

戰略的創造研究推進事業
先導的物質變換領域(ACT-C)

研究領域事後評估用資料

研究總括：國武 豊喜

2018 年 2 月

目 次

1. 研究領域の概要	1
(1) 戦略目標	1
(2) 研究領域	3
(3) 研究総括	4
(4) 研究総括補佐	4
(5) 採択研究課題・研究費(2012年度採択)	5
2. 研究領域および研究総括の設定について	9
3. 研究総括のねらい	11
4. 研究課題の選考について	12
5. 領域アドバイザー、研究推進委員について	13
6. 研究領域の運営について	16
7. 研究を実施した結果と所見	35
8. 総合所見	70

1. 研究領域の概要

(1) 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」

① 具体的な達成目標

上記戦略目標の下、以下の3つの達成目標を掲げた。

○有用物質への変換・活用のための二酸化炭素還元法の創出

○高収率、高効率、高選択、経済的、安全に不斉炭素-炭素結合等を直截的に生成する触媒の物質変換技術の創出

○ π 電子系分子の化学合成及びデバイスにつながる新機能創成手法の創出

上記の目標達成に向けた研究を戦略的に推進するべく、触媒反応機構の解明のための原子・分子構造や電子状態の解析及び計算化学等による理論の構築も一体的に行う。

② 目標設定の背景および社会経済上の要請

「第4期科学技術基本計画」(平成23年8月19日閣議決定)では、「我が国が直面する重要課題への対応」の一つとして、「領域横断的な科学技術の強化」が掲げられ、「先端計測及び解析技術等の発展につながるナノテクノロジーや光・量子科学技術、シミュレーションやe-サイエンス等の高度情報通信技術、数理科学、システム科学技術など、複数領域に横断的に活用することが可能な科学技術や融合領域の科学技術に関する研究開発を推進する」ことが明記されている。本戦略目標は、幅広い分野に貢献しうる革新的な物質変換のための研究の推進を行うものであり、これに対応するものである。また、「グリーンイノベーションの推進」のための重要課題の一つである「エネルギー利用の高効率化及びスマート化」のための「グリーンサステナブルケミストリー」や「革新的触媒技術」等の研究開発に対応するものであるとともに、「ライフイノベーションの推進」のための重要課題の一つである「安全で有効性の高い治療の実現」を支える、複雑な構造を有する医薬品等の工業的合成等の実現に貢献しうるものである。

また、「ナノテクノロジー・材料科学技術の研究開発方策(中間取りまとめ)」(平成23年7月科学技術学術審議会研究計画・評価分科会ナノテクノロジー・材料科学技術委員会)においても、「触媒は、排ガス浄化や自浄性(セルフクリーニング機能)、廃棄物処理といった環境技術としての重要性と、物質生産プロセスにおける重要性の両方を併せ持つ。特に物質生産過程では、ナノ構造制御や化学反応制御による、選択性の高い触媒の開発が重要であり、反応温度の低下や副生成物及び共生生成物の生成減少によって、反応や精製にかかるエネルギー消費や環境負荷を低減できる画期的な触媒の開発によって、物質生産過程に革新をもたらすことが求められている」ことから、「画期的な触媒材料」が重点研究開発課題に挙げられている。

触媒科学は、我が国の研究者が、世界の有機合成化学に大きな変革をもたらす反応経路

を数多く開発するなど、世界を牽引してきた分野であり、我が国は非常に高いポテンシャルを有している。すでに実用化につながり、我が国の産業競争力を支えてきた触媒反応は数多くあり、低コスト、低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりを実現する上で、さらなる新規触媒材料、プロセスを求める産業界のニーズは高い。達成目標として掲げた3つの目標については、以下のとおり、本戦略目標下での集中的な取り組みが必要なものである。

二酸化炭素の有用物質への変換については、「豊かで活力ある国民生活を目指して～経団連 成長戦略 2010～」(2010年4月、(社)日本経済団体連合会)におけるグリーンイノベーションに向けた重要技術として、二酸化炭素からのメタノール合成があげられるなど、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、かつ、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テーマである。

選択的な不斉炭素-炭素結合生成等については、医薬品や液晶等の分野において重要な要素技術だが、工業ラインとして稼働している例は少なく、産業界のニーズにあった新概念、新技術による発展が望まれる。この分野の研究は我が国が世界的に優位性を持っており、日本発の手法がグローバルスタンダードになり得る可能性がある。欧米の網羅的研究で優位性を奪われることの無いよう、集中的に取り組むことが必要である。

π 電子系分子の化学合成と新機能創成については、優れた光・電子特性を持つ新規材料になりうるものとして世界的に期待されているところである。化学合成により、均質かつ精密に分子構造を制御された π 電子系分子を合成するための手法は、発展が見込まれる有機半導体分野の重要技術となり得ることから、日本発の技術の創出は、我が国産業の今後の発展に大きく貢献しうる。

③目標設定の科学的な裏付け

本戦略目標が目指す革新的触媒反応による先導的物質変換に関する我が国の研究水準については、「ナノテクノロジー・材料分野 科学技術・研究開発の国際比較 2011年版」(科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター)において、「ナノ触媒材料および分子・原子レベルでの触媒材料開発は日本のお家芸ともいえる研究テーマであり、この分野での日本の研究水準は高いといえる。触媒開発のみならず、2010年度の根岸教授、鈴木教授のノーベル化学賞受賞からもわかるように、特に有機合成(基礎化成品を含む)に関する反応開発の研究水準は極めて高い」とされている。

我が国は、二酸化炭素の光還元で世界を主導する成果を輩出しているほか、不斉炭素-炭素結合に関する研究については、世界の研究者と比較し、卓越した研究レベルを維持しており、新概念に基づく物質変換に関する研究成果を数多く発信している。さらに、電子材料等への応用に関する研究開発については、欧米では既存化合物の改良研究が中心であることに対し、我が国では独自の発想のもと、有用な物性を示す化合物を新規に合成する独創性の高い研究が行われており、我が国に強みのある分野である。

最近では、複数の金属の組み合わせで、従来型の単金属では達成し得ない触媒活性の獲

得に成功した例が多く報告されており、今後は、計算化学等による理論的裏付けを踏まえた効率的な触媒探索が求められている。

近年、中国が、関連分野の論文発表数で日本を追い抜くなど、急速な追い上げをみせており、本分野の日本のプレゼンスを継続的に維持し、産業競争力を支えていくためには、早急な体制構築が必要である。

④将来実現しうる重要課題の達成ビジョン

本戦略目標下において研究成果を得ることにより、

- ・脱化石資源に向け、二酸化炭素を原料にして、一酸化炭素(CO)、メタノール(CH₃OH)、エチレン(C₂H₄)といった非常に汎用性の高い、C1、C2、C3 化合物への変換
- ・複雑な構造を持つ医薬品等の工業的な合成を可能とする不斉炭素-炭素結合反応
- ・高効率な合成・官能基導入等による、C1、C2、C3 化合物からの高性能有機材料の創出の実現を目指す。

本事業で創出された革新的な成果を研究段階に応じて、JST が行う産学連携施策、経済産業省の事業、民間企業との共同研究等の実用化を目指した研究につなげることにより、以下のような我が国の重要課題の達成に貢献することを目指す。

【グリーンイノベーションの実現への貢献】

石油消費の最終廃棄物である二酸化炭素の再利用による C1 化合物等の製造の実現、新規触媒反応を用いた環境負荷の低い基礎化成品の製造プロセスの実現、次世代の機能材料として有力であり、世界的に市場規模の大きな有機 EL や有機太陽電池等のデファクトスタンダードの掌握等を通じ、第4期科学技術基本計画に掲げられているグリーンイノベーションの目標実現に向けた重要課題「エネルギー利用の高効率化及びスマート化」に貢献する。

【ライフイノベーションの実現への貢献】

不斉炭素-炭素結合反応など複雑な構造を自在に合成するための基盤技術を用いて、これまで合成が困難であった各種医薬品等の工業レベルでの合成の実現等を通じ、第4期科学技術基本計画に掲げられているライフイノベーションの目標実現に向けた重要課題「安全で有効性の高い治療の実現」等に貢献する。

(2) 研究領域

「低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出」(Advanced Catalytic Transformation program for Carbon utilization :ACT-C) (2012年度発足)

本研究領域では、低炭素社会の実現や、医薬品・機能性材料等の持続的かつ発展的な生産など、我が国のみならず世界が直面している諸課題の解決に貢献しうる、触媒による先導的な物質変換技術の創出を目指す。

具体的には、脱化石資源へ向けて、二酸化炭素を還元し有用な C1、C2、C3 化合物へ効率的に変換する反応のような、安定小分子を資源として活用する反応の研究、工業的な利用につながる不斉炭素-炭素結合生成等の反応の研究、革新的な結合形成、開裂および組み換えにより優れた特性や機能を有する π 電子系分子を創出する研究、 π 電子系分子に官能基導入を行う等による新機能を創成する研究などを対象とする。

本研究領域では安全な、高原子効率、高収率、高選択性の分子変換法を創出することを目指し、化学、物理、数理、工学等の分野の垣根を越えて挑戦的な分野融合的研究を推進する。また、革新的触媒設計のための計測分析及び理論化学に関する研究との連携も促進する。

(3) 研究総括

國武 豊喜 (九州大学高等研究院 特別主幹教授)

(4) 研究総括補佐

根岸 英一 (パデュー大学 特別教授)

(5) 採択研究課題・研究費(2012年度採択)

(百万円)

研究代表者	研究終了時の 所属・役職	研究課題	研究費* ¹
稲垣 伸二	株式会社豊田中央研 究所・室長、シニアフ ェロー	メソポーラス有機シリカを利用した 生体模倣触媒に関する研究	88
犬丸 啓	広島大学・教授	ナノメートルレベルで設計された複 合構造による二酸化炭素の触媒的・ 光触媒的の化学変換	43
岩澤 伸治	東京工業大学・教授	機能性遷移金属錯体の創製に基づく エチレン及びアセチレンと二酸化炭 素からのアクリル酸合成法の開拓	75
梅田 実	長岡技術科学大学・教 授	固体高分子形燃料電池カソード反応 を用いる CO ₂ からのアルコール合成	70
横野 照尚	九州工業大学・教授	CO ₂ の資源化を実現するナノ構造を 制御した光触媒電極の構築	202
生越 専介	大阪大学・教授	ニッケラサイクルを鍵中間体とする 不斉環化付加反応の開発	75
小澤 文幸	京都大学・教授	π 共役系高分子の高効率合成のため の高性能直接的アリール化触媒の開 発	40
垣内 史敏	慶應義塾大学・教授	不活性炭素結合を利用する n 型有機 半導体材料の革新的合成法の創出と 有機電界効果トランジスタ作製への 展開	75
香月 昂* ²	九州大学・教授	カルベン錯体を用いる炭素-水素結 合から炭素-炭素結合への不斉自在 変換	47
川口 博之	東京工業大学・教授	無機金属クラスター錯体の反応化学 を機軸とした安定小分子の物質変換	45
北川 進	京都大学・教授	多孔性配位高分子を反応場に用いた メタノール合成の開発	210
北村 雅人	名古屋大学・教授	カルボニル化合物の触媒的不斉 α 炭 素アリル化の脱塩型から脱水型プロ セスへの転換と高性能化	75

