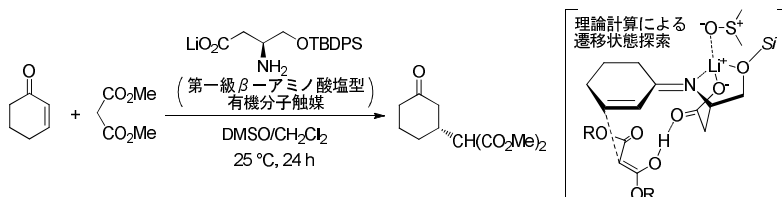
の順に相互作用が強くなり、ヨウ素のハロゲン結合は水素結合よりも強い方向性を持つことや、静電力がハロゲン結合の引力の主な原因になっていることを初めて明らかにした。さらに、ハロゲン結合の強さに与える置換基効果の定量的な解析を行なった。

ハロゲン結合における相互作用の強さ:



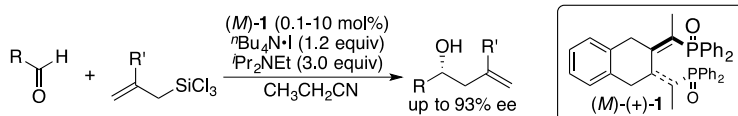
吉田 雅紀 (公募研究) 山中正浩准教授 (A01 班) との共同研究における実験および理論計算により、第一級

β -アミノ酸塩触媒を用いたマロン酸エステルの環状エノンへの不斉マイケル付加反応の遷移状態が明らかとなり、触媒の構造が反応機構および立体制御機構に与える影響について重要な知見が得られ、今後の不斉触媒開拓における基盤を獲得した。



小笠原 正道 (公募研究) アトロプ異性共役ジ

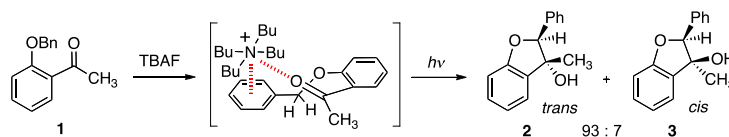
エン (*M*)-(+)-**1** は優れたルイス塩基性有機分子触媒として作用し、アルデヒドの不斉アリル化において、高活性かつ高エナンチオ選択性を示す (中島誠教授 (A02 班) との共同研究)



是永 敏伸 (公募研究) (非公開希望 p. 27 参照)

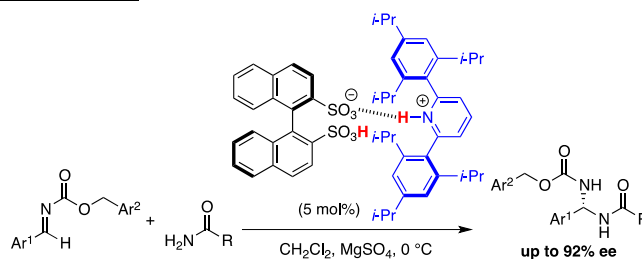
鳴海 哲夫 (公募研究) (非公開希望 p. 27 参照)

山田 眞二 (公募研究) 2-ベンジルオキシアリルケトン類の Norrish Type II 反応では、*cis*-ジヒドロベンゾフラノール **3** が生成するのに対し、

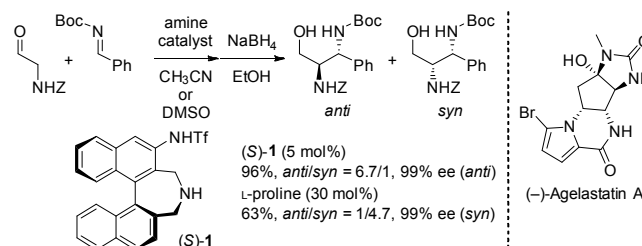


テトラブチルアンモニウム塩を添加することで、*trans* 体 **2** が高い選択性で生成することを見出した。基質とアンモニウムとの複合体について分子軌道計算 (MP2/6-311G**) を行った結果、アンモニウムが基質のベンゼン環とカルボニル基の二カ所で相互作用した構造が安定であったことから、基質のコンホメーションが大きく変化した結果、選択性が逆転したものと考えられる。¹H NMR ケミカルシフト変化、溶媒効果、置換基効果を調べることで、反応機構についても推定した (都築誠二博士 (A01 班) との共同研究)。

波多野 学 (公募研究) 酸・塩基複合型触媒として機能する π - π 相互作用による剛直な不斉場をもつキラルピナフチルジスルホン酸ピリジニウム塩触媒を創製した。本触媒を用いて、高次選択性制御が必要となるカルボニル化合物に対する直截的不斉求核付加反応を基軸として検討した結果、イミン類に対するアミド類の不斉付加反応の開発 (光学活性アミナル合成) に成功した。

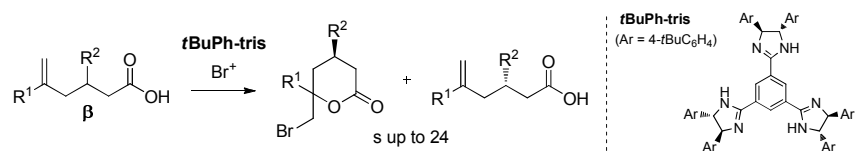


加納 太一 (公募研究) ビナフチル型アミノスルホンアミド触媒による α -アミノアセトアルデヒドの不斉 Mannich 反応を実現し、1,2-ジアミンのアンチ体の立体選択的合成法を確立した。また、触媒としてプロリンを用いた際に得られるシン体の生成物から、抗腫瘍活性のある (-)-Agelastatin A の短段階合成に成功した。



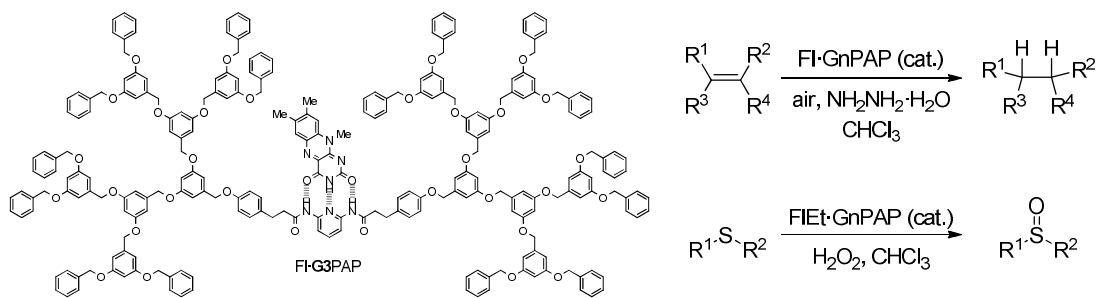
村井 健一 (公募研究)

トリスイミダゾリン触媒を用いる不斉プロモラクトン化反応を利用し、これまで報告のないβ置換カルボン酸の速度論的光学分割に成功した。

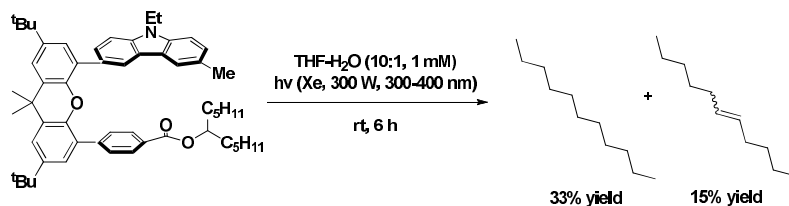


今田 泰嗣 (公募研究)

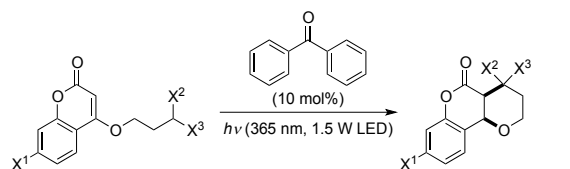
デンドリマーフラビン会合体の触媒活性を評価し、デンドリマーに由来する疎水性反応場が効果的に機能することを明らかにした。



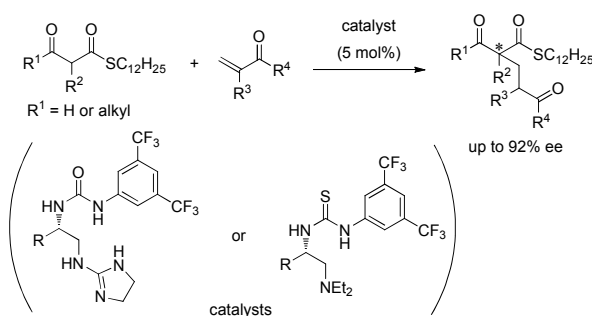
松原 亮介 (公募研究) カルバゾール部位を有する安息香酸エステルを新たに合成し光照射したところ、目的としたアルカンの他にアルケンが得られた。これは通常では見られない反応性であり、新反応への足掛かりを構築した。



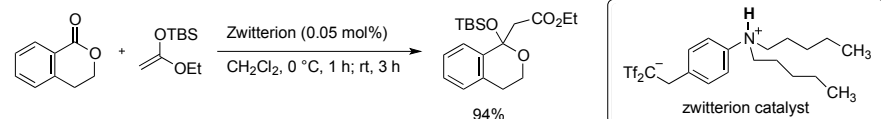
植田 光洋 (公募研究) 芳香族ケトンによる触媒的 1,5-水素ラジカル移動反応を鍵過程とした、新規光ラジカル環化反応の開発に成功した。



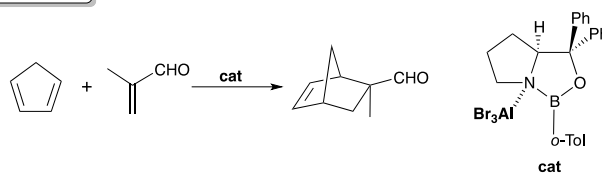
御前 智則 (公募研究) 基質一般性の高いキラル第四級炭素構築法として β-カルボニルチオエステル類の共役付加反応の開発を検討し、最高 92% ee で付加体を得ることに成功した。



