

## 先導的物質変換領域 (ACT-C) 研究領域事後評価報告書

### 総合所見

本研究領域は、戦略目標「環境、エネルギー、創薬等の課題対応に向けた触媒による先導的な物質変換技術の創出」のもと、環境・エネルギー・創薬などの解決すべき社会的課題を視野に入れ、触媒による革新的な物質変換の学術・技術を確立し、グリーンイノベーション、ライフイノベーションの創出に貢献する成果を上げることを目指した。具体的な達成目標として、以下の3テーマが設定された。

- (1) 二酸化炭素還元法の創出
- (2) 不斉炭素-炭素結合等の直截的生成法の開拓
- (3)  $\pi$ 電子系分子の化学合成と新機能創成

物質変換の科学技術は極めて広範な領域に亘るが、(1)では、二酸化炭素からのメタノール合成等、脱石油依存型社会を目指すための技術として社会的・経済的ニーズが高く、我が国の強みである革新的な触媒反応が実現の鍵を握ると考えられること、(2)では、我が国が世界的に優位性を持っており、日本発のグローバルスタンダードになる可能性があり、欧米からの追従を許さないで継続的に集中的に取り組む必要があること、(3)では、均質かつ精密に分子構造を制御された $\pi$ 電子系分子の化学合成法は、世界的に期待される新規光・電子特性を持つ有機半導体分野の重要技術であり、我が国産業の今後の発展に大きく貢献しうることから、上記3つの達成目標に絞ったことは適切であった。「触媒」に関する基礎研究は我が国が得意とする学術分野であり、また、触媒は化学工業にとって鍵となるコア技術である。

研究課題は198件の応募から50件が採択された。採択課題は我が国の一流の研究者で組織されており、若い研究者から研究経験豊富な著名研究者まで幅広い人選がなされた。研究費の配分額も4千万円から3億円と幅が広く、比較的少額の研究費が配分された課題の多くは若手研究者で、当該分野の将来を担う人材を育成するための方策と理解できる。また、本研究領域の初期段階で、若い研究者の提案をフィージビリティスタディ (FS) として6件採択し、その後の研究展開が優れている3件を本採用としたのは若手研究者に配慮した斬新で優れた試みであった。

研究マネジメントの特徴の一つは、各研究課題に対する評価・相談が可能な優れた領域アドバイザーが配置されていることである。研究総括と領域アドバイザーが各課題の進捗状況を絶えずチェックし、計画達成の水準に達しない課題に対して適宜アドバイスをし、時には早期終了を含む強い指導がなされたことは非常に高く評価できる。

本研究領域では、物質変換・創製研究のバーチャルラボ (仮想研究所) となることが謳われている。研究総括のリーダーシップのもと、このバーチャルラボ的研究組織が有効に機能して多くの重要な成果が生まれた。化学研究の分野では、各研究者の職人的な研究能

力を最大限に引き出すためには、大きな研究所で共同研究する方法とは別に、各所属大学・研究機関等で独自に研究を展開しつつ、その成果を統合するバーチャル研究所の仕組みが有効であることが実証された。

物質変換技術の創出と新展開をめざして、多くの卓越した研究者が参加していることもあり、全体として学術的に高水準の成果が得られている。学術論文誌への投稿や国際会議での発表も数多くあり、本研究領域の成果が国際的に大きなインパクトを与えている。とりわけ、若手研究者の顕著な活躍が見られる。全体として、精密な構造と機能を持つ優れた新規触媒を次々に開発した触媒設計能力と合成力は高く評価できる。また、椿、小林、山本らの研究成果に代表されるように、イノベーション創出の基礎や芽となる重要な成果が着実に上がっており、関連する幾つかの重要技術が特許申請されたことは特筆される。これら優れた成果がさらに発展して実用化され、我が国のイノベーションに貢献することが大いに期待できる。今後、本分野の学術研究およびイノベーションにおいて真のブレイクスルーが生まれるよう、各研究者のさらなる奮闘を期待したい。

