ERATO「小林高機能性反応場プロジェクト」
追跡評価報告書

総合所見

本プロジェクトは、戦略目標「環境負荷を最大限に低減する環境保全・エネルギー高度利用の実現のためのナノ材料・システムの創製」を達成するために、有機合成反応が起こる基本要素である反応媒体、基質および触媒を高機能性反応場として捉え、その「場」を原子・分子レベルで精密に設計し、従来法では困難な効率的・環境調和型反応プロセスの開発を目指した。具体的には、「水反応場」、「固定化触媒」、「機能性物質」の 3 つのテーマを柱として研究が展開された。中間評価では［秀(Excellent)］、事後評価では［総合評価 A+］と本プロジェクトは当該分野において世界を先導したという高い評価を受けた。さらに、プロジェクト終了後も、科研費、NEDO の「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」、先導的物質変換領域 ACT-C などに引き継がれて研究が幅広く展開されてきている。その研究成果は、基礎と応用の両面から独創性の高い科学技術へ展開できるものと高く評価されている。特に、水を反応場とする研究分野において、新事象が発見され新しい基礎化学の創成が予感される。加えて研究総括は、これまでには、優れた論文（被引用件数の総数約 6,500 件)を報告するだけでなく、多くの特許（登録特許 104 件)を出願しており、国内外の権威ある賞を多数受賞している。

以上のように、研究総括に研究を推進するにあたり、成果をいち早く応用し実用化していく姿勢が窺えることは高く評価できる。しかし、実用化や事業化は技術的要因だけで決まるものではなく経済的指標等様々な外的要因に左右されるものであり、容易ではない。また、それらを実現するためには企業など外部勢力との連携が必要である。当該分野の先導的研究者である研究総括には、実用化を念頭に置きつつも、応用面よりむしろ新学術創成のために必要な革新的な反応場や実用に耐えうる革新的触媒の発見に尽力し、次世代の有機反応化学の目指すべき方向や研究分野を提示するとともに、周辺研究分野を積極的に牽引してほしい、という評価委員からの共通の認識があったことを付言する。

1.　研究成果の発展状況や活用状況

本プロジェクトは、終了後もその成果を基盤として科研費基盤研究(A)2009 年度、科研費基盤研究(S)2009～2014 年度、科研費挑戦的萌芽研究 2013～2014 年度、NEDO の「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」2008～2012 年度、ACT-C 2012～2017 年度などに引き継がれ、基礎・応用の両面から展開が図られている。これらの発展的な継続は本プロジェクトの成果の波及効果の大きさを示している。

具体的な進展として、本プロジェクト終了後、「水反応場」においては応用展開として産業排水中の酢酸回収法を挙げることができる。この方法は先に述べた NEDO でさらに発展され、現在企業において実用化に向けた検討が進められている。また本プロジェクトで開発したキラルスカンジウム触媒を進展させるとともに、ユビキタス元素化合物を用いた分子触媒反応への展開も進めており、新たに高性能なキラル亜鉛触媒、キラル銅触媒、キラル鉄触媒など多数の有用触媒を生み出している。特に、水溶媒中でのチオール類の不斉マイケル付加反応に有効なキラルスカンジウム触媒は、有機溶媒とは異なる優れた特性を発揮すること、またキラル銅触媒がホウ素の不斉共役反応において水溶媒中で最高の触媒回転頻度を示すことなど、水を反応場とする新しい有機合

成化学が展開されている。

さらに、「固定化触媒」と「機能性物質」においても、本プロジェクトの成果を着実に発展させている。

「固定化触媒」では、本プロジェクトで確立した高分子カルセランド型触媒の技術を応用展開し、各種金属錯体やナノクラスター触媒、複合金属触媒の固定化により、新たな触媒機能の発現ならびに高活性触媒の開発に成功し、これら新固定化触媒による多段階変換反応の研究開発で顕著な成果を挙げている。実際、固定化触媒を用いる連続フローシステムを構築して、例えば、ポリシラン担持パラジウム触媒による長鎖飽和脂肪酸(化粧品原料)の実用化プラントを用いた生産に繋げている。

「機能性物質」では、不斉塩基触媒の機能開拓の一環として、金属アミド触媒の開発やユビキタス金属であるカルシウムを中心金属とする新たな不斉塩基触媒の開発など、本プロジェクトの目標である「グリーン・サステイナブルケミストリー」を指向した研究へと展開がなされている。

