

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	17H06092	研究期間	平成29(2017)年度 ～令和3(2021)年度
研究課題名	炭素一水素結合活性化の化学の深化による有機合成技術の革新		
研究代表者名 (所属・職)	三浦 雅博 (大阪大学・先導的学際研究機構・特任教授)		

【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、配向基を必要とせずに炭素一水素結合の選択的活性化を可能にする新規遷移金属錯体触媒を探索し、酸化剤との協働機能によって、入手容易な化合物同士を直接結合させる反応を開発し、これを活用して有用物質の創出に資することを目指している。脱水素を伴う酸化的クロスカップリングは、有機化学的観点も環境負荷軽減の観点からも有機合成に一つの理想形を提供するものであり、その達成は極めて難易度が高い。しかし、研究代表者らは既にロジウム触媒の特異的な優位性などに興味深い知見を得ており、その機能的背景についても計算化学的手法による解明を進めている。さらに、機能性分子の創製においてもユニークな $\pi$ 共役系縮環芳香族化合物が合成されていることから、今後の展開が期待される。研究期間を通して、研究提案にある「カップリング反応の真の価値」やC-H結合の化学の「深化」について明確な答えが示されることを期待したい。

【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	本研究では、炭素一水素結合の触媒的活性化に取り組み、特に①概念的に新しい炭素一水素結合活性化触媒系の設計を行うとともに、配向基に依存しない幾つかの位置選択的反応を開発し、②実践的かつ標的指向型の直接クロスカップリング反応による $\pi$ 共役機能性分子の創製を行うことにより、独特な酸化還元特性や固体発光特性を示す新規化合物の合成に成功し、③反応中間体錯体の単離同定

や計算化学支援により、新たに開発した分子変換反応における炭素—水素結合活性化や切断機構の解明を行った。以上の成果は、当該学問領域を深化させるとともに環境調和型の新しい分子変換技術と機能性分子や生理活性化合物の新規創製法を提供し、有用物質の供給面から現代社会の持続可能な発展に対する貢献が期待され、期待された成果が上がったと認められる。