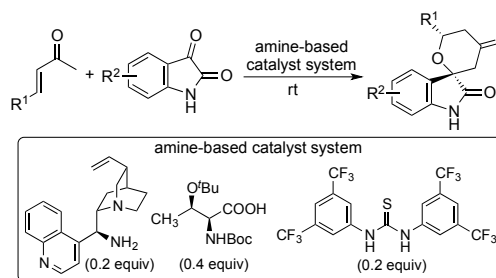
矢内 光 (公募研究) 有機分子触媒の開発に有用な酸性官能基として安定なカルボアニオンと活性水素をもつアニリニウム構造からなる双性イオンを見出した。この双性イオンは、有機分子触媒としての優れた活性を示し、高活性な有機分子触媒の開発に繋がる重要な知見を得た。



坂田 健 (公募研究) 不斉 Diels-Alder 反応に用いられるルイス酸触媒 (cat) の触媒活性は、配位する AlBr3 によってどの程度高められているのか、量子化学的立場から評価した。



田中 富士枝 (公募研究) エノンの直接的な不斉ヘテロディールス・アルダー反応の開発を達成。本反応実現のために、アミンを含む三成分から成る触媒系を開発し、反応系中でエノンからエナミンを生成させ、一連のスピロオキシインドール置換のテトラヒドロピラノン誘導体を、高ジアステレオ、高エナンチオ選択的に合成することに成功した。



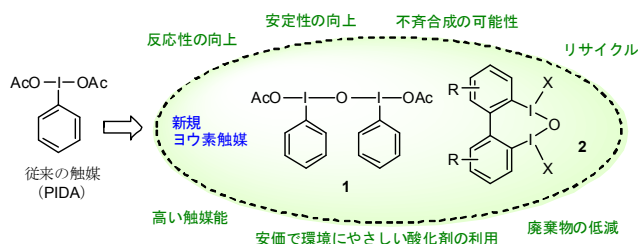
【A02 班：有機分子触媒による分子変換システム開発】

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

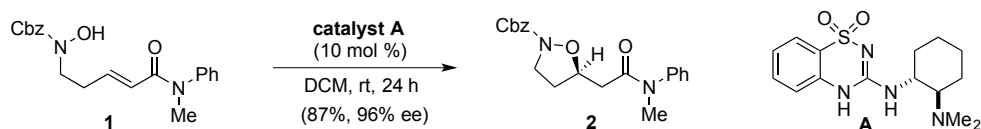
換反応の開発に焦点をあてた研究を行っている。

このような目標のもと、平成24年4月より計画班員4名に加えて11名の公募班員が参画し、研究対象となる有機分子触媒のラインナップもペプチド系触媒や金属触媒併用系など多彩となり、それと連動して開発対象となる反応も多様性が増した。また公募班員は、計画班員とは異なる研究領域で活躍する若手研究者が多いことから、班内外での情報交換や共同研究が非常にやりやすい環境下となった。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挙げている。共同研究は1例のみであるが、すでに異分野研究者間での学術交流が活発化しており、これから共同研究実施の駆動力になると期待している。今後は、領域内のみならず領域外との共同研究も精力的に展開し、その中から本領域のブレークスルーに繋がる研究成果を誕生させたい。また多様な研究者による新たな視点や手法を活用した共同研究の推進や学際領域の創成を目指して、本領域研究に必要な共同研究者を新たに開拓してゆく予定である。

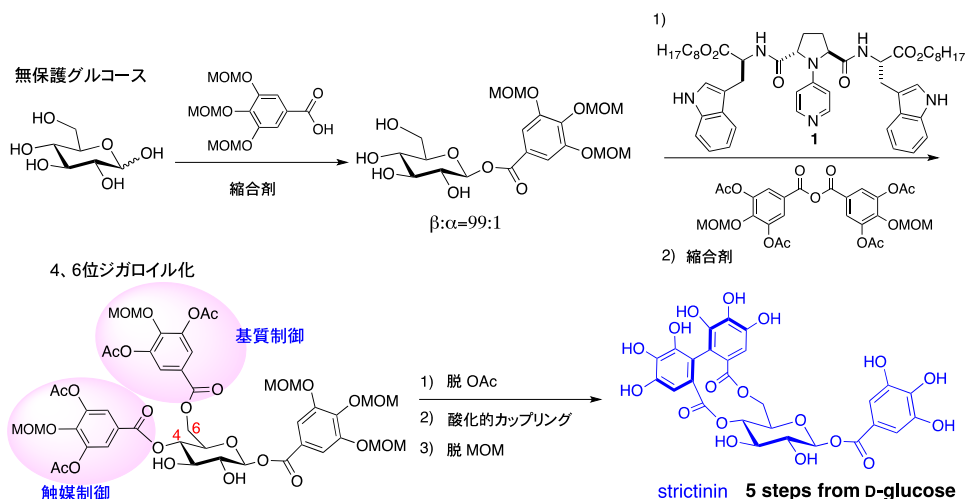
北 泰行 (計画研究) 酸素架橋構造を有する二核超原子価ヨウ素化合物 **1** がフェノール類に対して高い反応性を示すことを明らかとした。また、ビアリアル結合によりそれぞれのヨウ素部位を隣接させることで(化合物 **2**)、系中において反応後に容易に酸素架橋構造を再生させることに成功した。これにより、高い反応性と化学選択性を示す酸素架橋型有機ヨウ素触媒の開発が実現した。実際に我々が開発したいくつかのカップリング反応において、ヨウ素化合物 **2** およびその前駆体が有用な触媒となることがわかった。



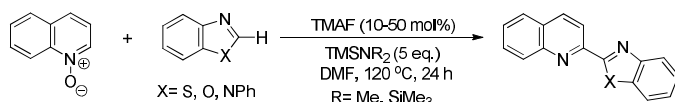
竹本 佳司 (計画研究) α,β -不飽和アミド誘導体への最初の触媒的不斉オキサマイケル付加反応の開発に成功した。電子求引性置換基を有するヒドロキシルアミン **1** の共役付加には、我々が独自に開発したベンゾチアジジン触媒 **A** が唯一劇的な加速効果を示すことを明らかにし、イソオキサゾリジン **2** の高エナンチオ選択的な合成に成功した。現在、詳細な触媒機能解析のため坂田健准教授 (A01 班) との共同研究を実施している。



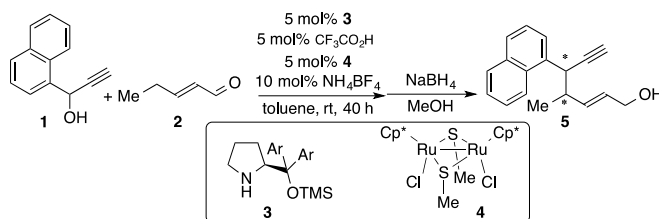
川端 猛夫 (計画研究) D-グルコースへの β -選択的グリコシル化、触媒制御によるグルコース4位へのガロイル化、系内で生成する没食子酸誘導体の基質制御による6位へのガロイル化を経て、無保護グルコースから5段階で配糖体天然物 strictinin の全合成を達成した。



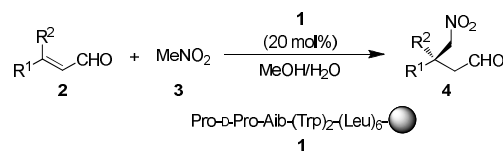
根東 義則 (計画研究) 系内で発生させたオニウムアミドを触媒としたアゾール類とキノリン N-オキソドとの反応により有機触媒反応のヘテロビアリール化が進行することを明らかにした。



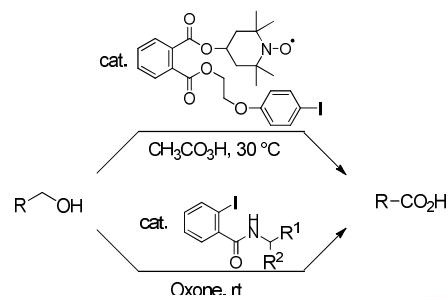
三宅 由寛 (公募研究) 有機触媒である光学活性アミンと遷移金属錯体触媒である二核ルテニウム錯体を協奏的に用いることで、これまで達成されていなかったエナンチオ選択的なプロパルギル位アリル化反応の開発に成功した。



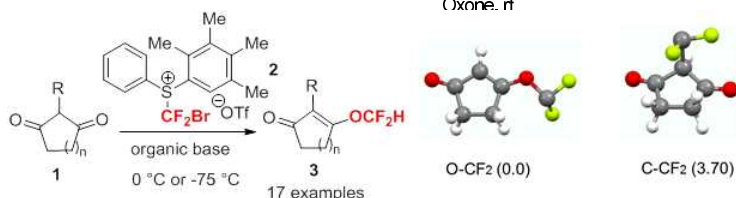
工藤 一秋 (公募研究) 固定化ペプチド触媒を用いることで、立体的に混んだβ,β-2 置換-α,β-不飽和アルデヒドへのニトロメタンの共役付加による第四級不斉炭素の構築に成功した。一般的な低分子アミン触媒を用いた場合には、副反応のため複雑な混合物を与える。



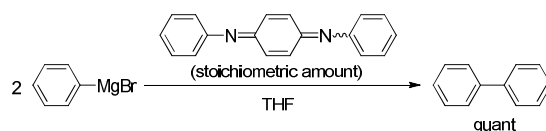
矢倉 貴之 (公募研究) ヨウ素化合物を基礎とする有機分子酸化触媒の創製を検討し、有機ラジカル酸化剤とのハイブリッド型触媒および*o*-ヨードベンズアミド型触媒の創製に成功した。いずれの触媒も 30 °C または室温という温和な条件下で酸化反応が進行し、第 1 級アルコールがカルボン酸へとほぼ定量的に変換された。