2. 研究成果から生み出された科学技術的、社会的及び経済的な効果・効用及び波及効果

2.1 科学技術の進歩への貢献

本プロジェクトに関係する発表論文は、プロジェクト期間中 127 報、終了後 114 報、合計 241 報を数える。多くの論文が、J. Am. Chem. Soc.や Angew. Chem. Int. Ed.などに掲載され、またこれらの論文は被引用件数の総数が 6,500 件(9 報については被引用件数が≧100) を超えている。これらの事実は研究が世界のトップレベルにあり波及効果も大きいことを示している。また研究総括のこれまでの独創的な学術分野の開拓と多くの新発見など卓越した研究業績が認められ、世界的に著名なフンボルト賞をはじめグリーン・サステイナブルケミストリー賞、文部科学大臣賞などの優れた賞を受賞している。

具体的な成果として、「水反応場」において本プロジェクト期間中の「水溶剤でも有機溶剤と同等の反応が進行する」をプロジェクト終了後に「水溶媒の方が有機溶媒より反応成績が秀逸である」だけでなく「水溶媒が発現する類例のない反応性の開発」という水準にまで高め、水溶媒の新学術領域を開拓しつつある。一方、固定化触媒である高分子カルセランド型触媒を創出し、実用レベルに資する高活性ナノクラスター触媒として結実させた。

以上、反応媒体、基質および触媒を原子・分子レベルで精緻に設計構築された反応場を用いる分子変換の化学は、本プロジェクト名である「小林高機能性反応場」を体現するような新規性の高い学術的成果であり、次世代の化学を形成しつつあるものと高く評価できる。

2.2 応用に向けての発展

本プロジェクトの目標である「グリーン・サステイナブルケミストリー」の実現に向けた取り組みは、着実に成果を挙げつつある。実際、これまでに特許 149 件が出願され、そのうち 104 件が登録されており、技術としての新規性、進歩性が極めて高いことを示している。具体的には、ポリシラン担持パラジウム触媒による水素化反応では、触媒回転数が 5 万回を超える耐久性を示し、また金ナノクラスター触媒による常温常圧のアルコールの空気酸化反応など、生体における酵素反応と同様の温和な反応条件を実現化することに成功している。ポリシラン担持パラジウム触媒による水素化反応の研究成果は、NEDO に引き継がれ、アルミナを加えることにより高い実用性能が発揮されることが見いだされており、不飽和脂肪酸の水素添加反応の実用化プラントによ

る長鎖飽和脂肪酸の生産が企業において始まっている。これら一連の研究成果は、産業への応用の可能性を示しており、評価できる。

しかしながら、すべての評価委員は、科学技術の実用化を目指すことも重要であるが、先導的研究能力に優れた研究総括には、むしろ科学技術の発展に資する科学の源流の発見およびその展開によりいっそう傾注してほしいものと期待する。

2.3　参加研究者の活動状況

本プロジェクトで活躍していた学生や研究員は、現在、国内では他大学で教授に 1 人、准教授に 3 人、助教(特任助教も含む)に 5 人が昇進している。また海外でも、9 人が講師から教授の職に就いている。このようなその後の参加研究者の活躍は、本プロジェクトの意識の強さ、高さの反映であると考えられる。

本プロジェクトには研究総括を除いて総数で 48 名の研究者が参画し、そのうち 19 名は外国人研究者(うち約半数が欧米研究者)であった。このメンバー構成からグローバルな環境で研究・議論が進められたと思われ、グローバルな研究経験をもつ人材育成にも本プロジェクトは寄与したと判断される。

3.　その他

研究総括と JST への期待とお願いを付記する。

1)研究総括への期待とお願い

「不均一系における反応場」の理論解析を含め反応機構を解明することは、高収率かつ高選択性の反応を実現するために、今後ともに重要な課題である。特に、「ものづくりの化学技術の創成」において必須の要件である。しかし、不均一系触媒の活性点は通常極微量であり、また固体状態にある活性種の原子あるいは分子レベルでの解析手法も限られている。研究総括は、これまで既に多くの発見や蓄積育成した強固な学術基盤を確立しており、さらに様々な英知をもつ研究者との強い連携体制を保有している。研究総括には、これまでの研究成果、連携体制を活用して「精密設計された不均一系反応場の創成」をめざして新学術創成プロジェクトの立ち上げを期待したい。

2)JST への期待とお願い

本プロジェクトでこれまでに多くの新事象が発見されている。これらの研究成果を将来新事業創出に繋げるためには、それらの技術としての可能性、経済的・社会的波及効果の大きさを的確に評価して応用展開へと進める必要がある。その際、産業界から見ても魅力のある研究成果を抽出して、産学連携へと展開するために技術的評価システムが必要となる。JST が中心となり、この評価システム構築の可能性検討をお願いしたい。

以上