久新 莊一郎	群馬大学・教授	シリル置換芳香族化合物の機能と物性	40
倉橋 拓也	京都大学・准教授	電子構造の揺らぎに基づく機能性触媒の創製	44
桑野 良一*2	九州大学・教授	触媒的環化付加による縮合多環芳香族化合物のホモロゲーション合成	29
小林 修	東京大学・教授	独自の基礎科学に基づく革新的不斉炭素-炭素結合生成反応の創成と展開	270
近藤 美欧	分子科学研究所・助教	超分子クラスター触媒による水を電子源とした CO ₂ 還元反応系の構築	40
櫻井 英博	大阪大学・教授	多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応	51
斎藤 進	名古屋大学・教授	分子触媒と固体触媒のクロスオーバー領域の精密化に基づく二酸化炭素の資源化法の開拓	42
笹井 宏明	大阪大学・教授	触媒的不斉ドミノ反応を基盤とする実用的分子変換	45
佐藤 哲也	大阪大学・准教授	環境に優しい低エミッション型脱水素クロスカップリング反応の開発	43
佐藤 美洋	北海道大学・教授	ニッケル錯体によるアルケンと CO ₂ からのアクリル酸誘導体の直接的合成法の開発と新規ナノ粒子ニッケル錯体の創製と応用	45
澤村 正也	北海道大学・教授	量子シミュレーションに基づく不斉C-H活性化触媒の開発	195
柴崎 正勝	公益財団法人微生物化学研究会 微生物化学研究所・所長	先進的・実践的協奏機能型不斉触媒の開発と医薬合成の刷新	270
柴田 高範	早稲田大学・教授	触媒的不斉反応を駆使した精密制御によるキラル π 空間の創製と評価	47
高田 十志和	東京工業大学・教授	インターロック触媒を用いる高選択的高効率物質変換	75
田中 健	東京工業大学・教授	不斉炭素-炭素結合生成反応による触媒的環構築の高度化と応用	63
茶谷 直人	大阪大学・教授	革新的低環境負荷型分子変換反応め	75

		ざした新規方法論の創成	
椿 範立	富山大学・教授	二酸化炭素からの新しい C1 化学プロセスの創成	82
中村 潤児	筑波大学・教授	二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール室温合成触媒の創成	280
成田 吉徳	中部大学・教授	分子触媒と固体表面科学の融合による人工光合成システムの創製	239
西原 康師	岡山大学・教授	電子エネルギー素子を目指した触媒が先導するフェナセン型 π 電子系有機分子の創製	213
野村 琴広	首都大学東京・教授	定量的な炭素-炭素結合形成・集積化を基盤とする新規な星型巨大 π 共役有機分子の精密合成と光機能材料への展開	75
羽村 季之	関西学院大学・教授	π 共役系分子の自在合成法の開発と機能開拓	45
東林 修平	慶応大学・准教授	遷移金属触媒反応による π 電子系おわん分子合成法の開発	40
姫田 雄一郎	国立研究開発法人産業技術総合研究所・主席研究員	プロトン応答性錯体触媒に基づく二酸化炭素の高効率水素化触媒の開発と人工光合成への展開	79
檜山 爲次郎	中央大学・教授	金属触媒を利用する安定結合の活性化と新規合成変換法の創出	140
平野 雅文	東京農工大学・教授	酸化的カップリング機構の特徴を活かした化学、位置および立体選択的鎖状炭素骨格の構築	44
平尾 俊一	大阪大学・特任教授	低環境負荷型前周期遷移金属レドックスシステム的设计に基づく先導的物質変換テクノロジーの創出	40
深澤 愛子	名古屋大学・准教授	ブタジエンを鍵とする非平面 π 電子系の創製と機能発現	56
藤嶋 昭	東京理科大学・学長	太陽光利用ハイブリッド光触媒による二酸化炭素の高効率還元	75
松永 茂樹	北海道大学・教授	医薬品開発研究を先導する多彩な協同機能触媒系の創製と応用	93
三上 幸一	東京工業大学・教授	フッ素化合物の触媒的不斉炭素-炭	77

		素結合生成技術の開発と工業化	
村井 利昭	岐阜大学・教授	アゾール類をコアとする直交 π 電子系分子群の創製	40
村上 正浩	京都大学・教授	太陽エネルギーを駆動力とする新変換技術の開発	45
森川 健志	株式会社豊田中央研究所・室長、シニアフェロー	太陽光と水で二酸化炭素を資源化する光触媒反応系の開発	102
森 健彦	東京工業大学・教授	セルフコンタクト有機トランジスタの基礎技術	40
山田 陽一	国立研究開発法人理化学研究所・副チームリーダー	次元制御されたナノ空間体と不均一系集積型遷移金属ナノ触媒に融合した先導的 π 電子物質創製触媒システムの創出	82
山本 尚	中部大学・教授	分子性酸触媒の設計	240
依光 英樹	京都大学・教授	窒素埋め込み型縮環 π 電子系分子の合成を指向した触媒的三重縮環反応	52
鳶巣 守	大阪大学・教授	不活性シグマ結合の触媒的変換手法の開発	53
宮内 雅浩	東京工業大学・教授	量子ドットによる二酸化炭素の光還元システムの構築	38
吉田 拡人	広島大学・准教授	アラインによる芳香環融着型反応を利用した新奇 π 電子共役系の創製	38
大村 智通* ³	京都大学・教授	sp^3 炭素-水素結合の触媒的変換と立体特異的クロスカップリングに基づく次世代型不斉炭素-炭素結合形成法の開発	6
中野 環* ³	北海道大学・教授	キラル π 電子系高分子の合成と機能	3
本倉 健* ³	東京工業大学・教授	新規銅錯体触媒による二酸化炭素からの実用的ギ酸合成	6
		総研究費	4742

*¹研究費：2017年度上期までの実績額に2017年度下期以降の計画額を加算した金額（直接経費）

*²香月、桑野の研究課題は2014年度末で早期終了

*³大村、中野、本倉の研究課題は2015年度までFS課題として推進

2. 研究領域および研究総括の設定について

本研究領域は、世界が直面し、今後も重要性がますます増大することが見込まれる、低炭素社会の実現や、医薬品・機能性材料等の持続的かつ発展的な生産などの様々な課題の解決に貢献しうる、触媒による先導的な物質変換技術の創出を目指す。本研究領域においては、二酸化炭素などの安定小分子を、C1、C2、C3 化合物の原料として活用が可能となる効率的な物質変換が可能となる反応を見いだし、不斉炭素-炭素結合生成反応の新展開や実用レベルの不斉触媒プロセスの開発等へ向けて均一系、不均一系触媒等を用いた物質変換を行う反応を構築し、革新的な結合形成、開裂および組み換えにより優れた特性や新機能を有する物質の創出につながる研究を実施する。

また、これらの研究実施にあたっては、これまでの優れた研究成果の発展だけではなく、化学、物理、数理、工学等の分野の垣根を越えた新たな視点を用いた研究も重要となってくる。その中でも反応機構の解明のための計測分析及び計算化学等との連携した研究は、これまでと異なるアプローチをもたらすことが期待できる。本研究領域では、これまで連携の少なかった分野との分野横断的な研究も実施するためにチーム型研究を選定することは適切である。また、研究代表者のチャレンジングな構想を実現する研究や、参加する若手研究者等の次世代の研究リーダーへの育成も期待されるため、個人型研究も選定して推進することも適切である。

以上のとおり、本研究領域は戦略目標達成に向けて適切に設定されている。また、本研究領域の技術分野は日本が世界のトップレベルにある分野であるため、研究者の質、量はともに豊富である。加えて、グリーンイノベーション、ライフイノベーションの実現へ横断的に貢献しうることから、研究者の挑戦意欲と期待は高く、優れた提案が多数出されることが見込まれる。本研究領域の技術分野を包含し、1つの研究領域として研究が推進される機会はこれまで多くなかったため、今回総合的かつ戦略的に推進することで新たなブレークスルーが多く生まれることが期待される。

研究総括の設定理由

國武豊喜氏は、材料化学分野、高分子化学分野で先駆的な研究を実施し、親・疎水性ユニットを持つ分子の自己集合によって形成される脂質二分子膜形成を世界で初めて人工で達成するなどの卓越した研究業績を残してきた。同氏の研究業績は、分子組織化学および超分子化学分野への新たな道を開くとともに、超薄膜の利用等の可能性を広げ、ナノレベルの材料の開発が可能となるなど大きな功績を残している。その功績の大きさは、日本化学会賞、紫綬褒章、文化功労者、瑞宝重光章をはじめとする多数の賞を受賞していることから明らかであり、革新的な技術の創出を目指す本研究領域を推進するに必要な先見性、洞察力を有していると見られる。

また、内閣府総合科学技術会議評価専門委員、日本化学会副会長、高分子学会副会長等を務めており、関連分野の研究者から信頼され、適切な評価と公平な選考を行うと見

られる。さらに、理化学研究所 フロンティア研究システム グループディレクター、北九州市立大学副学長、株式会社ナノ膜ブレンド取締役、財団法人 北九州産業学術推進機構 理事長などの要職を歴任しており、適切な研究マネジメント、組織運営ができる豊富な経験と能力を有していると考えられる。

以上を総合すると、本研究領域の研究総括として、適切かつ効果的な領域運営がなされることが期待でき、適任であると判断される。

3. 研究総括のねらい

我が国の科学技術政策においては、国が取り組むべき喫緊の重要課題である、気候変動への対応と低炭素社会の実現、高齢化の問題への対応等に向け、グリーンイノベーション及びライフイノベーションの実現等に向けた取り組みが求められている。このような取り組みを効果的、効率的に推進していくためには、幅広い研究分野に横断的に活用できる新技術の創出が必要である。

このような状況下において触媒科学は、これまでも創薬や材料合成など幅広い研究分野と産業を支えてきたが、「低コスト、低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくり」という産業の理想像を実現するために、今後ますます重要性が高まることが期待されている。歴史的に振り返ってみると、触媒研究の分野は日本が世界を牽引してきた分野であり、高い学術的な成果のみならず、数多くの反応手法が多様な製品製造過程で実用化されるなど社会の発展にも大きく貢献している。触媒研究の分野に高まる期待と重要性、また日本の研究基盤の強みを鑑みると、この分野の重点化を図ることが、我が国発の大きなイノベーションの創出につながると考えている。

本研究領域では、このような背景のもと、ものづくり産業における環境負荷の低減、低炭素化への貢献はもとより、医薬品・機能性材料等の持続的かつ発展的な生産など、21世紀の世界が直面する諸問題の解決に貢献しうる均一系、不均一系の遷移金属触媒等を用いた先導的な物質変換に関する研究を推進する。具体的には、二酸化炭素などの安定小分子を今後資源として活用していくことを目指して、二酸化炭素の還元を従来の技術を凌駕し真に効率的に実現できる反応や、還元された二酸化炭素を C1、C2、C3 化合物合成の炭素源として活用可能とする物質変換反応に関する研究を実施する。また、様々な分野、とくに創薬や材料合成への利用につなげることを目指し、これまで実現することが難しかった複雑な化合物を生成するために必要な、不斉炭素-炭素結合生成をはじめとする反応手法の革新的かつ飛躍的な向上を実現する研究を実施する。さらには、結合形成、開裂および組み換えにより優れた機能を有する π 電子系分子の合成を目指した研究や π 電子系分子に官能基を導入することなどにより新たな機能を有する物質の創成につながる研究などを推進する。これらの反応手法は、産業界の需要に応えうることを目指し、高収率、高効率、高選択、経済的、安全であることが求められる。研究実施にあたっては、これまでの優れた研究成果の発展に留まらず、化学、物理、数理、工学等の分野の垣根を越えて連携する研究も重要となってくる。また、大型放射光施設(SPring-8)や X 線自由電子レーザー(SACLA)などの新たな大型基盤研究施設による反応機構の詳細な解明や、計算機の高速化に伴い反応研究に活用できる計算化学の導入も、本研究領域の発展に寄与することが期待されている。これら多様な分野と連携・融合した研究により、従来と異なる研究アプローチが見出され、物質変換研究に新たな展開が開かれることを期待した。