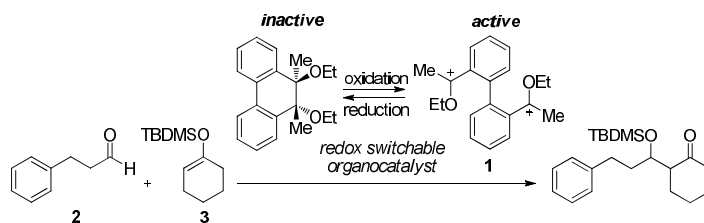
柴田 哲男 (公募研究) 独自に開発した求電子のジフルロメチル化試薬を用いて、β-ジケトン類と反応させたところ、選択的に酸素部位がジフルオロメチル化されたエノールエーテル体が首尾良く得られることを見出した。さらに、反応機構を計算化学にて検証した。



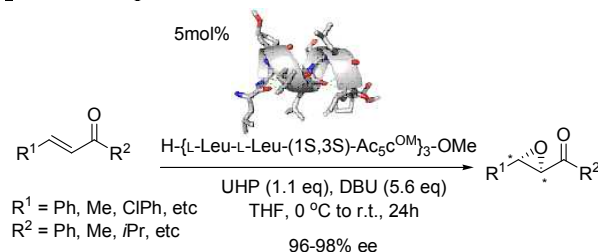
雨夜 徹 (公募研究) キノンジイミン化合物を有機酸化剤とするアリールマグネシウム化合物の酸化的ホモカップリング反応を見出した。還元された酸化剤は、容易に回収できる。これを再酸化することにより再利用が可能である。



菅 誠治 (公募研究) 酸化・還元に応答して活性がオン・オフする有機分子触媒の開発を行い、これを向山アルドール反応に適用して反応制御を行うことに成功した。



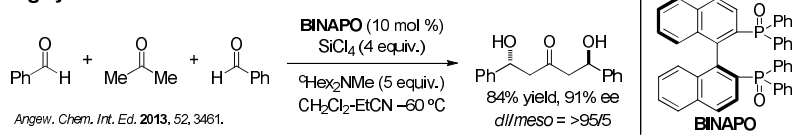
田中 正一 (公募研究) α,β-不飽和ケトン化合物の不斉エポキシ化反応に利用したヘリカル有機分子触媒の2次構造解析を行った。また、¹H NMR スペクトルを用いた中間体の解析、結合定数の算出などの反応解析を行った。



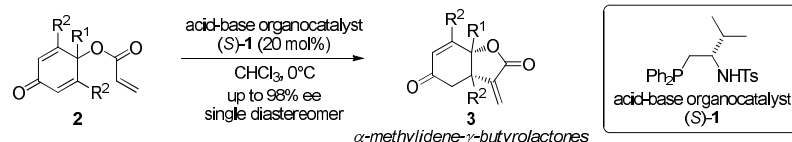
金井 求 (公募研究) (非公開希望 p. 27 参照)

中島 誠 (公募研究) エノラート等価体を事前調製することなく、ケトンそれ自体をアルドール供与体として、2分子のアルデヒドに対する二重アルドール反応を、高ジアステレオかつ高エナンチオ選択的に行うことに成功した。

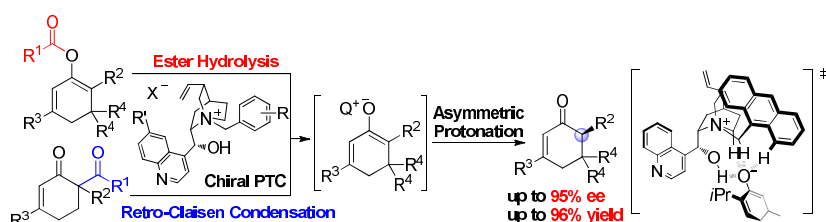
Highly stereoselective double aldol reaction



滝澤 忍 (公募研究) アクリレートとジエノンを含む基質 2 に対して、酸塩基型触媒(S)-1 を適用すると不斉分子内 Rauhut-Currier 反応が進行し、α-メチレン-γ-ブチロラクトン 3 が最高 98% ee で得られることを見出した。



徳永 信 (公募研究) キラル相間移動触媒を用いてエステルの不斉加水分解を初めて達成した。エノールエステル類の反応では最高

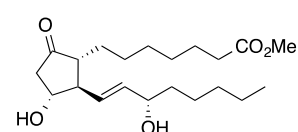


95% ee に達する。計算化学でエノラートの形を明らかにした。

【A03 班：有機分子触媒による実践的有用物質合成】

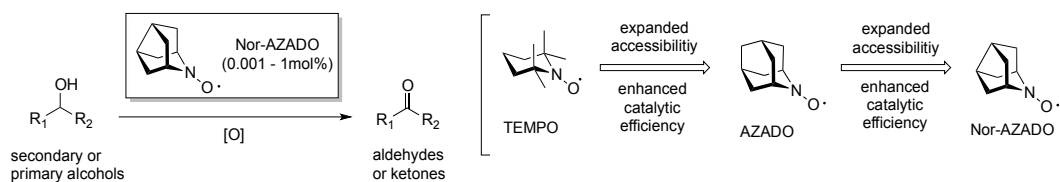
総評：A03 班では、有機分子触媒を用いることにより、実践的有用物質合成を行うことを主たる研究目的とし、有機分子触媒反応の医薬品・天然物合成への展開、ポリマー合成への展開等の研究を行っている。異なるバックグラウンドを有する研究者が集結し、計画班4名は平成23年8月より研究を開始し、平成24年4月より公募班9名を加え研究を推進している。A01, A02 班が開発した触媒あるいは反応を、有用化合物の合成に応用する共同研究、および反応機構・遷移状態を計算化学的に解明するため、A01 班の理論化学者との共同研究が進展している。これまで本領域内において当初の計画研究に直接関連する共同研究が3件、領域外の共同研究が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。今後、班内外の研究者間の共同研究を更に推進する事により、有機分子触媒の触媒作用を理解しつつ、実際に必要とされる有用化合物の実用的な合成を一層押し進めていく予定である。

林 雄二郎 (計画研究) 当研究室で開発した diphenylprolinol silyl ether という有機触媒を利用する不斉触媒マイケル反応を基盤にして、不斉触媒[3+2]付加環化反応を開発した。この反応を鍵反応とし、生理活性天然物であるプロスタグランジン E1 メチルエステルの3ポット合成法を開発した。有機触媒による選択性発現機構の解明に関して内丸忠文博士 (A01 班) および ETH の Seebach 教授 (領域外) との共同研究により解析を進めている。

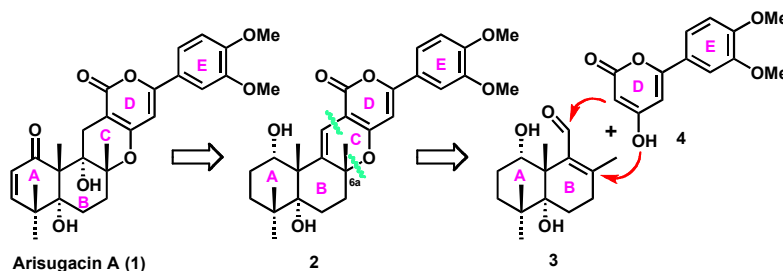


岩淵 好治 (計画研究) 第一三共株式会社プロセス化学研究所 (領域外) との共同研究の結果、高活性アルコール酸化触媒 Nor-AZADO を開発することに成功した (WO 2011-JP623214 2011-11-30, WO 2012008228 2012-01-19)。Nor-AZADO

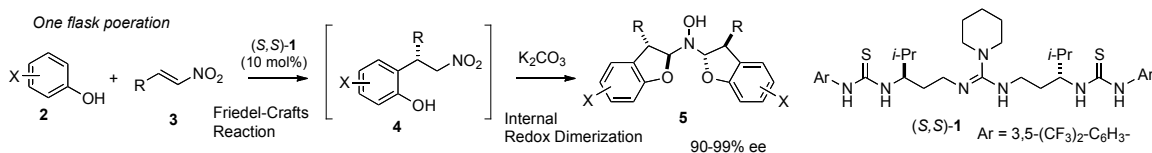
は先に開発した AZADO と同等以上の触媒活性を示すことが判明した。Nor-AZADO は平成25年8月に和光純薬工業株式会社から発売予定である。



砂塚 敏明 (計画研究) 当研究所で見いだされた強力な AChE の阻害剤アリスガシン A を有機触媒であるプロリンを利用する立体選択的なカップリング反応を基盤とした実用的な分子構築法を開発し、全合成を達成した。本合成法は様々なアリスガシン類を合成出来る方法である。なお、川端猛夫教授 (A02 班) により開発された位置選択的アシル化法を活用した生理活性化合物の合成についても同氏との共同研究により実施している。



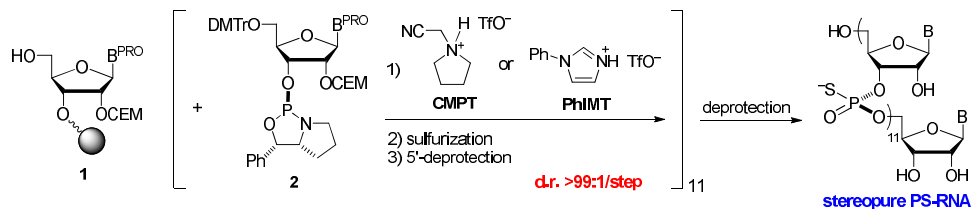
長澤 和夫 (計画研究) 触媒 (S,S)-1 の外部刺激による機能スイッチングを利用し、2 と 3 での連続的な Friedel-Crafts 反応-二量化反応を行うことができ、高い選択性かつ高収率で一挙に 5 を得ることに成功した。



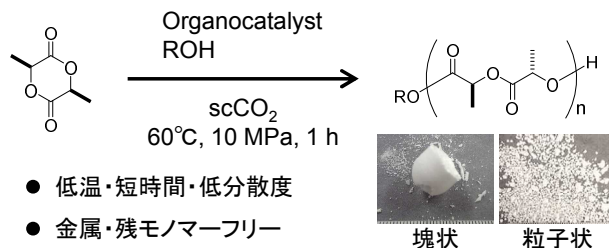
佐藤 敏文 (公募研究) (非公開希望 p. 27 参照、領域内共同研究)

岡 夏央 (公募研究) 固相担持

ヌクレオシド **1** に対し、モノマー **2** と活性化剤 CMPT または PhIMT を反応させる方法によって、立体化学的に純粋なホスホロチオエート RNA **12** 量体の合成に成功した。 *J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 7913.

