

平成27年度 新学術領域研究（研究領域提案型）事後評価結果（所見）

研究領域名

直截的物質変換をめざした分子活性化法の開発

研究期間

平成22年度～26年度

領域代表者

茶谷 直人（大阪大学・大学院工学研究科・教授）

研究領域の概要

新しい結合活性化法の開拓、新しい反応活性種の創出、新しい反応場の構築を通じて、これまで不可能あるいは困難とされてきた分子変換を実現する有機合成反応を開拓する。本新学術領域研究がめざす方向は、既知反応の改良でもなく、既知反応の組み合わせによる新しい反応の開発でもない。分子活性種をいかに創出するかという点に焦点を当てて真に新しい触媒反応を開拓する。これにより分子活性化の方法論にブレークスルーをもたらし、物質変換手法をより直截的なものに刷新することを最終目標とする。物質変換手法の刷新は、医薬、農薬、材料科学、高分子科学など有機合成化学が支えている物質科学分野の進展に大きな波及効果をもたらすことが期待される。

領域代表者からの報告

1. 研究領域の目的及び意義

有機化合物は結合の集合体である。しかし、これまで有機合成化学者は、それらの結合のごく一部の反応性の高い使いやすい結合だけを利用してきた。もし、化学結合の斬新な活性化によって、従来法では困難と考えられていた化学変換反応が可能になれば、その手法は有機合成化学の体系を一変させるほどの大きな影響力をもつ。本新学術領域研究では、3つのキーワード『新しい結合活性化法の開拓、新しい反応活性種の創出、新しい反応場の構築』を掲げ、既知反応の改良でもなく、既知反応の組み合わせによる新しい反応の開発でもない、真に新しい反応を開拓する。その結果として、これまで不可能あるいは困難とされてきた有機合成反応を開拓する分子活性化の方法論を確立し、物質変換手法を直截的なものに刷新することを最終目標とする。有機合成化学が社会に対して果たすべき役割の一つは、機能を持った有用化合物を安定に供給すること、および新しい機能をもった新規化合物を創製し続けることである。つまり有機合成化学は、医薬、農薬、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る。新しい分子活性化法の創製は、有機合成化学の手法、ひいてはものづくりを大きく変革、刷新するポテンシャルを有している。有機合成化学が支えている物質科学分野へ高い機能を持った新規化合物の供給を可能にし、これらの分野の進展と共に、研究手法そのものを変革することにつながると期待される。

2. 研究の進展状況及び成果の概要

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、一酸化炭素を活用した簡便な増炭反応、酸素分子の活性化や窒素の固定などを達成目標としたが、その多くを達成することができ

た。飽和炭素－水素結合の直截的分子変換については、新しい二座配向基の利用、遷移金属とルイス酸の協働作用の利用、配向基の精密設計などにより、困難な飽和炭素－水素結合の新しい結合活性化の方法論を幾つか創成することができ、新しい触媒反応の開発に成功した。さらに、配位子の精密設計により、炭素－水素結合と二酸化炭素との反応によるカルボキシル化反応にも成功した。さらに、オキソ錯体の形成を鍵とするベンゼンからのフェノール合成も達成することができた。炭素－炭素、炭素－酸素、炭素－フッ素結合などの不活性炭素結合だけでなく、ヘテロ原子を含む多くの不活性な結合の活性化法も創成し、新規触媒反応の開発に成功した。また、高反応性活性種を精密に制御することにより、二酸化炭素や窒素の直接還元も達成することができた。高反応性金属カルベン種の発生により、二酸化炭素の活性化や Fischer-Tropsch 合成に類する段階的な炭素鎖成長反応を達成した。高度に制御された金属錯体を設計することにより、複素芳香環化合物の不斉水素化反応を達成し、生成物による不斉自己増幅という新しい現象も見いだした。タンパク質を反応場とする特異な選択性を示す触媒反応の開発も達成できた。

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、期待どおりの成果があった)