4. 研究課題の選考について

本研究領域の目標達成のためには、オールジャパンで集中的に取り組むことが必要と考え、公募は2012年度の1回限りとした。研究提案は、真に新たな物質変換を提案できる研究者であれば、既に優れた業績を挙げている研究者のみならず、発展途上にある若手研究者からの挑戦的な提案も広く募った。研究提案はチーム型・個人型の形態を問わず、チーム型の場合は研究代表者が主導する研究構想の実現を目指した提案であることとし、参画する研究者がその研究構想において果たす役割が明確になっていることを重視した。また、研究費総額は提案内容に応じて、4千万円～3億円(5年間総額)の間で最適な研究費を研究者自らが提案できることとした。また、「6.(4)」にて後述するとおり、若手研究者が応募しやすいような研究費配分の工夫をおこなった。一方、優秀なベテラン研究者が定年退職等で研究の第一線を退くことにより、彼らが長年培ってきたノウハウを失うことは日本の大きな損失である、との観点にたち、ベテラン研究者も参画できるプログラムとした。

選考にあたっては、(1)明確な目的をもった研究提案であるか(本当に求められている研究か)、(2)新たな種を生む研究なのか、既にある研究を伸ばす研究なのか、(3)既に種のある研究の場合は、飛躍的に研究のレベルを向上するものかどうか、(4)研究構想を実現する上で適切な研究費であるか、を評価基準とした。

その結果198件の研究提案があり、書類選考と面接選考を実施して、50件の研究課題を年齢を問わない、30代から60代に及ぶ幅広い年齢層から採択した。採択課題の研究代表者および共同研究者は、触媒科学をキーワードにして、専門分野は物理、化学、工学、材料科学、計測技術、計算化学と多岐に渡り、本研究領域が掲げる3つの達成目標に合致したバランスのとれたものになったと考えている。

また、30歳代～40歳代前半の若手研究者からの研究提案も多く、結果的に全採択件数の約3割にあたる14件は、若手研究者が研究代表者を務める課題であった。

更に採択課題とは別に、選考時に一定の評価は得たものの、採択には至らなかった6件の研究課題を、フイージビリティスタディ(FS)課題として選定した。FS課題では1年間、研究データの補完等の調査研究を少額の研究費で実施して頂き、その調査研究の結果によって改めて採択課題に選定するか評価した。2013年度に実施したFS課題評価の結果、3件の研究課題を採択課題として追加選定した。

5. 領域アドバイザー、研究推進委員について

領域アドバイザー名 (専門分野)	終了時の所属	役職	任期
碓屋 隆雄 (分子触媒化学、超臨界 流体反応化学 等)	東京工業大学	名誉教授	2012年6月～2016年3月
鈴木 啓介 (有機合成化学、天然物 全合成 等)	東京工業大学大学 院理工学研究科化 学専攻	教授	2012年6月～2018年3月
玉尾 皓平 (有機遷移金属化学、有 機ホウ素化学 等)	国立研究開発法人 理化学研究所	研究顧問、 グローバル 研究クラス タ長	2012年6月～2018年3月
田脇 新一郎 (高分子合成、酵素工学 等)	サンメディカル株 式会社	取締役	2012年6月～2015年3月
筒井 哲夫 (高分子化学、電子・電 気材料工学 等)	九州大学	名誉教授	2012年6月～2018年3月
堂免 一成 (不均一系触媒、光触媒、 表面化学 等)	東京大学大学院工 学系研究科化学シ ステム工学専攻	教授	2012年6月～2018年3月
平本 昌宏 (有機半導体工学、有機 半導体物性物理学 等)	自然科学研究機構 分子科学研究所 物質分子科学研究 領域 分子機能研 究部門	教授	2012年6月～2018年3月
藤田 照典 (触媒化学、有機合成化 学、高分子合成化学 等)	三井化学株式会社	シニアリサ ーチフェロ ー、特別研 究室長	2014年10月～2018年3月
村井 眞二 (有機合成化学、遷移金 属触媒 等)	奈良先端科学技術 大学院大学 先端 科学技術研究推進 センター	特任教授	2012年6月～2018年3月

村橋 俊一 (有機合成化学、有機金属化学 等)	大阪大学	名誉教授	2012年6月～2018年3月
森 美和子 (有機合成化学、有機金属錯体 等)	北海道医療大学薬学部	客員教授	2012年6月～2018年3月
研究推進委員名			
飯田 琢也 (生体光物理、非平衡ナノ光科学 等)	大阪府立大学大学院理学系研究科物理科学専攻	准教授	2013年5月～2018年3月
石井 久夫 (有機半導体工学、光電子分光 等)	千葉大学先進科学センター	教授	2013年5月～2018年3月
石谷 治 (光反応化学、金属錯体、光触媒 等)	東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻	教授	2013年7月～2018年3月
工藤 昭彦 (機能物質化学、光触媒 等)	東京理科大学理学部第一部応用化学科	教授	2013年7月～2018年3月
伊関 克彦 (有機合成化学、創薬化学 等)	東レ株式会社	常任理事／ 医薬研究所 長	2016年11月～2018年3月
磯部 直彦 (生化学、薬物動態学、毒科学 等)	住友化学株式会社	フェロー	2016年11月～2018年3月
浦田 尚男 (有機金属化学、触媒化学 等)	株式会社三菱ケミカルホールディングス	取締役	2016年11月～2018年3月
森澤 義富 (有機合成化学、フッ素材料科学 等)	旭硝子株式会社	特別研究員	2016年11月～2018年3月
前田 浩平 (機能性化学品、有機材料 等)	三洋化成工業株式会社	常務執行役員／ 本部長	2016年11月～2018年3月

本研究領域の対象課題は、二酸化炭素の還元、不斉炭素-炭素結合生成反応、 π 電子分子の合成と応用と、広範にわたっていることから、運営に当たっては、これらの分野をカバーし適切なアドバイスができる世界的に実績のある領域アドバイザー10名を選定した。以下に参考情報として、領域アドバイザーの主な受賞歴(2012年時点の日本の栄典等のみ)を示す。

領域アドバイザー名	賞等の名称(受賞年)
鈴木 啓介	紫綬褒章(2010年)
玉尾 皓平	紫綬褒章(2004年)、日本学士院賞(2007年)、文化功労者(2011年)
筒井 哲夫	紫綬褒章(2009年)
村井 眞二	日本学士院賞(2010年)
村橋 俊一	日本学士院賞(2010年)

なお、当初、産業界の領域アドバイザーとして参画した田脇新一郎は、人事異動後(三井化学株式会社よりサンメディカル株式会社へ出向・転籍)の本務多忙のため、アドバイザーは退任した。そのため、産業界の領域アドバイザーを補充するため、藤田照典が新たに就任した。

また ACT-C では、領域アドバイザーの協力の下、四半期レポートや領域会議等で各課題の進捗状況等を把握し、助言等を行うだけでなく、領域内で横断的な研究連携を推進するために、異分野の研究交流会を実施している。この横断的な取り組みにあたっては、領域アドバイザーだけでなく、関連分野の有識者の協力を得る必要がある。そのため、専門的事項について意見及びアドバイスを頂くために専門性の高い研究推進委員として、大阪府立大学大学院理学系研究科物理科学専攻・飯田琢也准教授、千葉大学先進科学センター・石井久夫教授、東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻・石谷治教授選定及び東京理科大学理学部第一部応用化学科・工藤昭彦教授を選定した。

さらに、本研究領域が終盤を迎えるに際し、研究成果のアウトプットをどのように展開するかが不可欠であると考えた。そこで、本研究領域に参画する若手研究者に企業で実用化を達成した経験を有し、経営的センスを持った有識者と『世の中に役立つ研究とは』等のテーマで本音の議論を展開できる環境の提供を行うべく、CREST 研究領域「新機能創出を目指した分子技術の構築」の企業出身の領域アドバイザーを、研究推進委員として、東レ株式会社・伊関克彦、住友化学株式会社・磯部直彦、株式会社三菱ケミカルホールディングス・浦田 尚男、旭硝子株式会社・森澤義富及び三洋化成工業株式会社・前田浩平を追加選定した。

6. 研究領域の運営について

(1) 研究総括としての研究領域運営方針について

「3. 研究総括のねらい」で述べた通り、研究代表者には、これまでの優れた研究成果の発展に留まらず、学問分野の垣根を越えて連携・融合することにより、従来と異なる研究アプローチを見出し、物質変換研究に新たな展開が開かれることを期待している。

(2) バーチャルラボとしての研究領域のマネジメントについて

本研究領域では、高いモチベーションと緊張感をもって研究を進めること、普段接点の少ない分野の研究者同士の融合・連携を促進することが重要と考えている。そして、各研究者の職人的な研究能力を最大限に引き出すため、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ラボを想定した。それらの取り組みに研究総括および領域アドバイザーが参加し、研究進捗状況の把握と評価・アドバイスを行う研究課題の指導体制を構築してきた。それらの取り組みを以下にまとめる。

①各研究課題の四半期レポートとサイトビジット

本研究領域では研究課題数が多いため、研究総括と専門の領域アドバイザーが研究課題を分担し、四半期ごとに研究進捗レポートによる進捗把握とアドバイスを実施することで、きめ細やかな研究推進フォローを行っている。

また、研究費の大きい課題や進捗の思わしくない課題については、サイトビジットを実施している。研究総括と担当アドバイザーは必ず出席して、専門性の高い内容の議論と情報交換、推進方針への的確なアドバイスを行うと同時に、ACT-C 研究費で購入した装置の活用状況の確認も併せて行っている。下記にサイトビジットの実績を記載した。

なお、2015年以降は進捗の思わしくない課題については、サイトビジット形式ではなく、科学技術振興機構の会議室で研究総括と担当アドバイザーは必ず出席して、討議・指導を行った。その内容に関しては、「6. (3)①、③、④」に記載した。

回数	日程	開催場所	対応した研究代表者
1	2013年10月7日	京都大学	依光 英樹
2	2014年2月18日	豊田中央研究所	稲垣 伸二
3	2014年2月18日	豊田中央研究所	森川 健志
4	2014年2月19日	東京理科大学	藤嶋 昭
5	2014年9月3日	九州工業大学	横野 照尚
6	2014年9月16日	岡山大学	西原 康師
7	2014年10月4日	中央大学	檜山 爲次郎
8	2014年11月13日	中部大学	成田 吉徳
9	2014年11月13日	中部大学	山本 尚
10	2015年1月20日	東京工業大学	岩澤 伸治
11	2015年1月21日	筑波大学	中村 潤児
12	2015年2月28日	京都大学	北川 進
13	2015年3月5日	東京大学	小林 修
14	2015年3月6日	微生物化学研究所	柴崎 正勝
15	2016年7月28日	北海道大学	澤村 正也