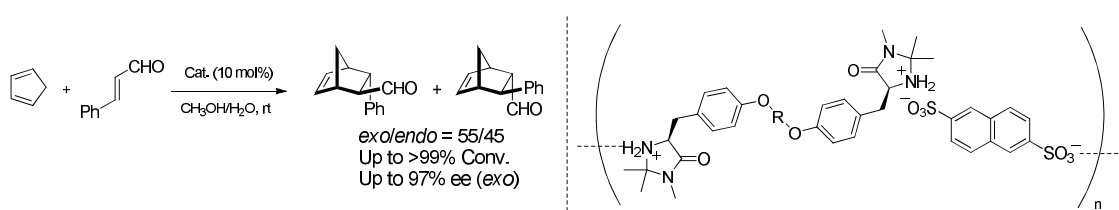


間瀬 暢之 (公募研究) 超臨界二酸化炭素 (scCO₂) ならびに有機分子触媒を活用した環境調和性が高い手法による高純度ポリ乳酸合成を達成した。本手法は省エネルギー、安全性向上、生産性向上、品質向上、VOC 規制対応、低コストなど、従来法にない利点を有しており、ポリ乳酸製造プロセスへの実用化・工業化が期待される。



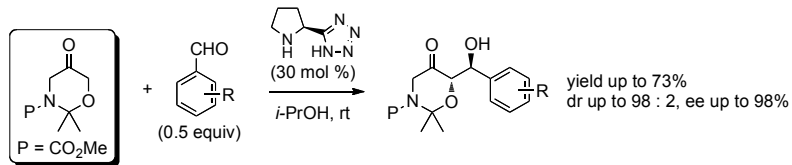
原口 直樹 (公募研究)

シクロペンタジエンとシンナムアルデヒドの不斉 Diels-Alder 反応において、キラルイミダゾリジノン骨格を高分子主鎖に導入したイオン結合型高分子は高い触媒性能を示した。



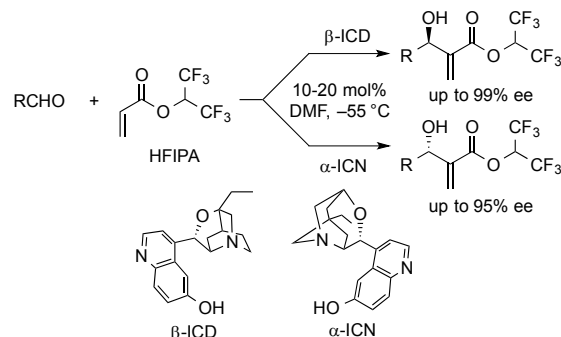
小槻 日吉三 (公募研究)

ポリオキシアミン系化合物は抗生物質の基本ユニットとして重要な骨格である。これの直接的合成法として、アミノヒドロキシアセトンシントンを開発し、有機触媒不斉アルドール反応による新規ルートを開発した。



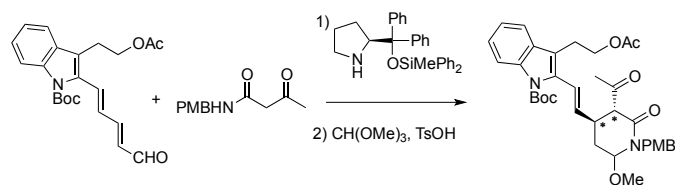
畑山 範 (公募研究)

光学活性体の両エナンチオマーを作り分ける合成法の開発は、医薬品等の合成において極めて重要である。本研究において、様々な不斉反応において優れた有機触媒であることが知られている β -ICD に対してエナンチオ相補的な触媒活性を示す α -ICN をキニーネから 1 段階でかつ 90% の高収率で獲得できる合成法を見出した。



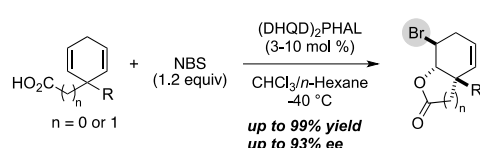
石川 勇人 (公募研究)

多様な生物活性を有するモノテルペノイドインドールアルカロイド類の統一的全合成研究に向けて、不斉有機触媒を用いた新規多置換ピペリジン骨格構築反応を開発した。



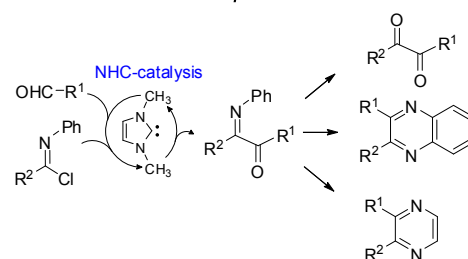
濱島 義隆 (公募研究)

シンコナアルカロイドを触媒として用いる、環状ジエンの高立体選択的な不斉プロモラクトン化反応を開発し、不斉四置換炭素を有する天然物の全合成を達成した。



鈴木 由美子 (公募研究)

合成中間体として有用な 1,2-ジケトンおよび医薬品の化合物ライブラリーとして魅力的な含窒素複素環合成に NHC 触媒反応を用いることに成功した。NHC 触媒反応後、 α -ケトイミンを単離することなく連続して行うワンポット合成法を開発できた。



8. 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）（5 ページ程度）

現在実施している新学術領域研究（公募研究含む）の研究課題を元に発表した研究成果（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。論文の場合、計画研究・公募研究毎に順に記載し、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。また、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ている。

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

○主催シンポジウム・会議等

- (1) 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)
- (2) 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)
- (3) 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)
- (4) 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)
- (5) 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)
- (6) 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)

表 5. 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 6	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

表 6. 表 5 に記載のシンポジウム・会議への企業参加者所属一覧

味の素 (株)	アステラス製薬 (株)	(株) エーピーアイ コーポレーション	小野薬品工業 (株)
花王 (株)	(株) カネカ	関東化学 (株)	協和発酵バイオ (株)
杏林製薬 (株)	塩野義製薬 (株)	GSC 技研	新日本理化 (株)
住友化学 (株)	第一三共 (株)	大日本住友製薬 (株)	高砂香料工業 (株)
武田薬品工業 (株)	田辺三菱製薬 (株)	帝人 (株)	帝人ファーマ (株)
東京化成工業 (株)	(株) トクヤマ	東レ (株)	日産化学工業 (株)
日本ゴア (株)	日本新薬 (株)	日本ゼオン (株)	日本曹達 (株)
日本ポリプロ (株)	日本理化学工業 (株)	パナソニック (株)	(株) フルヤ金属
三菱ガス化学 (株)	Meiji Seika ファルマ (株)	ルモックス技研	

○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)

- (5) 第5回 有機触媒シンポジウム (第2回公開シンポジウムと兼ねて開催) (平成24年10月26日-27日: 学習院大学・目白キャンパス)
- (6) First Japan-USA Organocatalytic Symposium (平成24年12月15日-18日: Honolulu・Prince Hotel Waikiki)
[参加者: 66名 (内訳: USA 13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: UK 9名、一般 60名、ポスドク・学生 171名)]
- (9) 第6回 有機触媒シンポジウム (First International Conference on Organocatalysis と兼ねて開催) (平成25年5月27日-28日: 大津・大津プリンスホテル)

○企業招待講演・依頼講演

- (1) 吉川 直樹 氏 (武田薬品工業株) 第1回有機分子触媒 若手セミナーにて (平成24年9月9日)
「有機分子触媒反応を鍵工程とする効率的な大量合成プロセスの開発」
- (2) 満田 勝 氏 (株カネカ) 第2回公開シンポジウムにて (平成24年10月26日)
「医薬プロセス化学の課題と有機触媒への期待」

○外国人研究者招聘

- (1) Jon Antilla (University of South Florida, USA) (平成23年11月23日-12月23日)
- (2) Shu-Li You (Shanghai Institute of Organic Chemistry, China) (平成24年11月21日-12月4日)
(平成24年11月2日-12月9日: 北海道大学・触媒研究センター・客員教授として招聘)
- (3) Brian Stoltz (California Institute of Technology, USA) (平成25年4月10日-4月26日)
- (4) Michael Willis (University of Oxford, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (5) Darren Dixon (University of Oxford, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (6) Veronique Gouverneur (University of Oxford, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (7) Stephen Fletcher (University of Oxford, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (8) Matthew Gaunt (University of Cambridge, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (9) Nicolas Turner (University of Manchester, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (10) Jim Anderson (University College London, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (11) David Procter (University of Manchester, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (12) Igor Larossa (Queen Mary, University of London, UK) (平成25年4月18日-4月21日)
- (13) Jeffrey N. Johnston (Vanderbilt University, USA) (平成25年5月19日-6月1日)
- (14) Ying-Yeung Yeung (National University of Singapore, Singapore) (平成25年5月26日-29日)
- (15) Michael J. Krische (University of Texas at Austin, USA) (平成25年5月26日-6月8日)

【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7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7. 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	142	216	144	502
著書	18	30	26	74
総説・解説	18	12	13	43
特許	1	30	6	37
合計	179	288	189	656