世界のトップレベルの技術力とイノベーション力を維持するためには、先導的でユニークな研究活動を持続・発展させ、大学からは基礎研究を担う優れた研究者を輩出することが我が国の将来にとって必要不可欠である。その観点から、本研究領域の「先導的物質変換領域」は、社会の要請に応えるものである。我が国の触媒科学のレベルの高さを鑑みると、本研究領域の設定は時宜を得たもので、研究成果が十分期待される目標設定がなされた。大きな研究費が投じられ、活発な触媒研究が中期的（5年間）に実施され、その結果として多くの優れた学術的成果を上げたことは極めて高く評価される。

以上を総括し、本研究領域は総合的に特に優れていると評価できる。

## 1. 研究領域としての成果について

### (1) 研究領域としての研究マネジメントの状況

<研究総括のねらい>

低炭素社会の実現や医薬品および機能材料の持続的生産など、持続的社会を達成するためには、我が国だけでなく世界が直面している諸問題、特に環境、エネルギー、創薬等の困難な課題を解決しなければならない。本研究領域は、触媒による先導的な物質変換技術によって、グリーンイノベーションやライフイノベーションの創出に寄与すべく立案され、具体的な達成目標として、①二酸化炭素還元法の創出、②不斉合成法の開発、③ $\pi$ 電子系分子の創製の3つが設定された。これらの目標の達成には、共通して高性能触媒の開発が成功の鍵を握っているが、触媒研究の分野で我が国は世界を牽引しており、卓越した学術成果だけでなく、工業化に成功した反応例も数多い。我が国の触媒科学のレベルの高さを鑑みると、本研究領域の設定は時宜を得たもので、研究成果が十分期待される目標設定がなされた。触媒化学の重要性と社会からの高まる期待を考慮すると、この分野の重点化を図って新たなイノベーション創出につなげる大きな基盤が構築された。

#### <研究課題の選考>

研究課題は 198 件の応募から書類選考で 78 件が選ばれ、さらに面接選考を経て 50 件が採択された。採択課題は我が国の一流の研究者で組織されており、若い研究者から研究経験が豊富な著名研究者まで幅広いスペクトルを持った人選がなされた。研究費の配分額も、新しく 3 段階方式が導入され、選択の幅が広く、比較的少額の研究費が配分された課題の多くは若手研究者で、当該分野の将来を担う人材の育成策として機能した。また、本研究領域の初期段階で、若い研究者の提案を FS として 6 件採択し、その後の展開が優れている 3 件を本採用とした。

採択された選りすぐりの研究課題および研究者は我が国を代表するもので、その選考は非常に的確であったと判断できる。さらに、各課題の進捗状況を絶えずチェックし、計画達成の水準に達しない課題に対して適宜アドバイスを与え、時には研究課題を早期に終了させる強い指導も行われたことは、研究総括のマネジメントとして非常に重責を担った。

#### <領域アドバイザーの構成>

各研究分野や各研究課題に対する的確な評価ができ、研究総括が相談できる優れた領域アドバイザーが配置されている。彼らは各々の研究分野でトップレベルの研究実績を有しており、その構成および人選は非常に適切である。科学技術イノベーションそのものを実践するためと言うよりも、イノベーションに「貢献」する基礎的成果を促すアドバイザーとして申し分ない構成であり、領域アドバイザーが各々の担当する研究課題の内容を把握してそれぞれの専門分野で適切なアドバイスを行い、研究総括を十分に補佐している。さらに、本研究領域の終盤で研究成果のアウトプットの応用展開を図るべく、企業有識者を研究推進委員として追加選定したことは実にタイムリーで高く評価できる。

#### <研究領域のマネジメント>

本研究領域の研究マネジメントの特徴の一つは、各研究課題に対する評価・相談が可能な優れた領域アドバイザーが配置されていることであり、各々の研究課題の内容を十分に精査し、適切なアドバイスを行うことで、研究推進に大きく貢献している。研究総括は物質変換技術に高い見識を有し、領域アドバイザーと協力して各研究課題の研究進捗状況を的確に把握して、場合によっては厳しく査定するなど、多才な研究者・多様な研究課題から構成される本プロジェクトでリーダーシップを見事に発揮した。