表2 研究課題のサイトビジット一覧

②領域会議

領域会議を2012年度から毎年1回開催して、研究成果等の発表を行っている。2013年度からは、研究総括、研究総括補佐、領域アドバイザーを含む研究者との異分野交流、横断的な研究ネットワーク構築を目的に、2日間開催している。2014年度からは、分野別に会場を分けて、いわゆる分科会形式の発表を実施して、より濃度の高い議論の場を構築できるように努めている。更に分科会形式の発表では、各会場の発表者間での投票により優秀発表者を選出しており、研究者同士の良い刺激になっている。また、ポスター発表など研究者が分野の垣根を越えて広く交流できるように工夫し、共同研究の促進など、新たな研究ネットワークも生まれている。さらに、大学や学会の要職を務めるベテラン研究者も多忙を極めながら領域会議に毎回出席し、ポスターの前で活発に議論した。若手研究者にとって世界的レベルの実力を有するベテラン研究者と同じ土俵で議論したことは、大いに刺激になり、自信につながったものと確信する。

開催実績は以下の通りである。

回数	日程	開催場所	参加者数
1	2013年1月27日	JST 東京本部別館	80
2	2013年6月5日～6日	富士ソフト・アキバプラザ	100
3	2014年5月30日～31日	富士ソフト・アキバプラザ	130
4	2015年6月12日～13日	日本科学未来館	130
5	2016年6月16日～17日	富士ソフト・アキバプラザ	130

表3 領域会議開催実績

③運営会議

本研究領域のより良い運営を目指し、研究課題の進捗状況、課題点をアドバイザーと事務局で共有化し、今後の方針を議論する場として運営会議を設けている。その会議でのアドバイザーからの色々な意見をその後の企画・運営に反映させた。

第一回；2012年11月6日、第二回；2013年6月5日、第三回；2014年2月3日
 第四回；2014年5月30日、第五回；2015年2月18日、第六回；2015年6月13日
 第七回；2016年6月16日、第八回；2016年10月17日、第九回；2017年5月17日
 第十回；2017年9月29日

④國武研究総括と ACT-C 事務局との毎週の TV 会議

本研究領域のより良い運営を目指し、研究課題の進捗状況、課題点を國武研究総括と事務局で共有化し、今後の方針を議論する場としてTV会議を設けている。これを実施したことにより、遠方におられることの多い研究総括との意思疎通が face-to-face で十分達成できるようになった。

⑤各重点課題でのワークショップ

本研究領域の3つの重点課題の目標達成のためには、領域に参画する研究者だけでなく、重点課題に関連した領域外の研究者との議論や情報共有が重要であると考え、各重点課題におけるワークショップを開催した。以下、開催順にまとめる。

◎π電子系分子探索ワークショップ (2013年12月17日開催、参加者 約50名)

π電子分子群の“作り手”は「どのような分子群が実際には求められているのか」、また“使い手”は「どのような分子群が既に存在し、今後新たに生み出されようとしているのか」を知ることにより、材料を合成するACT-C研究者と、物性評価やデバイス開発の領域外の研究者とで、実のある連携を多く生み出すことを目的として開催した。本ワークショップを通して芽生えた研究シーズに関しては、具体的な共同研究へと展開させ

る積極的なサポートを行っている。

◎CO₂還元・資源化ワークショップ (2015年1月13日開催、参加者 約50名)

二酸化炭素の触媒的還元及び資源化に関わる ACT-C 研究者と領域外の研究者とで、「真に実用化できる二酸化炭素還元技術・システムの実現」という目標に対して、どのような技術シーズが考え得るのか、そのシーズを将来技術として展開するにはどのようなボトルネックを克服すべきなのか、を明らかにすることを目的に開催した(ここでは、電気化学的および均一系・不均一系光触媒的還元反応に焦点を当てた)。本ワークショップでの情報共有・意見交換を通して、ACT-C としての方向性をより明確に示し、問題意識の共有化につながったと考えている。

◎不斉C-C結合形成反応ワークショップ (2016年3月5日~6日開催、参加者 約40名)

不斉炭素-炭素結合形成反応は、製薬会社、材料系化学会社および農薬会社等が有用化合物を効率的に合成するために重要な技術として注目されている研究である。日本では、有用な不斉配位子触媒を新規に開発する独創性の高い研究が行われており、本研究領域には、世界の第一線で活躍する有機化学者が多数参画している。しかしその多くは、金属-不斉配位子触媒を専門としている。そこで本ワークショップでは、ACT-C に参画している若手研究者を中心に、有機不斉触媒、高分子不斉触媒だけでなく、他領域で活躍する若手研究者を招き、従来の不斉炭素-炭素結合形成反応を越えて、研究成果や今後の展開を議論する機会として企画した。若手研究者にとっては、不斉合成における将来展望を考える良い機会になったと考える。

<外部依頼講演研究者>

浦口大輔(名大)、橋本卓也(京大)、長田裕也(京大)、大久保敬(阪大)、森直(阪大)

⑥成果の情報発信

(i)公開シンポジウム

◎第3回CSJ化学フェスタ (2013年10月22日開催、参加者 約200名)

根岸英一・米国パデュー大学特別教授による特別講演の他、講演は ACT-C 開始前に既に優れた成果を上げている藤嶋昭・理科大学長、小林修・東大教授らに依頼した。また、三井化学株式会社の藤田照典現シニアフェローらが「これからの化学研究戦略について～大学の基礎研究を企業の戦略にどう結びつけるか～」をテーマにパネルディスカッションを行った。日本化学会のみならず多くの参加者に、ACT-C の存在をアピールすることができた。

◎第7回CSJ化学フェスタ (2017年10月17日開催、参加者 約200名)

特別講演において、堂免一成・東大教授、筒井哲夫・九大名誉教授及び小林修・東大教授から ACT-C プログラム3つの研究領域の俯瞰的かつその領域の持つ課題点を明確化し、ACT-C としての取り組みと成果の位置付けを報告した。引き続き優れた成果を創出した7名の研究者(澤村正也・北大教授、田中健・東工大教授、椿範立・富山大教授、

深澤愛子・名大准教授、松永茂樹・北大教授、森川健志シニアフェロー、依光英樹・京大教授) から講演を頂き、ACT-C 研究者がこれからも本質を見極めたオリジナリティーの高い研究を目指し、日本の有機化学の伝統を未来に繋いでいくことを明確にした。

(ii) JST 広報誌(JST news)の特集企画

JST news は、JST 総務部広報課が研究機関向けに毎月 1 万部発刊する機関誌である。2017 年 10 月号に ACT-C の特集号の編集を行った。『日本の有機化学をもっと強く』をキーワードに國武豊喜研究総括が語る ACT-C の集大成をすると共に、有機化学に新たな息吹を吹き込む下記 4 名の若手研究者たちの研究への熱い挑戦を紹介した。

<紹介した若手研究者>

鳶巢守(阪大)、深澤愛子(名大)、松永茂樹(北大)、依光秀樹(京大)

(iii) 展示会

◎JST フェア 2015 (2015 年 8 月 27 日～28 日開催、総入場者 約 25,000 名)

「未来の産業創造」を目指した、JST 発の研究開発成果が一堂に会する JST フェアに下記 7 名の研究代表者が参加し、ACT-C の成果をポスターセッションで発表した。また、ACT-C 事務局が ACT-C の概要を説明した。

<出展研究者>

横野照尚(九工大)、成田吉徳(中部大)、山本尚(中部大)、小林修(東大)、
田中健(東工大)、深澤愛子(名大)

◎サイエンスアゴラ 2015 (2015 年 11 月 13 日～15 日開催、総入場者数 約 9,000 名)

「つくろう、科学とともにある社会」をビジョンとしたサイエンスコミュニケーションの場に下記の研究代表者が出展し、ポスターや映像、分子模型などを用いて自身の取り組みを紹介した。

<出展研究者>

山田陽一(理研)

◎JST フェア 2016 (2016 年 8 月 25 日～26 日開催、総入場者 約 16,000 名)

同様に下記 2 名の研究代表者が参加し、ACT-C の成果をポスターセッションで発表した。また、ACT-C 事務局が ACT-C の概要を説明した。

<出展研究者>

依光英樹(京大)、東林修平(分子科学研究所 ※当時)

(3) 研究課題の進捗状況の把握と評価、それに基づく指導

前節の「6. (2) バーチャルラボとしての研究領域のマネジメントについて」に記載した支援体制、特に各研究課題の四半期レポートを担当アドバイザーが精読し、研究の把握と評価、研究課題の指導・助言・支援、研究計画の修正等をアドバイザーコメントとして適宜行っている。さらに、サイトビジットにおいて、専門性の高い内容の議論と情報交換、推進方針へのアドバイスをを行っている。その結果、研究代表者が担当アドバイザーの意見を取り入れ、研究方針を変更することで研究が上手くいった例が数多く生まれた。以下にその具体例をいくつか記す。

① 軌道修正会議 [I]

(進捗状況が芳しくない、あるいは再考案件を抱える研究課題への対応)

2014年11月17日、研究進捗が芳しくないと考えられる8名の代表研究者に下記の内容で通知を出した。

Memo to : 岩澤伸治(東工大)

当初の研究計画にある、エチレンと二酸化炭素からのアクリル酸合成から少し離れてきているように思われます。この合成は非常に挑戦的な課題ですので、二酸化炭素の合成化学への利用展開に向けてアルミニウム試薬以外の還元剤として考えられるものや、さらに検討している合成戦略などを研究計画書の中で明確に示してください。

その後の対応 :

2015年1月20日@東工大にてサイトビジット(出席者:研究総括、領域アドバイザー3名)を実施し、その後、当初の提案のメインターゲットを実施する旨を明示した研究計画書へと変更いただいた。

Memo to : 横野照尚(九工大)

研究計画の作成に際しては、光触媒電極の構築に向けて、各研究グループが何をどのようなスペックで、いつまでにすべきかを明確に示してください。

Memo to : 久新荘一郎(群馬大学)

研究計画の作成に際しては、液晶材料研究全体の中で、ケイ素置換材料がどこに位置しているのか、また分子設計の方針を明確に示してください。

Memo to : 桑野良一(九大)

当初の研究計画から大きく遅れており、計画に記載されている「アセン構造伸長法」「フェナセン構造伸長法」はほとんど進んでいないと思われます。研究計画の作成に際しては、研究スケジュールを大幅に見直し、目的達成のための方針を明確に示してください。

その後の対応 :

極めて挑戦的な研究内容であったため、当初の目的達成が困難な状況と判断。2014年度末での早期終了がご本人のためであるとの方針が出された。

Memo to : 佐藤美洋(北大)

研究計画の作成に際しては、申請時の目標に向けて、アルケンと二酸化炭素との反応によるアクリル酸誘導体の合成に関し、触媒反応への展開に関するアイデアを明確に示してください。

その後の対応 :

2015年1月28日@阪大にて会議(出席者:領域アドバイザー2名)を実施し、その後、当初の提案のメインターゲットを実施する旨を明示した研究計画書へと変更いただいた。

Memo to : 成田吉徳(中部大)

作製した触媒の位置づけが不明瞭と思われますので、研究計画の作成に際しては、本研究において作製している新しい触媒の選択理由、具体的な使い方、いつまでに何ができると成功と考えるのかを明確に示してください。

Memo to : 三上幸一(東工大)

研究チーム間での研究テーマの重複があり、共同研究体制の構築が不十分であるように思われます。研究計画の作成に際しては、研究チーム間でしっかり議論して当初の計画を慎重に見直し、また工業化への展開の見通しを明確に示してください。

その後の対応 :

計3回のヒアリングの結果、2014年10月1日から三上グループ、及び、網井・柴田グループに分割し、本課題の下に副課題を設定して、独立した運営とした。

Memo to : 村上正浩(京大)