○主な原著論文

<A01 班・計画研究>

- (1) "Relay Catalysis via a Rhodium Complex/Chiral Brønsted Acid Binary System Involving Enantioselective Reduction of a Carbonyl Ylide as the Reactive Intermediate."
*Terada, M.; Toda, Y.
Angew. Chem. Int. Ed. **2012**, 51 (9), pp.2093-2097.
- (2) "Chiral Brønsted Acid-Catalyzed Stereoselective Addition of Azlactones to 3-Vinylindoles for Facile Access to Enantioenriched Tryptophan Derivatives."
*Terada, M.; Moriya, K.; Kanomata, K.; Sorimachi, K.
Angew. Chem. Int. Ed. **2011**, 50 (52), pp.12586-12590.
- (3) "Enantioselective Synthesis of Multisubstituted Biaryl Skeleton by Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Desymmetrization/Kinetic Resolution Sequence."
Mori, K.; Ichikawa, Y.; Kobayashi, M.; Shibata, Y.; Yamanaka, M.; *Akiyama, T.
J. Am. Chem. Soc. **2013**, 135 (10), pp. 3964-3970.
- (4) "Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Transfer Hydrogenation: A Facile Synthetic Access to Highly Optically Active Trifluoromethylated Amines."
Henseler, A.; Kato, M.; Mori, K.; *Akiyama, T.
Angew. Chem. Int. Ed. **2011**, 50 (35), pp.8180-8183.
- (5) "Highly Stereoselective Michael Addition of Azlactones to Electron-Deficient Triple Bonds under *P*-Spiro Chiral Iminophosphorane Catalysis: Importance of Protonation Pathway."
Uraguchi, D.; Ueki, Y.; Sugiyama, A.; *Ooi, T.
Chem. Sci. **2013**, 4 (3), pp.1308-1311.
- (6) "Highly Regio-, Diastereo-, and Enantioselective 1,6- and 1,8-Additions of Azlactones to Di- and Trienyl *N*-Acylpyrroles."
Uraguchi, D.; Yoshioka, K.; Ueki, Y.; *Ooi, T.
J. Am. Chem. Soc. **2012**, 134 (47), pp.19370-19373.
- (7) "DFT Study of Mechanism and Origin of Enantioselectivity in Chiral BINOL-Phosphoric Acid Catalyzed Transfer Hydrogenation of Ketimine and α -Imino Ester Using Benzothiazoline."
Shibata, Y.; *Yamanaka, M.
J. Org. Chem. **2013**, 78 (8), pp.3731-3736.
- (8) "Kinetic Resolution in Chiral Brønsted Acid Catalyzed Aldol Reaction: Enantioselective Robinson-type Annulation Reaction."
*Yamanaka, M.; Hoshino, M.; Katoh, T.; Mori, K.; *Akiyama, T.
Eur. J. Org. Chem. **2012**, (24), pp.4508-4514.
- (9) "Organocatalytic 1,4-Addition Reaction of $\alpha,\beta,\gamma,\delta$ -Diunsaturated Aldehydes versus 1,6-Addition Reaction."
*Hayashi, Y.; Okamura, D.; Ummiya, S.; *Uchimaru, T.
ChemCatChem. **2012**, 4 (7), pp.959-962.
- (10) "Magnitude of CH/O Interactions between Carbohydrate and Water."
*Tsuzuki, S.; Uchimaru, T.; Mikami, M.
Theor. Chem. Acc. **2012**, 131 (3), pp.1192.

<A01 班・公募研究>

- (11) "Enantioselective Synthesis of Gabapentin Analogues via Organocatalytic Asymmetric Michael Addition of α -Branched Aldehydes to β -Nitroacrylates."
*Yoshida, M.; Masaki, E.; Ikehara, H.; Hara, S.
Org. Biomol. Chem. **2012**, 10 (27), pp.5289-5298.
- (12) "Contribution of Cation- π Interactions in Iminium Catalysis."
Mori, Y.; *Yamada, S.
Molecules **2012**, 17 (2), pp.2161-2168.
- (13) "Enantioselective Direct Aminalization with Primary Carboxamides Catalyzed by Chiral Ammonium 1,1'-Binaphthyl-2,2'-disulfonates."
Hatano, M.; Ozaki, T.; Sugiura, Y.; *Ishihara, K.

- Chem. Commun.* **2012**, 48 (41), pp.4986-4988.
- (14)"Construction of a Chiral Quaternary Carbon Center by Catalytic Asymmetric Alkylation of 2-Arylcyclohexanones under Phase-transfer Conditions."
Kano, T.; Hayashi, Y.; *Maruoka, K.
J. Am. Chem. Soc. **2013**, 135 (19), pp.7134-7137.
- (15)"Kinetic Resolution of β -Substituted Olefinic Carboxylic Acids by Asymmetric Bromolactonization."
Murai, K.; Matsushita, T.; Nakamura, A.; Hyogo, N.; Nakajima, J.; *Fujioka, H.
Org. Lett. **2013**, 15 (10), pp.2526-2529.
- (16)"Flavin-catalyzed Aerobic Oxidation of Sulfides in Aqueous Media."
*Imada, Y.; Kitagawa, T.; Wang, H.-K.; Komiya, N.; *Naota, T.
Tetrahedron Lett. **2013**, 54 (7), pp.621-624.
- (17)"Synthesis of Furoxans from Styrenes under Basic or Neutral Conditions."
*Matsubara, R.; Saeki, Y.; Li, J.; Eda, K.
Synthesis **2013**, 45 (11), pp.1524-1528.
- (18)"A Transition-Metal-Free Cross-Coupling Reaction of Allylic Bromides with Aryl- and Vinylboronic Acids."
*Ueda, M.; Nishimura, K.; Kashima, R.; *Ryu, I.
Synlett **2012**, 23 pp.1085-1089.
- (19)"Chiral Guanidine-Catalyzed 1,4-Addition Reaction of 5H-Oxazol-4-ones to Alkynones."
*Misaki, T.; Jin, N.; Kawano, K.; *Sugimura, T.
Chem. Lett. **2012**, 41 (12), pp.1675-1677.
- (20)"Synthesis, Characterization, and Applications of Zwitterions Containing Carbanion Moiety."
*Yanai, H.; Yoshino, T.; Fujita, M.; Fukaya, H.; Kotani, A.; Kusu, F.; Taguchi, T.
Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, 52 (5), pp.1560-1563.
- (21)"Catalytic Enantioselective Formal Hetero-Diels-Alder Reactions of Enones with Isatins to Give Spirooxindole Tetrahydropyranones."
Cui, H.-L.; *Tanaka, F.
Chem. Eur. J. **2013**, 19 (20), pp.6213-6216.

<A02 班・計画研究>

- (22)"Asymmetric Dearomatizing Spirolactonization of Naphthols Catalyzed by Spirobiindane-Based Chiral Hypervalent Iodine Species."
Dohi, T.; Takenaga, N.; Nakae, T.; Toyoda, Y.; Yamasaki, M.; Shiro, M.; Fujioka, H.; Maruyama, A.; *Kita, Y.
J. Am. Chem. Soc. **2013**, 135 (11), pp.4558-4566.
- (23)"Coupling of Quinone Monoacetals Promoted by Sandwiched Bronsted Acids: Synthesis of Oxygenated Biaryls."
Dohi, T.; Washimi, N.; Kamitanaka, T.; Fukushima, K.; *Kita, Y.
Angew. Chem. Int. Ed. **2011**, 50 (27), pp.6142-6146.
- (24)"NHC-catalyzed Thioesterification of Aldehydes by External Redox Activation."
Uno, T.; Inokuma, T.; *Takemoto, Y.
Chem. Commun. **2012**, 13 (48), pp.1901-1903.
- (25)"Organocatalyzed Isomerization of α -Substituted Alkynoates into Trisubstituted Allenates via Dynamic Kinetic Resolution."
Inokuma, T.; Furukawa, M.; Suzuki, Y.; Kimachi, T.; Kobayashi, Y.; *Takemoto, Y.
ChemCatChem. **2012**, 4 (7), pp.983-985.
- (26)"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.
- (27)"Organocatalytic Chemoselective Monoacylation of 1,n-Linear Diols."
Yoshida, K.; Furuta, T.; *Kawabata, T.
Angew. Chem. Int. Ed. **2011**, 50 (21), pp.4888-4892.
- (28)"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.

(29)"Synthesis of 3-Carboxylated Indole through a Tandem Process Involving Cyclization of 2-Ethynylanilines Followed by CO₂ Fixation in the Absence of Transition Metal Catalysts."

*Inamoto, K.; Asano, N.; Nakamura, Y.; Yonemoto, M.; *Kondo, Y.

Org. Lett. **2012**, 14 (10), pp.2622-2625.

<A02 班・公募研究>

(30)"Catalytic Aerobic Production of Imines en Route to Mild, Green, and Concise Derivatizations of Amines."

Sonobe, T.; *Oisaki, K.; *Kanai, M.

Chem. Sci. **2012**, 3 (11), pp.3249-3255.

(31)"Cooperative Catalytic Reactions Using Organocatalysts and Transition Metal Catalysts: Propargylic Allylation of Propargylic Alcohols with α,β -Unsaturated Aldehydes."

Ikeda, M.; Miyake, Y.; *Nishibayashi, Y.

Organometallics **2012**, 31 (9), pp.3810-3813.

(32)"Construction of an All-Carbon Quaternary Stereocenter by the Peptide-Catalyzed Asymmetric Michael Addition of Nitromethane to β -Disubstituted α,β -Unsaturated Aldehydes."

K. Akagawa, *K. Kudo

Angew. Chem. Int. Ed. **2012**, 51 (51), pp.12786-12789.

(33)"Enantioselective Synthesis of Epoxides Having a Tetrasubstituted Trifluoromethylated Carbon Center: Methylhydrazine-Induced Aerobic Epoxidation of β,β -Disubstituted Enones."

Kawai, H.; Okusu, S.; Yuan, Z.; Tokunaga, E.; Yamano, A.; Motoo, S.; *Shibata, N.

Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, 52 (8), pp.2221-2225.

(34)"Enantioselective Synthesis of α -Alkylidene- γ -Butyrolactones: Intramolecular Rauhut-Currier Reaction Promoted by Acid/Base Organocatalysts."

Takizawa, S.; Nguyen, T. M.-N.; Grossmann, A.; Enders, D.; *Sasai, H.

Angew. Chem. Int. Ed. **2012**, 51 (22), pp.5423-5426.

(35)"Kinetic Resolution of Secondary Alcohols by the Combination of a Chiral Bronsted Acid, DABCO, and Acetyl Chloride."