1. 総合所見

本研究領域は、有機合成化学分野においてこれまで利用することが困難であった、不活性な化学結合を活性化し、より直截的な触媒的分子変換反応を実現する方法論を確立するために、新しい結合活性化法の開拓、新しい反応活性種の創出、新しい反応場の構築の3つのキーワードを掲げ、有機合成化学や有機金属化学のみならず、化学における幅広い分野の研究者が連携することによって、その実現を目指したものである。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、一酸化炭素を活用した増炭反応、酸素分子の活性化や窒素の固定など、研究領域発足時に設定された目標の多くが達成され、その結果として研究領域全体で質的・量的ともに十分な論文が発表されるなど、研究領域の設定目的に照らして期待どおりの成果があった。学術的な意義はもとより、我が国の重要産業に対しての波及効果も大きく、本研究領域における研究の推進は時宜を得たものであった。さらに、若手研究者の育成への努力についても評価できる。

一方で、新学術領域研究としての異分野融合、計画研究間あるいは計画研究と公募研究の間での連携に基づく成果等においては、期待を上回るまでには至らなかった。

2. 評価の着目点ごとの所見

(1) 研究領域の設定目的の達成度

本研究領域の活動によって、従来困難であった飽和炭素－水素結合の活性化などが実現されており、設定された目標はほぼ達成されたと判断できる。国際的にも競争が激しい分野であるが、本研究領域から多くの独自の成果が創出された点でも、十分な達成度といえる。研究領域発足時に不足していた理論的研究を行う体制についても、公募研究において理論化学の研究者を採択し、共同研究を実施することで実験結果についての反応論的な解釈を与え、さらには、触媒設計の新概念と目標を提示したことは大いに意義があった。当該研究分野での理論的研究の重要性が大きくなってきていることに鑑み、本研究領域での取組みをきっかけに、合成化学と理論化学の連携についての継続的な努力が今後もなされていくことを期待したい。

(2)研究成果

本研究領域の関連分野は競争が激しい分野であるが、本研究領域からは質、量ともに十分な、非常に興味深い研究成果が見いだされており、当該研究分野において、我が国の国際的な認知度の維持・向上に十分に貢献したと判断できる。特に、ニッケルや鉄などの卑金属触媒で飽和炭素－水素結合の活性化を達成したことは特筆すべき事項である。

一方、分子内に反応の足場となる配向基などを必要としている点や、反応基質の特殊性や触媒調製の煩雑さが散見される点などについては、学術的及び実用化を見据えた観点から、更なる改善が必要と考えられる。これらについても、今後の発展につながると思われる重要な知見は多数得られており、継続的な努力を期待したい。

(3)研究組織

本研究領域には、当該研究分野の第一線で活躍する研究者と優れた若手研究者が参画し、さらに企業との連携も10社に及び、全体としてバランスのとれた組織構成であった。研究領域発足当初は、これら研究者相互の連携は十分でなかったが、領域代表者のリーダーシップにより、研究期間後半において、共同研究に基づく論文発表が増加したことは評価できる。

しかしながら、成果全体に占めるその割合は、有機合成化学分野における共同研究の難しさを考慮しても、必ずしも十分であったとはいえず、今後の更なる発展に期待したい。

また、本研究領域の成果の実用化への高い意識があった点は評価でき、本研究領域に参画した研究者が、今後企業との共同研究への展開を更に加速させることを期待したい。

(4)研究費の使用

特に問題点はなかった。

(5)当該学問分野、関連学問分野への貢献度

飽和炭素－水素結合の活性化を物質変換に適用できることを当該・関連学問分野に提示したことは、本研究領域の大きな貢献の一つと言える。さらに、本研究領域は、発足当初から企業の研究者を参画させ、産学連携を積極的に推進してきた。その結果、園芸用殺虫剤合成で工業化につながった例に加え、本研究領域で見いだされた反応を企業での実用化につなげる動きもいくつかあることから、産業界への波及効果も高く評価できる。

(6)若手研究者育成への貢献度

若手研究者セミナーの開催において、海外の若手研究者を招聘して国際会議形式で実施したことや、若手研究者をセミナーツアーで海外に派遣するなど、若手研究者の国際交流に結びつく取組みが積極的になされたことは評価できる。また、それらの成果として、本研究領域に参画した若手研究者において多数の昇進や受賞があったことも評価できる。