当初の研究計画にある、二酸化炭素の導入から少し離れてきているように思われます。研究計画の作成に際しては、太陽光エネルギー変換を用いた技術開発の戦略を示してください。

その後の対応 :

研究課題名「太陽エネルギーを駆動力とする新変換技術の開発」が漠然としており、戦略目標と離れていると指摘されたことを受け、戦略目標との関連性を明確にさせていただいた。その一環として、研究課題名に副題をつけていただいた。

【変更後】 「太陽エネルギーを駆動力とする新変換技術の開発
～原子効率に優れた炭素-炭素結合形成」

②課題中間評価とその後の対応

課題の中間評価会を2015年9月1、2、4、9、10日に開催実施した。研究総括および領域アドバイザーによる評価結果を以下に記す。

(i) 評価結果

A⁺評価：9 課題、 A評価：29 課題、 B評価：13 課題

(ii) 研究費が(小)(中)の研究課題で評価の高かったもの

6 研究課題に対し、今後の成果充実を期待して、2016 年度の予算を増額した。

< 研究費増額の対象となった研究課題： >

- メソポーラス有機シリカを利用した生体模倣触媒に関する研究
稲垣伸二(豊田中研)
- 不斉炭素-炭素結合生成反応による触媒的環構築の高度化と応用
田中健(東工大)
- 不活性シグマ結合の触媒的変換手法の開発
鳶巢守(阪大)
- ブタジエンを鍵とする非平面 π 電子系の創製と機能発現
深澤愛子(名大)
- 医薬品開発研究を先導する多彩な協同機能触媒系の創製と応用
松永茂樹(北大)
- 太陽光と水で二酸化炭素を資源化する光触媒反応系の開発
森川健志(豊田中研)

③軌道修正会議 [II]

(検討事項が残された研究課題：研究総括によるヒアリング)

Memo to： 横野照尚(九工大)

2016年6月17日に実施(担当アドバイザー1名同席)。それぞれのグループの要素技術の成果は認められるが、グループ間の連携に改善点がある。グループ間の連携を明確化した研究計画の提示を指導。

その後の対応と進捗：

研究計画の見直しと計画書の改訂を行う事で合意。システム設計における横野、福間、清水、春山グループの関係と目標を定量化した計画書を作成。横野Gの成果が全体の鍵であることを明確化し、実用化を目指して検討中。

Memo to： 高田十志和(東工大)

2016年2月12日に実施。研究期間中、CREST「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」の研究課題「緩やかな束縛反応場を活用する高分子の連続改変系の構築と革新的機能化」の研究代表者に採択されたが、ACT-C

と平行して研究することが可能かどうか、また研究に重複が生じないように出来るのかが協議された。

その後の対応：

高分子を CREST で、低分子を ACT-C で行う事で合意。

Memo to： 檜山爲次郎(中央大)

2016年2月12日に実施。グループ間連携に改善の余地がある。

その後の対応：

グループ間連携を明確にした研究計画書を作成して頂き、その内容に合意。

Memo to： 中村潤児(筑波大)

2016年2月12日に実施。現在行われている研究が学理的な研究なのか、使えるものになるのかが不明確である。

その後の対応 (1)：

研究総括、担当アドバイザー2名による再ヒアリングを実施。(2016年4月22日) 期間を限定し、以下の3点を実施する ((a)、(b)は6月～11月の6ヶ月、(c)は7月末まで)。

(a)ER機構を検証し論文化

(b)グラフェンのメタノール合成触媒としてのポテンシャルの明確化

(c)筑波大、東大、阪大グループの研究内容の簡潔明瞭化および連携の研究課題達成に対するシナジー効果の明確化

東大、阪大グループを含めヒアリングを再度行う。

その後の対応 (2)：

研究総括、担当アドバイザー2名による、東大、阪大グループを含めたヒアリングを実施。(2016年10月17日)

上記で設定した(a)(b)(c)について、研究代表者が了解し、改善を表明した。

その後の進捗：

Eley-Rideal 反応機構において、フォルメートの脱離に関する成果が Angew.

Chem., Int. Ed. 誌に掲載された。高評価を得、hot paper に選出された。

メインとなるフォルメートの生成に関する成果は論文投稿準備中。グラフェンに関しても検討中。

④軌道修正会議 [Ⅲ]

(研究進捗に停滞感がある研究課題：研究総括、担当アドバイザーによるヒアリング)

Memo to： 村井利昭(岐阜大)

2016年4月21日に実施。村井の強みである有機化学を基盤とした研究に注力すべき。その際、背景・研究のねらい・コンセプトのより一層の明確化を要望した。

その後の対応：

研究計画の見直しと計画書の改訂を行う事で合意。強みである有機化学を基盤とした研究に傾注することで、一定の研究成果を得た。Chemistry Open に掲載され、その内容がプレスリリースされた。岐阜新聞大賞を受賞。

Memo to： 生越専介(阪大)

2016年5月9日に実施。成果を求めて色々な反応を試みる計画は中止し、ターゲットを絞った研究を推奨した。最近ニッケル中間体が見え始めてきたとのことであるので、今まで得られた結果を整理し、反応の本質を見極めて、ニッケラサイクルの反応の一般化を期待した。

その後の対応と進捗：

研究計画の見直しと計画書の改訂を行う事で合意。独自のケミストリーを構築することにより、Nature Communications 誌に掲載され、その内容をプレスリリースした。

Memo to： 平野雅文(農工大)

2016年5月9日に実施。まずは、今までの研究を整理し、強みと思われる技術を明らかにする。次にこの展開として、JST と協力した高度な文献検索を行って、価値ある化合物の合成を目指す。また不斉反応の開発においては、既存配位子を評価するだけでなく高選択性配位子のコンセプトを出して、それを検証するというアプローチを加えることを提案。

その後の対応と進捗：

2016年5月末までに今までの研究の整理を行う事で合意。不斉鎖状交差二量体反応で進展があった。2,5-ジヒドロフランと共役ジエンで位置選択性に課題が残るものの80-90%ee という高い不斉収率を達成、その成果を米国化学会の Organometallics 誌に投稿し、2017年1月の Most Read Papers に選出された。

⑤課題事後評価

課題事後評価会を2017年9月20、21、25、28、29日に開催実施した。下記の評価結果の通り、上記①②の取り組み等により、中間評価結果と比較して事後評価結果は著しく改善された。なお、JST 産学連携展開部・研究支援グループにも評価会を傍聴いただき、今後の成果展開に向けて情報共有を図った。

(i) 評価結果；括弧内は中間評価結果

A⁺評価：14(9)課題、 A評価：32(29)課題、 B評価：5(13)課題

なお、詳細な個々の研究代表者への評価コメントは、「7. (7)」に別記する。

(4) 研究費配分上の工夫

各研究課題への研究費の配分については、年度毎に研究計画および研究費の見直しと共に増額要求等の提出を求め、総括裁量経費から必要に応じて、重点配分を行ってきた。

「6. (2) バーチャルラボとしての研究領域のマネジメントについて」に記載した支援体制により、研究進捗状況に応じた研究費の柔軟な見直しが可能となっている。

○各研究課題への研究費の配分については、3段階の予算クラス[研究費(大)、(中)、(小)]を設定した。

研究費(大)の研究課題：

広大な研究テーマで、複数の分野が連携・融合したチーム型として運営することでシナジー効果による成果を期待した。また、研究代表者には、複数の分野が連携・融合したチーム型運営を経験することで、的確なマネジメント能力の育成も目指した。従って、「6. (3) ①、③」に記載したように、共同研究のあり方を厳しく指導している。

研究代表者；横野照尚、北川進、小林修、澤村正也、柴崎正勝、中村潤児、成田吉徳、西原康師、檜山爲次郎、山本 尚

研究費(中)の研究課題：

研究提案はチーム型・個人型の形態を問わず中堅的な研究テーマを想定した。

研究代表者；稲垣伸二、岩澤伸治、梅田実、生越専介、垣内史敏、北村雅人、高田十志和、茶谷直人、椿範立、野村琴広、姫田雄一郎、藤嶋昭、松永茂樹、三上幸一、森川健志、山田陽一

研究費(小)の研究課題：

多数の若手研究者に応募しやすいように想定した。特に若手研究者には、ACT-Cでの経験を今後の研究に生かすよう期待し指導した。

研究代表者；犬丸啓、小澤文幸、川口博之、久新荘一郎、倉橋拓也、近藤美欧、櫻井英博、斎藤進、笹井宏明、佐藤哲也、佐藤美洋、柴田高範、田中健、羽村季之、東林修平、平野雅文、平尾俊一、深澤愛子、村井利昭、村上正浩、森 健彦、依光英樹、鳶巢守、宮内雅浩、吉田拡人

一方、第3回領域会議(2014年5月30日～31日)で成果が認められた6研究課題に対して、2015年度予算の増額を決定。

<研究費増額の対象となった研究課題を主導した研究代表者>

稲垣伸二(豊田中研)；(中)、 田中健(東工大)；(小)、 鳶巢守(阪大)；(小)、
松永茂樹(北大)；(中)、 森川健志(豊田中研)；(中)、 山田陽一(理研)；(中)

また、課題中間評価会(2015年9月)で成果が認められた以下の6研究課題(6.(3)②に記載の通り)2016年度予算の増額を決定。

<研究費増額の対象となった研究課題>

- ・メソポーラス有機シリカを利用した生体模倣触媒に関する研究 [稲垣伸二(豊田中研)]
- ・不斉炭素-炭素結合生成反応による触媒的環構築の高度化と応用 [田中健(東工大)]
- ・不活性シグマ結合の触媒的変換手法の開発 [鳶巢守(阪大)]
- ・ブタジエンを鍵とする非平面 π 電子系の創製と機能発現 [深澤愛子(名大)]
- ・医薬品開発研究を先導する多彩な協同機能触媒系の創製と応用 [松永茂樹(北大)]
- ・太陽光と水で二酸化炭素を資源化する光触媒反応系の開発 [森川健志(豊田中研)]

さらに、優れた研究成果を挙げ、更なる進展が期待できる 9 研究課題に対して、2016 年もしくは 2017 年度予算の増額を決定

<研究費増額の対象となった研究課題を主導した研究代表者>

稲垣伸二(豊田中研) ; (中)、 斎藤進(名大) ; (小)、 櫻井英博(阪大) ; (小)、
佐藤哲也(阪市大) ; (小)、 澤村正也(北大) ; (大)、 田中健(東工大) ; (小)、
鳶巢守(阪大) ; (小)、 深澤愛子(名大) ; (小)、 松永茂樹(北大) ; (中)

(5) 研究領域中間評価結果への対応

① 研究領域中間評価と評価結果

【評価会開催日】 2015年2月23日(火) 13:30~16:00

【評価委員】

委員長： 巽 和行(名古屋大学物質科学国際研究センター 特任教授)

委員： 穂田宗隆(東京工業大学資源化学研究所 所長)

相馬芳枝(産業技術総合研究所 名誉リサーチャー)

府川伊三郎(旭化成株式会社 元顧問)

丸岡啓二(京都大学大学院理学研究科 教授)

【発表者】 國武豊喜 研究総括、【特別参加者】 村井眞二 領域アドバイザー

『本研究領域は総合的に優れていると評価できる。』と評価されたが、個別課題である『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、以下の評価コメントを頂いた。