*Mandai, H.; Murota, K.; Mitsudo, K.; *Suga, S.

Org. Lett. **2012**, 14 (13), pp.3486-3489.

(36)"Hydrolytic Enantioselective Protonation of Cyclic Dienyl Esters and a β -diketone with Chiral Phase-transfer Catalysts."

Yamamoto, E.; Gokuden, D.; Nagai, A.; Kamachi, T.; Yoshizawa, K.; Hamasaki, A.; Ishida, T.; *Tokunaga, M.

Org. Lett. **2012**, 14 (24), pp.6178-6181.

(37)"One-Handed Helical-Screw Direction of Homopeptide-Foldamer Exclusively Induced by Cyclic α -Amino Acid Side-Chain Chiral Centers."

Demizu, Y.; Doi, M.; Kurihara, M.; Maruyama, T.; Suemune, H.; *Tanaka, M.

Chem. Eur. J. **2012**, 18 (8), pp.2430-2439.

(38)"Stereoselective Synthesis of Multiple Stereocenters by Using a Double Aldol Reaction."

Shimoda, Y.; Kubo, T.; Sugiura, M.; *Kotani, S.; *Nakajima, M.

Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, 52 (12), pp.3461-3464.

<A03 班・計画研究>

(39)"Pot-Economy in the Synthesis of Prostaglandin A1 and E1 Methyl Esters."

*Hayashi, Y.; Umemiya, S.

Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, 52 (12), pp.3450-3452.

(40)"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.; *Uchimaru, T.

J. Am. Chem. Soc. **2011**, 133 (50), pp.20175-20185.

(41)"Organocatalytic One-pot Oxidative Cleavage of Terminal Diols to Dehomologated Carboxylic Acids."

Shibuya, M.; Doi, R.; Shibuta, T.; Uesugi, S.; *Iwabuchi, Y.

Org. Lett. **2012**, *14* (19), pp.5006-5009.

- (42)"Highly Efficient, Organocatalytic Aerobic Alcohol Oxidation."
Shibuya, M.; Osada, Y.; Sasano, Y.; Tomizawa, M. *Iwabuchi, Y.
J. Am. Chem. Soc. **2011**, *113* (17), pp.6497-6500.
- (43)"Determination and Total Synthesis of (+)-16-Hydroxy-16,22-Dihydroapparine."
Hirose, T.; Noguchi, Y.; Furuya, Y.; Ishiyama, A.; Iwatsuki, M.; Otaguro, K.; *Omura, S.; *Sunazuka, T.
Chem. Eur. J. **2013**, *in press*
- (44)"The First Total Synthesis and Reassignment of the Relative Stereochemistry of 16-hydroxy-16,22- dihydroapparine."
Noguchi, Y.; Hirose, T.; Furuya, Y.; Ishiyama, A.; Otaguro, K.; *Omura, S.; *Sunazuka, T.
Tetrahedron Lett. **2012**, *53* (14), pp.1802-1807.
- (45)"Sequential Enantiodivergent Organocatalysis: Reversibility in Enantioswitching Controlled by Conformationally Flexible Guanidine/Bisthiourea Organocatalyst."
Sohtome, Y.; Yamaguchi, T.; Tanaka, S.; *Nagasawa, K.
Org. Biomol. Chem. **2013**, *11* (17), pp.2780-2786.
- (46)"Dynamic Asymmetric Organocatalysis: Cooperative Effects of Weak Interactions and Conformational Flexibility in Asymmetric Organocatalysts."
Sohtome, Y.; *Nagasawa, K.
Chem. Commun. **2012**, *48* (63), pp.7777-7789.

<A03 班・公募研究>

- (47)"Diphenyl Phosphate as an Efficient Acidic Organocatalyst for Controlled/Living Ring-Opening Polymerization of Trimethylene Carbonates Leading to Block, End-Functionalized, and Macrocyclic Polycarbonate."
Makiguchi, K.; Ogasawara, Y.; Kikuchi, S., Satoh, T., *Kakuchi, T.
Macromolecules **2013**, *46* (5), pp.1772-1782.
- (48)"Stereocontrolled Solid-phase Synthesis of Phosphorothioate Oligoribonucleotides Using 2'-O-(2-Cyanoethoxymethyl)-nucleoside 3'-O-oxazaphospholidine Monomers"
Nukaga, Y.; Yamada, K.; Ogata, T.; Oka, N.; *Wada, T.
J. Org. Chem. **2012**, *77* (18), pp.7913-7922.
- (49)"Organocatalytic Knoevenagel Condensations by Means of Carbamic Acid Ammonium Salts."
*Mase, N.; Horibe, T.
Org. Lett. **2013**, *15* (8), pp.1854-1857.
- (50)"Design of Main-chain Polymer of Chiral Imidazolidinone for Asymmetric Organocatalysis Application."
*Haraguchi, N.; Kiyono, H.; Takemura, Y.; Itsuno, S.
Chem. Commun. **2012**, *48* (33), pp.4011-4013.
- (51)"Aminohydroxyacetone Synthons: Versatile Intermediates for the Organocatalytic Asymmetric Aldol Reaction."
Komatsu, Y.; Watanabe, R.; Nakano, K.; Ichikawa, Y.; *Kotsuki, H.
Org. Biomol. Chem. **2012**, *10* (15), pp.2993-3001.
- (52)"Organocatalytic asymmetric syntheses of inthomycins A, B and C."
Yoshino, M.; Eto, K.; Takahashi, K.; Ishihara, J.; *Hatakeyama, S.
Org. Biomol. Chem. **2012**, *10* (40), pp.8164-8174.
- (53)"Bio-inspired Dimerization Reaction of Tryptophan Derivatives in Aqueous Acidic Media: Three-step Synthesis of (+)-WIN 64821, (-)-Ditryptophenaline and (+)-Nasesezazine B."
Tadano, S.; Mukaeda, Y.; *Ishikawa, H.
Angew. Chem. Int. Ed. **2013**, *52* in press
- (54)"Catalytic Desymmetrization of Cyclohexadienes via Asymmetric Bromolactonization."
Ikeuchi, K.; Ido, K.; Yoshimura, S.; Asakawa, T.; Inai, M.; *Hamashima, Y.; *Kan, T.
Org. Lett. **2012**, *14* (23), pp.6016-6019.
- (55)"One-pot Synthesis of Unsymmetrical Benzils and N-Heteroarenes through Nucleophilic Aroylation Catalyzed by N-Heterocyclic Carbene."
Suzuki, Y.; Murofushi, M.; *Manabe, K.
Tetrahedron **2013**, *69* (2), pp.470-473.

○主な特別講演・受賞講演・招待講演・依頼講演等

表 8. 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・招待講演等	85	53	68	206
国内学会における 特別講演・招待講演・依頼講演等	49	45	58	152
学会主催の講習会等での講師	5	9	4	18
他大学への集中講義・非常勤講師 (主な派遣先は表 9)	23	30	18	71
企業での講演 (主な派遣先は表 10)	16	17	7	40
合計	178	154	155	487

表 9. 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 10. 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	名古屋市工業研究所
日産化学工業 (株)	浜理薬品工業 (株)	三井化学 (株)	持田製薬 (株)

<国際会議、あるいは海外での主な特別講演・招待講演等>

- "Total synthesis of Novel Polycyclic Bioactive Indole Alkaloid" *[Sunazuka, T.](#)
12th International Conference on the Chemistry of Antibiotics and other Bioactive, Berlin (Germany) 2011-09-11~2011-09-14
- "Regioselective Functionalization by Organocatalysis" *[Kawabata, T.](#)
The Seventh International Symposium on Integrated Synthesis (ISIS-7), Kobe (Japan) 2011-10-09~2011-10-10
- "Chiral Phosphoric Acid Catalyzed C(sp³)-H Bond Activation" *[Akiyama, T.](#)
First German-Japan Organocatalytic Symposium, Kyoto (Japan) 2011-10-14~2011-10-15
- "Power of Iodine - Discovery and Application of Novel Coupling Reactions - " *[Kita, Y.](#)
14th The Society of Iodine Science Symposium, Chiba (Japan) 2011-11-18~2011-11-18
- "Alcoholysis and Hydrolysis of Alkenyl Esters and Ethers with Homogeneous Catalysis" E. Yamamoto, H. Ito, A. Hamasaki, T. Ishida and *[M. Tokunaga](#)
The 6th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (ICCEOCA-6) and The 2nd New Phase International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Hong Kong (China) 2011-12-11~2011-12-15