本研究事業は物質変換・創製研究のバーチャルラボ（仮想研究所）となることが謳われている。この分野の化学研究では、個々の研究者の職人的な合成展開力に依存することが多い。各研究者が能力を最大限に引き出すためには、大きな研究所で共同して研究を行う方法とは別に、各所属大学や研究機関等で独自に研究を展開しつつ、その成果を持ち寄りお互いに切磋琢磨して、学術領域の異なる研究者の独自の成果を統合する場を提供するバーチャル研究所の仕組みが有効である。本研究領域では研究総括のリーダーシップのもと、バーチャルラボ的研究組織が機能して多くの重要な成果が生まれた。

以上により、本研究領域の研究マネジメントは特に優れていたと評価できる。

## (2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

### ①研究成果の科学技術への貢献

先導的な物質変換技術の創出と新展開をめざす壮大な研究プロジェクトであり、選りすぐりの研究者が参加していることもあり、全体として学術的に非常に高水準の成果が得られていると判断する。学術論文誌への投稿や国際会議での発表も数多くあり、また研究水準も大変高い。本研究領域の成果が、国際的に大きなインパクトを与えつつあることが伺える。特に、若手研究者の活躍が顕著であることに勇気づけられる。精密な構造を有する優れた新規触媒を次々に開発した触媒設計能力と合成力はとて高く評価できる。課題中間評価の時に比べ、領域アドバイザーによる各研究の課題事後評価の評点が全体的に改善されていることも、本研究領域が順調に進展した証であろう。研究総括と領域アドバイザーによる研究内容の積極的な指導が功を奏したものとも言える。

本研究領域では、科学技術の発展に貢献する多様な優れた成果が上がっている。ここでは幾つかの特筆すべき基礎研究成果を取り上げ、その概略のみを示す。

- (i) メソポーラス有機シリカの特異なナノ空間構造を利用した高活性錯体触媒の構築、および犠牲試薬を必要としない光触媒系の構築 (稲垣伸二ら)
- (ii)  $\pi$  共役系高分子の簡便かつ精密な重合法を可能にする直接的アリアル化反応の高性能触媒の開発 (小澤文幸)
- (iii) 通常困難であるカルボン酸の直接水素化によるアルコールへの変換を可能にする新規触媒の開拓 (斎藤進)
- (iv) ルイス酸/ブレンステッド塩基協奏触媒系の新規触媒開拓による、廃棄物を副生しない光学活性医薬品の生産法確立 (柴崎正勝)
- (v) 遷移金属触媒によるアセチレン部位の分子内/分子間環化三量化を基本概念とする不斉芳香環合成法の確立 (田中健)
- (vi) 光機能性材料や有機半導体材料として展開が期待される非平面二次元大環状  $\pi$  電子系の新規合成 (深澤愛子)
- (vii) 不斉炭素-炭素結合形成を行うワンポット多連続不斉アルドール反応を可能にする新規触媒系の創製 (松永茂樹ら)
- (viii) Ru 錯体/炭素多孔体/Si-Ge 接合型半導体/IrO<sub>3</sub> からなる新規ハイブリッド型光触媒を開発し、水溶液中での二酸化炭素還元によるギ酸生成で太陽光変換効率 4.6%を達成 (森川健志)

上記の優れた研究成果を踏まえて、目標毎に今後への更なる展望を記す。

(1) 「二酸化炭素還元法の創出」においては、二酸化炭素を生成しないエネルギー供給も含めて、全体のエネルギー収支・物質収支の検討が進展していくであろう。

(2) 「不斉炭素-炭素結合等の直截的生成法の開拓」においては、新規医薬品開拓か安価な製造法開発なのか、明確な目標設定の下、進展していくであろう。

(3) 「 $\pi$ 電子系分子の化学合成と新機能創成」においては、新規機能性  $\pi$ 電子系材料を探求する物性研究と実用化研究の双方が最近盛んになりつつあることから、工業化を視野に、目指すべき到達目標となる指標を明示する形で、研究が一層推進されていくであろう。

本研究領域で担う物質変換の科学技術は、その究極的な目標は非常に高いレベルにあり、上記の通り将来に託された課題もあるが、この ACT-C 研究領域での研究実績を通して、幾つもの新しい技術の扉が拓かれたことは非常に意義深い。