『将来、科学技術イノベーションに貢献する可能性のある研究成果は垣間みられるが、直ちに工業化されそうな事案はまだ見られない。

具体的には、「二酸化炭素還元法の創出」は実用化のための基本方針を模索している段階である。それでも、光触媒等で大きなブレイクスルーが見いだされれば、急速にイノベーションに結びつく。

「不斉炭素-炭素結合等の直截的生成法の開拓」については、創薬研究等でターゲット分子を絞って目標設定を具体的に示せば早い時期にイノベーションに貢献できると考えられる。「 π 電子系分子の化学合成と新機能創成」では、長期的な観点で海外との競争に勝つには、独自の分子開発をめざすのが得策と思われる。』

上記のように、研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献の改善が必要との認識を改めた。

② 研究領域中間評価結果への対応

研究領域中間評価の後のより良い運営と研究成果の更なる発展を目指し、研究領域中間報告者の内容確認と対応について研究総括と打ち合わせを行うとともに、アドバイザー会議等での領域アドバイザーを含めた議論により、本研究領域の課題点とその対応策を明確化した。それに基づく具体的な対応、特に研究成果の科学技術イノベーション創出への貢献に向けた取り組みを下記に示す。

(i) JST/CRDS-NEDO/TSC エネルギー・環境分野の意見交換会 (2016年8月19日)

科学技術から産業技術への橋渡しに向けた連携強化を目指し、第1段階のアクションとして、NEDO/TSC 環境・化学ユニットが注目する科学技術について、関係者間で情報交換・意見交換会を開催し、ACT-Cにおけるこれまでの研究成果の一端を報告した。NEDOの企画部門にACT-Cの存在とその成果を認識していただく良い機会であった。以下に研究分野と報告者を記す。

<省エネルギー／革新的生産プロセス>

小林修(東大)

<CO₂固定化・有効利用>

椿範立(富大)、 姫田雄一郎(AIST)、 森川健志(豊田中研)、

稲垣伸二(豊田中研)、 斎藤進(名大)

(ii) JST 産学連携展開部との連携

JST 産学連携展開部研究支援グループに対してACT-Cの状況説明を行い、研究課題の成果に興味を持っていただいた。その後の数々の領域イベントに参画いただき、研究課題のそれぞれの成果に対し、実用化展開の観点から建設的意見をいただいている。

(iii) 社会的貢献推進活動

企画の趣旨

ACT-Cに参画する若手研究者と、企業で実用化を達成した経験を有し経営的センスを持った有識者とが、『世の中に役立つ研究とは』等のテーマで本音の議論を展開できる場を設ける。

社会的貢献推進企画会議 (2016年11月23日)

本会議(下記の推進会議)を開催するにあたり、どのような内容で行えば良いか下記メンバーで事前に討議した。

<参加者>

研究総括：國武豊喜 領域アドバイザー：筒井哲夫、藤田照典

研究推進委員(5.参照)：伊関克彦、磯部直彦、浦田尚男、前田義富、森澤浩平

<決定事項>

ACT-C若手研究者8名を選抜し、研究成果に加え産学協同等に関する意見をもらい、産業界有識者(企画会議メンバー)と建設的な議論を行う。

社会的貢献推進会議 (2017年3月5日)

2016年11月23日に討議したメンバーと下記の若手研究代表者8名とで社会的貢献推進会議を開催した。

<出席した研究代表者>

倉橋拓也(京大)、 佐藤哲也(阪市大)、 斎藤進(名大)

田中健(東工大)、 蔦巢守(阪大)、 深澤愛子(名大)、

松永茂樹(北大)、 依光英樹(京大)

総論として、能力の高い研究者は応用を考え過ぎることなく基礎研究に集中すべきであり、そこで得られた優れた研究成果を他の研究者が応用に繋げると考える。それが社会的に貢献度の高い基礎研究の一つの姿である。また、産学連携展開部に参画していただき、A-Step への応募を3名に打診し、2名から積極的に取り組みたいとの意向を得た。

討議での研究代表者に対するコメントを事務局でまとめ、各研究代表者に後日送付した。一例として、以下に依光英樹京大教授へのメッセージの抜粋を紹介する。

- ・高い洞察力に基づくことで、セレンディピティを上手に育成している。面白い反応を創出することに邁進して欲しい。注目される面白い反応を創出すれば、他研究者が応用に繋がる研究を遂行してくれ、それが社会的に貢献度の高い基礎研究である。このような能力を持った研究者はあまり応用を考えないで良いと思う。
- ・幅広い分野に興味を持つ研究者を育成してほしい。
- ・産学連携で必要なのは、両者が理解し合い、歩み寄りことであると考えます。
- ・人材育成に関しても産学のコミュニケーション、交流をより活発にすべきと考える。その若手リーダーとして期待する。
- ・化学企業の経営層の先生方からグローバルかつ俯瞰的な視点を学び、新たな研究テーマ立案に繋げていただきたい。

(iv) 公益社団法人新化学技術推進協会(JACI)との連携

基幹化学企業 89 社を会員に有する JACI と連携し、ACT-C 研究成果の展開を検討した。

◎CO₂還元法の創出領域への対応

JACI では将来的に CO₂ マネジメントに関するナショナルプロジェクトを立ち上げたという意向がある。JACI プロジェクト部会 (CO₂ マネジメント WG) から ACT-C の研究課題の中から注目課題を教えてもらいたいとの要請を受け、いくつかを紹介した。その中で、JACI 事務局は椿範立、藤川茂紀 (九大 ; 山田研究課題の共同研究者) の研究内容に興味を持っていただいた。そこで、両氏に JACI 事務局に概要説明を行っていただいた。椿研究代表者には、2017 年 10 月 13 日に JACI プロジェクト部会 (CO₂ マネジメント WG) にて討論会を行っていただいた。現在 JACI 内で共同研究、ナショナルプロジェクトの立ち上げを検討していると伺っている。

◎不斉炭素-炭素結合等の直截的生成法の開拓領域、

ならびに π 電子系分子の化学合成と新機能創成領域への対応

第一回 JACI/JST 交流セミナーを 2017 年 8 月 4 日に JACI 会議室にて開催した。

【趣旨】

JACI 内で研究発表会を開催し、ACT-C の研究シーズを紹介した上で、企業とのマッチングや新たな研究の展開を図りたい。今後にわたった産学研究者間交流を深める。

【発表者】

<口頭発表>

松永茂樹(北大)、 田中健(東工大)、 依光英樹(京大)、
網井秀樹(群馬大)・柴田哲男(名工大)

<ポスター発表>

斎藤進(名大)、 鳶巢守(阪大)、 佐藤哲也(阪市大)、
倉橋拓也(京大)、 山田陽一(理研)、[参考：川原隆幸(JST 産学連携展開部)]

【参加者】 約 40 名 (JST・ACT-C 関係者以外)

【今後の展開】

JST さきがけ 研究領域「革新的触媒の科学と創製」(北川宏研究総括)
と合同で、2018 年 3 月 8 日に第 2 回セミナーを開催予定。企業参加者とさきがけ研究領域とのネットワーク構築も目指している。

(v) 新技術説明会

企業との共同研究を目指し、主に民間の企業研究者や企画担当者を対象とした JST 企画の標記説明会で ACT-C での成果を報告した。企業参加者は 100 名以上、名刺交換、個別面接も行い、企業とのネットワーク形成に繋がった。

2015 年 2 月 5 日 開催 発表者：鳶巢守(阪大)

2017 年 12 月 21 日開催 発表者：網井秀樹(群馬大)、柴田哲夫(名工大)

(vi) 研究代表者による実用化への個別展開

山本尚(中部大)は、タンタル触媒の存在下において、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ことを見出した。この新規アミド化反応の開発は、JST 研究成果展開事業(A-STEP)ステージⅡ(シーズ育成タイプ)において、研究課題「基質支配による触媒的ペプチド合成システムの実用化検証」に発展した。今後、産業界との連携によるペプチド合成への発展が期待できる。また、椿範立(富山大)は二酸化炭素を還元し有用な C1、C2 化合物へ効率的に変換する反応の実用化の一環として、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、研究課題「二酸化炭素からの新しい Gas-to-Liquid 触媒技術」として展開している。さらに、小林修(東大)は連続フローシステムを確立し、実用化を目指し、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) エネルギー・環境新技術先導プ

プログラムに採択され、研究課題「ファインケミカルズ製造のためのフロー精密合成の開発」として、そして国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED) 創薬基盤推進研究事業に採択され研究課題「フロー精密合成を志向した高機能不均一系触媒の開発」として新たな実用化展開を目指している。

(vii) 研究領域中間評価を受けてからの活動のまとめ

以上、本研究領域の期間中に生み出された数々の研究成果は、今後、科学技術イノベーション創出に貢献する可能性が数多く見込まれる。特にベテラン研究者によるより実用化に近い研究テーマは JST、NEDO、AMED のプログラムに引き継がれており、今後の発展を大いに期待したい。

(6) その他(人材育成等)

①ACT-C レクチャーシップ

・松永茂樹(北大)

【期間】2016年9月13日～25日

【概要】

ドイツの5大学を訪問。研究内容の紹介、ディスカッションを行った。また Braunschweig 大学では第4回 Saxony Catalysis Symposium にて招待講演を行った。

(以下、松永研究代表者の報告書から引用)

ゲッティンゲン大学の Ackermann 教授、及び、ミュンスター大学の Glorius 教授は研究代表者が開発したコバルト触媒そのものを利用した研究を展開していることもあり、今後の研究の方向性などを含めた有意義な議論を行うことができた。また、「友好的な競争関係」を構築していこうということで意見が一致した。互いの年齢も近く、今後、互いに友好な関係を続けていく良いきっかけとなった。

ブラウンシュバイク大学の Werz 教授、ビーレフェルド大学の Gröger 教授、ケルン大学の Berkessel 教授とは専門分野がやや異なるが、逆に新鮮な意見交換ができ、共同研究の可能性を探ることができ、非常に有意義であった。まずはブラウンシュバイク大学の Werz 教授との共同研究から開始する予定で話を進めている。

②ACT-C 国際強化支援

(i) 国際共同研究

◎姫田雄一郎(AIST)

【期間】2015年12月～2017年3月

【概要】

スイス連邦工科大学ローザンヌ校の Gábor Laurenczy 教授と、「CO₂からのメタノール合成法の研究」について共同研究を実施し、成果として共著論文4報を報告した。

◎椿範立(富大)

【期間】2013年11月～2015年3月

【概要】

よりパワフルなカプセル型ゼオライト触媒の開発を目指した。そこで、ゼオライト膜の第一人者である米国 Delaware 大学の Yushan Yan 教授と共同研究を行い、カプセル触媒の基本となる構造の構築に成功した。

◎平野雅文(東京農工大学)

【期間】 2014 年～2015 年

【概要】

オーストラリア国立大学のマーティン・A・ベネット教授との共同研究を実施し、安定な錯体からの容易な触媒活性種発生法の開発に成功した。

(ii) 国際シンポジウム

◎茶谷直人(阪大)

【日程】 2016 年 10 月 25 日～27 日

【概要】

「The International Symposium on C-O Activation (ISCO-2016)」を開催した。(場所は姫路) C-O 活性化は、有機合成分野のみならず、C-O 結合を多く含む生物資源であるリグニンの分解によるバイオ燃料生産や、 π 共役系化合物、生体関連物質合成とも関わるため対象となる研究者数は潜在的に多い。このように急速に広がる分野における研究者を一堂に集め、議論することにより分野の進展を図るとともに、研究者コミュニティを確立することが本シンポジウム開催の最大の目的である。