- (6) "Asymmetric α -Functionalizations of Aldehydes Catalyzed by Biaryl-based Secondary Amines" *Kano, T.
TAIWAN–JAPAN Symposium of Frontier Research on Design and Applications of Fine Chemicals, Taipei (Taiwan) 2012-01-06~2012-01-08
- (7) "Enantioselective Carbon-Carbon Bond Forming Reactions Catalyzed by Chiral Phosphoric Acids" *Terada, M.
4th Novel Chiral Chemistries Japan 2012, Tokyo (Japan) 2012-03-15~2012-03-16
- (8) "Enantiocontrolled Synthesis of Organofluorine Compounds" *Shibata, N.
BIT's 3rd Annual World Congress of Catalytic Asymmetric Synthesis (WCCAS-2012), Beijing (China) 2012-05-12~2012-05-14
- (9) "Enantioselective Carbon-Carbon Bond Forming Reactions Catalyzed by Chiral Phosphoric Acids" *Terada, M.
Molecular Chirality ASIA2012, Fukuoka (Japan) 2012-05-17~2012-05-18
- (10) "Enamine-based catalysis: Synthesis of amino acids and sugars" *Tanaka, F.
The Second Asian Chemical Biology Conference (ACBC2012), Okinawa (Japan) 2012-07-04~2012-07-06
- (11) "Asymmetric Organocatalysis with Bifunctional Thioureas and Newly Designed Hydrogen-bond Donors" *Takemoto, Y.
International Conference Catalysis in Organic Synthesis, Moscow (Russia) 2012-09-15~2012-09-20
- (12) "Organocatalyst in Total Synthesis" *Hayashi, Y.
ISCHIA Advanced School of Organic Chemistry, Napoli (Italy) 2012-09-23~2012-09-23
- (13) "Helically Chiral Dienes in Asymmetric Catalysis: Design, Synthesis, and Application of 1,4-Bis(phosphino)-1,3-butadiene Derivatives Having C2-C3-Fused Cyclic System" *Ogasawara, M.
The 17th Malaysian Chemical Congress, Kuala Lumpur (Malaysia) 2012-10-15~2012-10-17
- (14) "Organocatalyst in Total Synthesis" *Hayashi, Y.
The 7th International Conference on Cutting-edge Organic Chemistry in Asia and the 3rd New Phase International Conference on Cutting-edge Organic Chemistry in Asia (ICCEOCA-7/NICCEOCA-3), Singapore (Singapore) 2012-12-13~2012-12-13
- (15) "Chiral Ionic Brønsted Acid-Achiral Brønsted Base Synergistic Catalysis for Asymmetric Sulfa-Michael Addition to Nitroolefins" Uraguchi, D.
1st Japan-USA Organocatalytic Symposium in Hawaii, (USA) 2012-12-16~2012-12-18
- (16) "Chiral Phosphoric Acids as Versatile Catalysts for Enantioselective Transformations" *Terada, M.
The 23rd French-Japanese Symposium on Medicinal and Fine Chemistry, Nagasaki (Japan) 2013-05-12~2013-05-15
- (17) "Enantioselective Transfer Hydrogenation of Ketimines by Use of Benzothiazoline as a Hydrogen Donor" *Akiyama, T.
Advance Molecular Transformations by Organocatalysts, First International Conference, Otsu (Japan) 2013-05-27~2013-05-28

○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—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 18 日 'Chemistry Views Magazine' web site 「Guanidine/Azole Binary System as an Efficient Catalyst for Morita-Baylis-Hillman Reaction (*ChemCatChem* **2012**, 4, 963-967)」寺田 眞浩ら (A01 班)
- (5) 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)
- (6) 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)
- (7) 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—有機触媒で効率合成」柴田 哲男 (A02 班)
- (8) 平成 24 年 10 月 10 日 'Chemistry Views Magazine' web site 「Asymmetric induction by helical poly(amino acid) in cyanosilylation of aldehydes, (*Tetrahedron Lett.* **2012**, 53, 5981-5983)」工藤 一秋ら (A02 班)
- (9) 平成 25 年 2 月 6 日 RSK ラジオ「山陽放送 (AM 放送)」出演 「技術の森」菅 誠治 (A02 班)

- (10)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)
- (11)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)
- (12)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)
- (13)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)

○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： 10 件
産学連携向けに研究内容が紹介された： 19 件

○主な受賞

- (1) 井上學術賞 (公益財団法人 井上科学振興財団) 「環境調和型有機触媒反応の開発とその応用」平成 24 年 2 月 林 雄二郎 (A03 班)
- (2) 第一三共・創薬有機化学賞 (公益社団法人 有機合成化学協会) 「水素結合を戦略的相互作用とする有機分子触媒の創製」平成 24 年 2 月 寺田 眞浩 (A01 班)
- (3) 日本薬学会学術振興賞 (公益社団法人 日本薬学会) 「高活性アルコール酸化触媒 AZADO の発見と展開」平成 24 年 3 月 岩淵 好治 (A03 班)
- (4) 長瀬研究振興賞 (公益財団法人 長瀬科学技術振興財団) 「レドックス応答型有機分子触媒反応系の開発」平成 24 年 4 月 菅 誠治 (A02 班)
- (5) 科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞 (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の研究」平成 24 年 4 月 加納 太一 (A01 班)
- (6) Molecular Chirality Award 2012 (Molecular Chirality Research Organization) 「Creation of Memory of Chirality Concept and Application to Asymmetric Synthesis」平成 24 年 5 月 川端 猛夫 (A02 班)
- (7) Banyu Chemist Award (BCA) (公益財団法人 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 24 年 10 月 浦口 大輔 (A01 班)
- (8) 名古屋シルバーメダル 2012 (公益財団法人 万有生命科学振興国際交流財団) 「Control of Stereochemistry by Chiral Brønsted Acid Catalyst」平成 24 年 11 月 秋山 隆彦 (A01 班)
- (9) 名古屋シルバーメダル 2012 (公益財団法人 万有生命科学振興国際交流財団) 「Enantioselective Catalysis by Chiral Brønsted Acids and Bases」平成 24 年 11 月 寺田 眞浩 (A01 班)
- (10) 日本化学会北海道支部奨励賞 (公益社団法人 日本化学会北海道支部) 「第一級アミノ酸およびその塩を利用する不斉有機触媒反応の開発」平成 25 年 1 月 吉田 雅紀 (A01 班)
- (11) 科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞 (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 4 月 波多野 学 (A01 班)
- (12) 東海化学工業会 学術賞 (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 25 年 5 月 原口 直樹 (A03 班)
- (13) 資生堂女性研究者サイエンスグラント (資生堂) 「有機触媒反応を用いた医薬品候補化合物の合成 (未来の指導的女性研究者トップ 10 として選出)」平成 25 年 6 月 鈴木 由美子 (A03 班)

○アウトリーチ活動

本領域のアウトリーチ活動について表 1-1 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 1.1. 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	のべ対象人数
高校などへの出前授業	34	約 1,850
オープンキャンパスにて研究紹介	13	約 790
体験学習などを通じた研究紹介	18	約 450
サイエンスカフェにて研究紹介	4	約 140
一般向け講演会（公開講座など）	8	約 830
合計	77	約 4,060

<主なアウトリーチ活動>

- (1) 高校への出前授業「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」
平成 24 年 2 月 1 日 倉敷市 秋山 隆彦 (A01 班)
- (2) サイエンスカフェ「産研サイエンスカフェ：鏡の国のミルクはおいしくない？～不斉触媒を用いた不斉合成」
平成 24 年 5 月 1 日 茨木市 滝澤 忍 (A02 班)
- (3) 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」
平成 24 年 6 月 16 日 東京都 砂塚 敏明 (A03 班)
- (4) 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」
平成 24 年 7 月 21 日 長崎市 田中 正一 (A02 班)
- (5) 高校生向け体験学習「日本薬学会北陸支部 高校生 1 日体験入学：「くすり」を作ろう」
平成 24 年 7 月 22 日 富山市 矢倉 隆之 (A02 班)
- (6) 高校生向け体験学習「色素の合成と太陽電池の作成」
平成 24 年 8 月 2 日 名古屋市 柴田 哲男 (A02 班)
- (7) オープンキャンパス「上智大学オープンキャンパス：香りと味覚のケミストリー」
平成 24 年 8 月 4 日 東京都 鈴木 由美子 (A03 班)
- (8) 高校生向け体験学習「夢・化学 21（化学への招待）北海道大学化学系への二日体験入学：薬を作る」
平成 24 年 8 月 7 日～8 日 札幌市 吉田 雅紀 (A01 班)
- (9) 高校生向け体験学習「テクノサイエンスセミナー実験実習 2012：有機分子を光らせよう」
平成 24 年 8 月 9 日 名古屋市 浦口 大輔 (A01 班)
- (10) 高校生向け体験学習「高大連携実験実習講座：人にも環境にも優しいグリーンケミストリー～天然酵素に匹敵する低分子の有機分子触媒～」
平成 24 年 8 月 9 日 浜松市 間瀬 暢之 (A03 班)
- (11) 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」
平成 24 年 8 月 25 日 豊橋市 原口 直樹 (A03 班)
- (12) 一般向け公開講座「高知市民の大学第 72 期：バイオテクノロジー研究のニューフロンティア・本コースの概要とねらい」
平成 24 年 10 月 2 日 高知市 小槻 日吉三 (A03 班)
- (13) 高校への出前授業「盛岡市立高等学校：触媒反応の原理・最近の動向」
平成 24 年 10 月 10 日 盛岡市 是永 敏伸 (A01 班)
- (14) 高校生向け体験学習「スーパーサイエンススクール・高大連携 Dr. 講座」
平成 24 年 10 月 15 日～19 日 大津市 小林 祐輔 (A02 班)
- (15) 高校生向け体験学習「スーパーサイエンススクール体験学習：医薬品とは何か・どのように作られるのか」
平成 24 年 12 月 1 日 熊本市 中島 誠 (A02 班)
- (16) 高校生向け体験学習「科学への誘いセミナー：バラの香りがレモンに変わる」
平成 24 年 12 月 23 日 東京都 山田 眞二 (A01 班)
- (17) 一般向け公開講座「東北大学・大学院理学研究科カフェ企画：化学物質ってどんなイメージ？」
平成 25 年 3 月 7 日 仙台市 寺田 眞浩 (A01 班)

<アウトリーチ活動・今後の主な予定>

- (18) オープンキャンパス「東北大学オープンキャンパス：3つの新学術領域研究（天然物ケミカルバイオロジー・有機分子触媒による未来型分子変換・植物細胞壁の情報処理システム）合同企画～生命の分子～」
平成25年7月30日～31日 仙台市 寺田 眞浩（A01班）
- (19) 高校生向け研究室体験講座「研究最前線：生体触媒を凌駕する人工分子触媒を創造しよう」
平成25年8月3日 開催予定 京都市 竹本 佳司（A02班）
- (20) 高校生向け体験学習「化学への招待・高校生向のための化学講座：有機合成実験の体験」
平成25年8月6日 開催予定 岐阜市 岡 夏央（A03班）
- (21) オープンキャンパス「名古屋大学オープンキャンパス：夢の化学反応にかける学生たちの活躍～世界最先端の有機合成化学のチカラ～」
平成25年8月7日 開催予定 名古屋市 波多野 学（A01班）
- (22) 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」
平成25年9月21日～23日 開催予定 徳島市 今田 泰嗣（A01班）
- (23) 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」
平成25年9月17日 開催予定 仙台市 岩渕 好治（A03班）
- (24) 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～」
平成25年10月9日 開催予定 大阪市 北 泰行（A02班）
- (25) 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」
平成25年11月11日 開催予定 武蔵野市 長澤 和夫（A03班）
- (26) 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」
平成25年11月16日 開催予定 神戸市 松原 亮介（A01班）