以上により、研究成果の科学技術への貢献については、特に高い水準にあると評価できる。

## ② 研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献

本研究領域の研究によって、イノベーション創出の基礎や芽となる重要な成果が上がっている。ただし、イノベーション創出に重要と考えられる特許出願が少なく、国内特許でも 102 件、国際特許では 13 件である。53 の研究テーマのうち 24 テーマは特許出願がなされていない。多くの優れた学術的成果が上がっている割には特許出願数が少ないことは中間評価でも指摘されていたが、その後若干ながら出願数が増加したことは一応評価できるが、有用な新規機能物質の使用権利を獲得する物質特許への出願数はもう少しあってもよい。一方、歴大な国内特許出願数に比べて真に「知的財産権」と見なせる優れた特許の数は一般に極めて限られている。そのような観点から、本研究領域で、以下の 3 件のインパクトのある技術が特許申請や次なる重要プロジェクトに継承されたことは特筆される。これら優れた成果がさらに発展して実用化され、我が国のイノベーションに貢献することが大いに期待される。

(i) 合成ガスと炭酸ガスから低温でメタノールを合成する新規固体触媒を開発した。さらに外部熱不要な自己改質方式で二酸化炭素とメタンと酸素（あるいは空気）から合成ガス(CO+H<sub>2</sub>)の高速合成法を確立すると同時に、この合成ガスから一段階で 70%と高選択的にエタノールを合成することに世界に先駆けて成功した。2017 年に特許出願。JST 未来社会創造事業：探索加速型重点公募テーマに採択され、技術継承がなされている。(椿範立)

(ii) 「フロー精密合成」という有機合成化学では新しい概念を確立し、医薬品の有効成分を高効率に合成できることを、抗炎症剤(R)-ロリプラムの多段階不斉全合成を通じて実証した。精密合成化学の基盤技術として更なる発展が期待され、化学・製薬産業の国際的競争力強化、周辺産業の活性化につながるものと期待される。2016 年に特許出願。JST の ACCEL フィージビリティスタディ (FS) 研究開発課題に採択されると共に、NEDO エネルギー・環境新技術先導プログラムや AMED 創薬基盤推進研究事業に採択されたほか、現在、企業との共同研究も行われている。(小林修ら)

(iii) 独自に開発したタンタル触媒を利用し、ヒドロキシ基含有エステルとアミンとのアミド化反応がヒドロキシ基を有する基質選択的に進行する画期的な触媒反応を開発した。この世界初の化学反応を環状ペプチドの簡便合成に適用することにより、ペプチド医薬品

の新たな創製が期待される。本研究は、JST 研究成果展開事業（A-STEP）ステージⅡ（シーズ育成タイプ）に採択され、技術発展をしている。（山本尚ら）

以上により、研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献については、高い水準にあると評価できる。

## 2. 研究領域の活動・成果を踏まえた今後の展開等についての提言

我が国の文明社会および産業の将来を担うのは科学技術力であり、その基盤となる新規の機能性物質を創製する研究の発展が必要不可欠であることは言を待たない。とりわけ、天然資源の乏しい我が国の将来にとって、限られた資源を有効利用して高付加価値の新機能性材料や医薬品の創製に向けた知識集約型科学技術の確立と関連産業の育成が極めて重要である。その意味で、革新的物質の変換方法の確立をめざす本研究領域は時宜を得たものであった。

触媒科学分野の研究は、近年、アジア諸国の若手が着実に力をつけてきており、日本や欧米との実力差は年々縮小している。今後も我が国が触媒科学の研究を国際的に先導するためには、個々の研究者(特に若手研究者)の能力を伸ばすとともに、分野横断的な共同研究を推進して新たな研究領域を生み出すなど、我が国の触媒科学の独創性に磨きをかける努力が求められる。本研究分野の展開研究が引き続がれ、強力に推進されるためには、事業化（イノベーション）への研究者のマインドを高める仕組みも必要であろう。

産業化・実用化による研究成果の社会還元を目指す過程を学術研究者自身が考案することも必要であるが、一方で、得られた基礎研究成果を産業界の開発研究者や経営者の目に触れる機会を増やし、関心を喚起するシステムを構築することも重要である。イノベーション創出は、基礎研究の成果の情報をもとに産業界が責任を持って取り組むべきであると考え、それに資する広報活動も関係機関がより一層積極的に取り組んでほしい。