7. 研究を実施した結果と所見

(1) 研究総括のねらいに対する研究成果の達成度

「1. (3)」に記載した研究総括の狙いは、触媒研究の分野に高まる期待と重要性、また日本の研究基盤の強みを鑑み、21 世紀の世界が直面する諸問題の解決に貢献しうる金属触媒を創製し、それを用いて先導的な物質変換に関する研究を推進し、大きな成果を得ることである。

「二酸化炭素の有用物質への変換」では、二酸化炭素などの安定小分子を今後資源として活用していくことを目指して、二酸化炭素の還元を従来の技術を凌駕し真に効率的に実現できる反応を開発することに成功し、鋭意実用化を目指している。本重点課題の研究予算は 16.3 億円ほどであり、その研究布陣は以下の研究代表者 19 名で構成されている。(アンダーラインは他の重点課題との融合領域を抱えていることを示す。) 犬丸啓、岩澤伸治、梅田実、横野照尚、川口博之、北川進、近藤美欧、斎藤進、佐藤美洋、椿範立、中村潤児、成田吉徳、姫田雄一郎、藤嶋昭、村上正浩、森川健志、森健彦、宮内雅浩。

「選択的な不斉炭素-炭素結合生成等」では、革新的な触媒反応を多数見出すことで、これまで実現することが難しかった複雑な化合物を生成するために必要な、不斉炭素-炭素結合生成をはじめとする反応手法の革新的かつ飛躍的な向上を実現化した。また、工業化にとって重要な数種のフローシステムを確立し、工業化を目指し、企業と共同研究を行っている。さらに革新的計算科学分野との融合により、今までに無い画期的な触媒設計を可能にした。本重点課題の研究予算は 23.6 億円ほどであり、その研究布陣は以下の研究代表者 32 名で構成されている。(アンダーラインは他の重点課題との融合領域を抱えていることを示す。) 稲垣伸二、岩澤伸治、生越専介、小澤文幸、垣内史敏、香月昴、北村雅人、倉橋拓也、桑野良一、小林修、櫻井英博、笹井宏明、佐藤哲也、佐藤美洋、澤村正也、柴崎正勝、柴田高範、高田十志和、田中健、茶谷直人、羽村季之、檜山爲次郎、平野雅文、平尾俊一、松永茂樹、三上幸一、村井利昭、村上正浩、山田陽一、山本尚、鳶巣守。

「 π 電子系分子の化学合成と新機能創成」では、新規触媒開発と新たな分子設計を駆使して、精密に分子構造を制御することで、新たな機能を有する物質の創成につながる新規 π 電子系分子を多く生み出すことに成功した。本重点課題の研究予算は 7.5 億円ほどであり、その研究布陣は以下の研究代表者 14 名で構成されている。(アンダーラインは他の重点課題との融合領域を抱えていることを示す。) 小澤文幸、垣内史敏、久新荘一郎、柴田高範、田中健、西原康師、野村琴広、羽村季之、東林修平、深澤愛子、村井利昭、依光英樹、吉田拡人。

研究実施にあたっては、これまでの優れた研究成果の発展に留まらず、化学、物理、数理、工学等の分野の垣根を越えて連携することを推奨し、ACT-C 内外の共同研究を活性化することができた。上記取り組みは「6. (2)⑤」に記載した。また、イノベーション創出を目指し、企業研究者との交流、ネットワーク構築を目指した企画を行い、詳細は「6. (5)②」に記載した。

以上、研究総括のねらい通り、多様な分野と連携・融合した研究により、従来と異なる研究アプローチが見出され、物質変換研究における新たな展開を達成することができた。

(2) 研究領域全体として見た場合の特筆すべき研究成果

ACT-C 研究領域全体においては、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領域を研究対象の範疇としており、選りすぐりの研究者が採択されていることもあり、学術的に高水準の成果が得られている。研究領域全体としてすでに 1774 報（中間評価時 884 報）の学術論文が国際誌に発表されており、しかも著名な国際学術誌への掲載が数多い。口頭発表の数はさらに多く、特に国際学会での招待講演数が 1,067 件にのぼることは研究成果が海外からも注目されている証である。一方で、中間評価以降の特許出願数は、69 件（国際特許 9 件）から 115 件（国際特許 13 件）と一応の増加傾向を示しており、科学技術イノベーション創出に貢献する可能性のある研究成果が数多く見いだされつつある。

「**二酸化炭素の有用物質への変換**」は、グリーンイノベーションに向けた重要技術として、二酸化炭素からのメタノール合成があげられる。脱石油依存型社会を目指すための技術として社会的・経済的ニーズが非常に高く、かつ、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テーマである。特筆すべき研究成果として、椿範立（富山大）は革新的な触媒反応を開発することで、合成ガスと CO₂ によるギ酸エステル経由の新規低温メタノール合成法を確立した。さらに、合成ガスから一段階で 70% と高選択的にエタノール合成を達成し、実用化を目指しているほか、森川健志（豊田中研）は人工光合成においては、太陽光変換効率 4.6% での CO₂ からギ酸合成反応を達成している。

「**選択的な不斉炭素-炭素結合生成等**」は、医薬品や液晶等の分野において重要な要素技術であるが、工業ラインとして稼働している例は極めて少なく、産業界のニーズにあった新概念、新技術による発展が望まれている。特筆すべき研究成果として、柴崎正勝（微研）は革新的な触媒反応を開発することで、今までは合成不可能であった低活性基質を活性化することで向山アルドール反応の拡大化、触媒的不斉炭素-炭素結合生成反応の実現化を達成した。また、山本尚（中部大）は不斉エポキシ化反応の基質拡大化にも成功している。さらに、澤村正也ら（北大）の新たな量子シミュレーション法である人工力誘起反応（AFIR）法に基づく反応経路自動探索法を開発することで精度の高い触媒設計を可能にしたことは極めて大きな成果である。これら新規触媒開発は医薬品や液晶等の分野において実用化が期待できる。一方で、不斉触媒反応は多くの基礎研究があるにも関わらず、工業レベルへの展開は限られており、未だ発展途上の段階にある。この大きな課題を小林修（東大）は連続フローシステムの確立で、柴崎正勝（微研）は共有結合を使わない固相担持不斉触媒の創製等により克服し、工業化を目指し企業との共同研究に発展させるに至っている。また、山本尚（中部大）はオリジナリティーの高い触媒設計による革新的アミド化を開発した。産業界との連携によりペプチド合成への発展が大いに期待できる。

「 **π 電子系分子の化学合成と新機能創成**」は優れた光・電子特性を持つ新規材料になり

うる化合物として世界的に期待されている。従来、有機半導体材料の研究開発においては既知化合物の改良研究が中心であったが、既存概念を越えた新たな発想の分子設計が望まれている。特筆すべき研究成果として、田中健（東工大）は有機合成化学の最新技術である新規触媒開発と新たな分子設計を駆使して、精密に分子構造が制御された新規 π 電子系分子群を多く生み出すことに成功した。機能発現の視点から、それらの新規 π 電子系分子は真の意味の分子エレクトロニクスへの応用が期待できる。また、小澤文幸（京大）は新規 Pd 触媒を開発し、構成材料として有用な DA ポリマーを高純度でかつ短工程で合成を可能にしたことは工業化にとって重要である。

(3) 科学技術の進歩への貢献という視点から見た研究成果

科学技術の進歩への貢献という視点から見た研究成果としては、「二酸化炭素の有用物質への変換」では、岩澤伸治（東工大）はアルキン及びアルケンのヒドロカルボキシ化反応の新規触媒開発を行い、アクリル酸合成に成功している。また、森川健志（豊田中研）は世界最高太陽光変換効率 4.6%での CO₂ からギ酸合成反応を達成している。そして、稲垣伸二（豊田中研）は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を達成した。斎藤進（名大）は、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発を達成した。

「選択的な不斉炭素-炭素結合生成等」では、柴崎正勝（微研）は向山アルドール反応の課題であったエノラートの事前調製に伴う原子効率の低さを解決すると共に、協奏機能型触媒による強力な活性化機構を機軸として酸性度の低いアミドの直截的エノラート化を達成した。また、山本尚（中部大）は新規バイメタリック触媒の開発に成功し、不斉エポキシ化反応等これまで難しかった反応を可能にした。本概念を応用すればより遠隔位に官能基を有する化合物の選択的変換も可能となると考えられる。小林修（東大）は触媒的不斉炭素-炭素結合生成反応の触媒として、金属アミドをシンプルな酸塩基触媒として位置づけて開発した。そして、強塩基性を示すアルカリ金属アミドを不斉修飾し、従来触媒的反応に適用困難であった低活性基質を用いる触媒的不斉炭素-炭素結合生成反応を実現した。一方で、計算化学の分野でも大きな進展が認められた、澤村正也ら（北大）は量子シミュレーション法の評価・改良・新手法開発に関しては、人工力誘起反応（AFIR）法に基づく反応経路自動探索法が炭素-水素活性化を含む不斉触媒反応の機構解明の強力な手段になることを確認し、新たな触媒設計に有用であることを見いだした。

「 π 電子系分子の化学合成と新機能創成」では、田中健（東工大）は新規錯体触媒を多数開発した。そして、S字型ダブルアザヘリセンの不斉合成に成功した。S字型の構造により円偏光発光強度が著しく増大することを初めて示した実験例であり、有機円偏光発光材料の分子設計に重要な指針を与えるものである。また、深澤愛子（名大）は近接したアルキン部位をもつ非平面大環状 π 電子系、高配向性アモルファス半導体を指向したラグビーボール型環状オリゴチオフェン、ヘプタレン骨格を基盤とするねじれた二次元 π 電子系といった幾つかの新奇 π 電子系について大量合成法の確立に成功し、これらの特異な構造に起因する物性や反応性を明らかにした。依光英樹（京大）は安定な芳香環であるベンゾフラン骨格へ、ホウ素原子を直接埋め込みに成功した。この技術開発は、合成が困難ながらも魅力的な含ホウ素環骨格を一段階で触媒的に合成する手法に扉を開かせるものであり、今後の π 電子系分子の開発に応用できる。

以上、これまでの限界を突破した代表的成果を記載したが、上記以外にも世界的に高い評価を得た成果が数多くある。各研究者の研究成果は「7. (7)」に具体的に記載した。

(4) 科学技術イノベーション創出に貢献する卓越した成果

本研究領域の期間中に生み出された数々の研究成果は、今後、科学技術イノベーション創出に貢献する可能性が数多く見込まれる。

具体的には、「二酸化炭素の有用物質への変換」では、椿範立（富山大）が合成ガスとCO₂によるギ酸エステル経由の新規低温メタノール合成法を確立している。さらに、安価なカプセル触媒を用いることにより合成ガスから一段階で70%と高選択的にエタノール合成ができる技術を達成した。その際、外部熱不要な合成ガスの合成法も確立している。この研究課題は企業との共同研究もなされており、「6. ②(iv)」で記載したようにJACI内でも検討している。また、姫田雄一郎（産総研）はギ酸から高压水素 (>10 MPa) を発生できる高性能なプロトン応答性2核触媒を見出した。この触媒は、実用化に適した100度以下の低温条件かつ有機添加物を含まない水中反応で、COを副生しない優れた特性を有している。