9. 今後の研究領域の推進方策（2ページ程度）

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班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。

本学術領域が発足してから2年10カ月を経ようとしているが（公募班員が参画してからは1年3ヶ月）、概ね順調に研究計画を推進しており、特に大きな問題点は無い。

総括班実施グループでは、領域代表 寺田 眞浩（A01 班長兼務）、A02 班長の北 泰行、A03 班長の林 雄二郎、事務担当の秋山 隆彦（A01 班）、広報担当の竹本 佳司（A02 班）と密に連絡を取りながら本領域の推進に努めてきた。この総括班実施グループとともに評価グループ5名からなる総括班会議を定期的に開催し、研究計画の進捗状況を確認するとともに情報交換や本領域の研究対象である「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」の実現に向け、運営方針の確認を行ってきた。さらに、総括班で定めた運営方針を徹底するため、他の計画研究班員（7名）ならびに公募研究班員（35名）とともに半期に一度の班会議を開くことで、構成班員の全てが共通認識を持った上で本領域の強力な推進を目指してきた。その結果、7ページの**表1**にまとめたように、論文発表済14件、学会発表済22件、未発表共同研究は実に60件と共同研究の実績を着実に増やしている。多くが理論化学的なアプローチによる機構解明により学問としての深化を意図した共同研究が進められており、今後の公募研究の再募集の際には反応化学を理論的に解析する研究者の強化が益々重要になってくると考えられる。また、開発した有機分子触媒ならびにそれを用いて開発された触媒反応系を利用し有用物質（医薬、材料など）の合成へと応用展開する研究者の参画も強く望まれるところである。こうした新規参画の研究者を期待する一方で、領域外の共同研究も284件と多くなされており、これらの詳細な調査の結果、そのうちおよそ1/3が本領域の主題である「有機分子触媒」に関連した研究内容であることが判明している。本来、本領域の班員となるべき多くの研究者が漏れ落ちていたことを示唆しており、来年度の公募班員の再募集の際、募集枠を増やすなど十分に考慮すべき案件であることも明らかになった。

有機分子触媒に関する研究は2000年を境に急速に展開してきた分野であり、その歴史は10数年とまだ浅く、今後、本領域のさらなる発展へと導くためには学問分野としての確立とともに、産業界への応用をも視野に入れた展開が不可欠である。同時に化学一般、ひいては異分野への応用展開をも視野に入れたバックグラウンドの異なる幅広い研究者の参画が本領域のさらなる発展には必要となるであろう。いわゆる裾野の拡大こそが今後、本領域が学問分野として確固たる地位を築く上で重要な案件となってくる。まずは本領域の将来の担い手となる若手研究者の育成に注力し、基盤を盤石にすることが先決である。そのためには、若手研究者の参画を促す魅力的な研究分野として将来的な目標が明確であることが不可欠である。学会における中心的な分野として斬新な研究成果を挙げ続けることはもちろんであるが、その一方で産学連携による実社会への貢献によって、本領域が魅力的な分野として広く認知されることが重要である。実際、本領域の最終目標である「モノづくりの未来像創出」の実現には、今後、産学連携が益々重要となってくることは必至であり、その橋渡し役として、総括班が中心となり先導的に企業とのマッチングを図るとともに、社会的なニーズにマッチしたシーズの発掘を心がけることが不可欠である。幸いなことに、本領域が主催する公開シンポジウムや国際会議では、28ページの**表5**、**表6**に示すように参加者のおよそ10-20%は製薬業界を中心に企業研究者が占めており、産業界から熱い視線を浴びていることは疑う余地が無い。今後、企業からの関心が集まる本領域の特徴を生かし、産学連携の道筋をより強固にすることも本領域の重要な使命ととらえている。また、今や学会だけでなく、産業界も同様にグローバル化の荒波にさらされており、海外の研究者との積極的な情報交換により、世界の潮流にも敏感にアンテナを張り、いかにグローバル化に対応した人材育成をするかということも今後の課題といえよう。

以上、本領域の強みと問題点を鑑み、今後の方策として、①各項目内外の連携強化の方策、②若手育成を図るための方策、③分野の拡大と広報活動の方策、④産業界との積極的な交流推進のための方策、⑤海外研究者との積極的な交流推進のための方策、以上の5点を掲げ、本領域のさらなる飛躍につなげたい。以下、具体的な方策について列記する。

【研究項目内外の連携強化の方策】

- (1) 共同研究を積極的に推進するため、総括班から旅費の支給を援助する制度を開始。
- (2) 来年度の公募班員の再募集の際に、有機分子触媒に関心のある理論化学者ならびに有機分子触媒を利用した有用物質合成に関心のある研究者を新規開拓する目的で本領域 HP 上にて広報。
- (3) 班員と領域外共同研究を進めている研究者に対し、来年度の公募研究への応募に積極的な働きかけ。
- (4) 毎月ニュースレターを発行し、班員の研究の動向をタイムリーに伝えるとともに公開シンポジウムや国際会議の連絡ならびに共催・協賛学会等の情報を併せて掲載することで積極的な参加の呼びかけを案内。

【若手育成を図るための方策】

- (1) 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：伊豆・ラフォーレ伊東）
[非公開] 昨年度より規模を1.5倍にして50名の参加見込みのもとで開催予定。
- (2) 日本化学会春季年会において「特別企画：有機分子触媒の最先端201X」を領域内外の若手研究者の人的交流と情報交換を促すことを目的に今年度に引き続き来年度以降も講演会を企画。
- (3) 公開シンポジウム、国際会議等でのポスター発表開催とポスター賞の授与。
- (4) 主催、共催シンポジウムでの若手研究者の優先的発表。
- (5) 若手研究者の海外講演旅行派遣を支援。

【産業界との積極的な交流推進のための方策】

- (1) 第3回公開シンポジウム（平成25年11月28日－29日：仙台・仙台市民会館）において日本プロセス化学会との合同シンポジウムを開催予定。
- (2) 公開シンポジウム、国際会議において企業研究者の招待講演を引き続き実施。
- (3) 企業における講演を引き続き積極的に受諾し、産業界への研究内容の紹介を促進。

【分野の拡大と広報活動の方策】

- (1) 班員と領域外研究者との共同研究を促進することを目的に、領域外研究者に対して公開シンポジウム、会議の案内を送るとともに、ポスター発表の場を設けることで成果発表を促し、人的交流、情報交換の機会を設置。
- (2) 来年度の公募研究の再募集の際に、新規参画研究者を積極的に開拓する目的で本領域 HP 上にて広報。
- (3) アウトリーチ活動を充実させることを目的として、本領域 HP 上での体験学習、出前授業の募集を実施。
- (4) 書籍の出版「化学同人・日本化学会編：CSJ カレントレビュー」に「有機分子触媒のフロンティア（仮題）」を出版予定。平成21年に「進化を続ける有機触媒：有機合成を革新する第三の触媒」を本領域の評価者である丸岡 啓二 教授（京大院理）が監修し出版しており、本領域によりどれだけの進展がみられたかを測る指標として前刊行から5年を経た平成26年を予定。
- (5) 第62回高分子討論会（平成25年9月11日－13日：金沢大学・角間キャンパス）において、特定テーマ「有機分子触媒による高分子合成：セッションオーガナイザー・佐藤 敏文 教授（A03班）」を開催予定。
- (6) 第4回公開シンポジウム（平成26年6月20日－21日：北海道大学・札幌キャンパス）において、「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」とのジョイントシンポジウムを開催予定。
- (7) 第5回公開シンポジウム（平成27年5月：沖縄・会場未定）を開催予定。

【海外研究者との積極的な交流推進のための方策】

- (1) 2nd International Conference on Organocatalysis（平成26年11月21日－22日：東京大学・本郷キャンパス）を開催予定。
- (2) 3rd International Conference on Organocatalysis（平成27年12月15日－20日 Hawaii・Honolulu）において Pacifichem2015 のセッションの一つとして開催予定。
- (3) これまでドイツ、アメリカ合衆国、イギリスと開催してきた二国間国際会議の継続的な開催と新たな対象国との二国間国際会議の開催を検討。
- (4) 関連分野の国際会議を共催・協賛し、班員の積極的な参加を促進。
- (5) 外国人研究者を積極的に招聘（年5名程度）。

10. 組織変更等の大幅な計画変更がある場合は当該計画（研究代表者の変更は真にやむを得ない場合に限る）（2～5ページ程度）【非公開】※本欄に記載の計画研究については、全て3年度目の審査の対象となります。

領域内の計画研究の研究代表者の交替や組織体制に大幅な変更がある場合（新しく計画研究を追加する場合や既存の計画研究を廃止する場合、領域全体の交付予定額の範囲内で各計画研究の研究経費を変更する場合（計画研究に係る経費を減額し、公募研究に係る経費を増額する場合等））には必ず記入してください。その際、以下の点を含めてください。

- ・計画研究を追加する場合は、追加の必要性、その計画研究が領域内で果たす役割、他の計画研究への影響等
- ・計画研究を廃止する場合は、廃止の理由、当該計画研究を廃止しても領域として支障がないことの説明等
- ・研究代表者の交替の場合は、交替の必要性、新旧の研究組織の異なる点（組織構成、領域内で果たす役割等）、新たに研究代表者になろうとする者が、旧研究代表者に替わって研究を実施できることの根拠、妥当性及びその者の研究業績等
- ・計画研究に係る経費と公募研究に係る経費の額の変更については、その必要性、1回目の公募研究の応募・採択状況等（公募研究に係る経費を減額して計画研究に係る経費を増額する変更は真にやむを得ない場合に限る。また、公募研究の規模に係る最低基準を下回らないこと。）
- ・以上の各変更に伴う他の計画研究の研究経費の変更及びその妥当性等

該当なし。