「選択的な不斉炭素-炭素結合生成等」では、小林修（東大）は連続フローシステムを確立し、抗炎症剤(R)-ロリプラムの多段階不斉全合成を達成した。さらに、本研究で得られた成果を企業において工業化する可能性に関する調査および技術的橋渡しを行うことを目的に研究を伸展させ、今日、企業との共同研究に至っている。また、柴崎正勝（微研）は共有結合を使わない固相担持不斉触媒の創製に成功し、フロー反応系での触媒的不斉ニトロアルドール反応に適用した。種々の医薬品中間体の工業的合成への応用が期待できる。一方、松永茂樹（北大）はロジウム触媒の性能を凌駕するコバルト触媒の創製に成功した。安価な触媒への代替にとどまらず、工程数の削減や廃棄物の削減につながる化学変換法として、価値の高いものである。このコバルト触媒の創製は、世界の研究者が模倣し、爆発的に研究が進む契機となったパイオニア的成果である。また、山本尚（中部大）は、タンタル触媒の存在下において、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ことを見出した。この新規アミド化反応の開発は、JST研究成果展開事業(A-STEP)ステージII(シーズ育成タイプ)において、研究課題「基質支配による触媒的ペプチド合成システムの実用化検証」に発展した。今後、産業界との連携によるペプチド合成への発展が期待できる。

「 π 電子系分子の化学合成と新機能創成」では、深澤愛子（名大）が独特の分子設計とオリジナリティーの高い触媒の創出により、チオラクトンが交差共役した新たな有機色素を開発し、実用化を目指し企業と共同研究を行っている。また、田中健（東工大）はオリジナリティーの高いロジウム触媒を用い自己集合によりナノチューブを形成するという前例のない優れた性質をもつシクロパラフェニレン誘導体の合成に成功した。以上、独自の分子開発、触媒開発を目指し、長期的な観点で海外との競争に勝てるような状況になってきた。一方で、小澤文幸（京大）は新規リン配位子を有するPd触媒を開発し、有機電子デバイスの構成材料として有用なDAポリマーを高純度でかつ短工程で合成できるようになった。製造コストと安全性の面で大幅な改善が図られ、DAポリマー実用化への流れが加速するもの

と期待される。

以上、科学技術イノベーション創出に貢献する卓越した成果を記載したが、上記以外にも科学技術イノベーション創出に関する成果が数多くある。各研究者の研究成果は「7. (7)」に記載した。

(5) 本研究領域に続く研究資金の獲得状況

(2017年11月30日現在)

研究代表者名	制度名	研究課題名	研究期間
岩澤伸治	科学研究費助成事業(科研費) 基盤研究 S	二酸化炭素資源化反応の新展開	2017～2021年度
梅田実	NEDO 戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)／革新的設計生産技術	市場流通材のスーパーメタル化開発	2014～2018年度
北川進	JST 戦略的創造研究推進事業 ACCEL	PCPNANO空間による分子制御科学と応用展開	2013～2018年度
小林修	科研費特別推進研究	水を溶媒として活用する有機化学の革新	2015～2019年度
小林修	国立研究開発法人日本医療研究開発機構(AMED) 創薬基盤推進研究事業	フロー精密合成を志向した高機能不均一系触媒の開発	2017～2019年度
高田十志和	JST 戦略的創造研究推進事業 CREST	緩やかな束縛反応場 を活用する高分子の連続改変系の構築と革新的機能化	2015～2020年度
椿範立	JST 地球規模課題対応国際科学技術協力プログラム(SATREPS)	バイオマス・廃棄物資源のスーパークリーンバイオ燃料への触媒転換技術の開発	2016～2021年度
椿範立	JST 未来社会創造事業 探索加速型 重点公募テーマ(探索研究)	二酸化炭素からの新しいGas-to-Liquid 触媒技術	2017～2021年度
姫田雄一郎	JST 戦略的創造研究推進事業 CREST	ギ酸の脱水素化反応による高圧水素の高効率製造技術の開発	2013～2018年度
山本尚	JST 研究成果最適展開支援プログラム(A-STEP)「ステージ I (シーズ顕在化タイプ)」	テーラーメイドペプチドの生産が可能、タンタル系触媒を鍵とするペプチド合成システムの実用化検証	2016～2018年度

(6) その他特記事項(国内外の顕彰・受賞等、終了時点では研究の途上であるが、将来性が見込まれ、大きな成果に繋がる可能性があるもの、等)

①研究代表者

(i) ACS National Award Roger Adams Award

2017年度、山本尚(中部大)が受賞、ノーベル化学賞に繋がる重要な賞

(ii) アメリカ化学会関連

・ACS National Award Arthur C. Cope Scholar Awards

2018年度 茶谷直人(阪大)

・ACS National Award Frederic Stanley Kipping Award in Silicon Chemistry

2018年度 檜山爲次郎(中央大)

(iii) リサーチフロントアワード

2016年7月、松永茂樹(北大)と鳶巣守(阪大)のACT-Cの研究の成果が認められ、松永茂樹(北大)、鳶巣守・茶谷直人(阪大)が受賞。若手研究者の励みになった。

(iv) 文化勲章

2017年度、藤嶋昭(理科大)が受賞

(v) 日本学士院賞

2016年 北川進(京大)が受賞

(7) 課題事後評価結果

■**研究代表者：稲垣 伸二**（株式会社豊田中央研究所稲垣特別研究室・室長、シニアフェロー）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、研究代表者が世界に先駆け合成に成功した多孔材料であるメソポーラス有機シリカ (PMO: Periodic Mesoporous Organosilica) を用いた独自アプローチにより、固体のナノ空間をベースにした高効率な生体模倣触媒の構築を行うものである。具体的には、特異なナノ空間構造を利用した高活性錯体触媒系の構築、および酸化と還元反応系を連結した犠牲試薬フリーの光触媒系の構築を実施した。

その結果、キレート配位子であるビピリジン配位子を導入した PMO (BPy-PMO) の合成に成功し、PMO が固体配位子として大きな可能性を有することを提唱した。これまで、キレート配位子を導入した MOF (Metal-Organic Framework) の報告はあったが、触媒担体としての利用には限界があった。BPy-PMO は、大きな細孔径 (約 4 nm) と共有結合の安定な骨格を有するため、多くの触媒反応への適応が可能である。また、犠牲試薬フリーの光触媒系の構築に向けた成果を次々に示すとともに、実用化を見据えたスケールアップ合成技術の端緒となる成果も上げた。

これらの成果により、PMO の有効性を示す、研究代表者の独自性ある多様な基盤技術が示されたものと認めることができ、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。本方式は製造コスト低減や金属不純物の混入防止に有効であるだけでなく、錯体触媒の固体化により、効率に優れたフロー式反応が採用できるため、従来のバッチ式反応が主体の製造プロセスの大転換を促進する可能性がある。今後、有機合成化学者と連携しつつ、さらに学術的・社会的波及効果が見られる研究に展開されることを期待する。

■**研究代表者：犬丸 啓**（広島大学大学院工学研究院・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、CO₂ の還元反応による変換や吸着に有効な反応場を構築するために、メソポーラスシリカや SrTiO₃ ナノキューブなどを組み合わせることで、多孔体等のナノ空間や結晶のすきま、異種粒子の接合といったナノレベルの複合構造を構築し、それらを活用した機能開拓を目指し研究を実施した。

その結果、特定の結晶面が露出した金属酸化物ナノ粒子である SrTiO₃ ナノキューブをメソポーラスシリカで包含することで安定化させ、この複合体を用いることで CO₂ の光触媒還元成功した。また、従来、層状複水酸化物 (LDH) から CO₂ を脱離・回収するには、400℃ 以上に加熱して層状結晶構造を破壊する必要があるが、Mg と Al からなる LDH において、層状結晶構造を保ったまま 200-350℃ の低温で CO₂ を脱離する現象を発見した。この他、水熱合成によって ZrO₂ ナノ粒子を開発し、CO₂ とメタノールからの炭酸ジメチル合成に高い触媒活性を示すことなども明らかにした。

これらの成果は、半導体光触媒や固体触媒の基礎的研究として、CO₂ 還元や吸着に関する新しい光触媒・材料の構造や設計手法を提案するものであり、期待通りの成果が得られていると評価できる。ただし、今回開発した CO₂ 還元光触媒の活性は低く、提案されている手法の一般化もまだ不十分である。また現在までに得られている成果を、学術論文にまと

めていく取組を今後加速していくことも望まれる。今後は、光触媒の性能を高めるとともに、共同研究等を通じて他の反応系への応用も含めた展開を期待したい。

■**研究代表者：岩澤 伸治**（東京工業大学大学院理工学研究科・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、遷移金属触媒を用いてエチレン、アセチレンからアクリル酸を高効率的に合成する手法の開発が目的である。この目的の実現に向けて、CO₂を用いるさまざまなカルボキシル化反応、及びこれら反応の開発に不可欠な還元剤に関する研究を多面的に推進し、CO₂の効率的な資源化の方法論開発を実施した。

その結果、PGeP-ピンサー型 Pd 錯体を新たに創出し、これを触媒とするアルケン及びアルケンのヒドロカルボキシル化反応の開発を行い、アクリル酸合成に成功した。続いて Rh 錯体を触媒とする sp²炭素-水素結合の直接カルボキシル化反応の検討を行い、配向性官能基を持つアルケン及び単純芳香族化合物の炭素-水素結合の直接カルボキシル化反応を開発した。さらに Ni 錯体を用いるエチレンと CO₂とのメタラクトン形成を利用するアクリル酸合成において高い触媒回転数を達成するとともに、Ru 錯体を用いる初のアクリル酸合成も実現した。特に、ギ酸塩をヒドリド、及び CO₂源として用いることにより、PGeP-ピンサー型 Pd 錯体を用いる不飽和炭化水素のヒドロカルボキシル化反応が効率良く進行する反応はギ酸塩をヒドリド源としてのみならず二酸化炭素源としても利用した初めての例である。

本研究課題はアルケンと CO₂からのアクリル酸誘導体合成の開発という極めて難易度の高いものであったが、上記した一連の成果を総合すると期待通りの成果が得られていると認めることができる。今後に繋がる研究成果も随所に見られる。特に、PGeP-ピンサー型 Pd 錯体を用いる不飽和炭化水素のヒドロカルボキシル化反応は、ギ酸塩を用いることにより還元剤の問題を克服出来たこと、また化学量論量の金属還元剤を用いない可視光駆動型カルボキシル化反応の端緒となる成果も上げられており、今後の展開に期待できる。一方で、CO₂の直接利用にいかにして繋げるかは今後の課題である。

■**研究代表者：梅田 実**（長岡技術科学大学工学部・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、膜電極接合体（MEA）を装着した固体高分子形燃料電池（PEFC）のカソード反応を用いて、理論電極電位に近い還元電位で CO₂を電気化学的に還元しアルコールを合成することを目指し、貴金属電極触媒と燃料電池運転方法の開発に基づく研究を実施した。

その結果、従来の CO₂電解還元では 1.5-2.0 V 程度の大きな過電圧を必要とするのに対し、Pt あるいは Pt-Ru カソード電極を用いることで、0.3 V 以下の低い過電圧で CO₂の還元生成物であるメタン、ギ酸、酢酸を得ることに成功した。また、電気化学測定と質量分析による生成物分析や、計算科学と表面増強赤外分光法（SEIRAS）による吸着種解析を行い、カソード電極における CO₂還元過程において、電極に吸着する反応中間体の脱離が重要であることを見出している。さらに、同系においてカソードに H₂、アノードに CO₂を通気した場合に、発電量は少ないながら燃料電池として動作することも明らかにした。

これらの成果は、MEA を用いた CO₂ 還元反応に関する詳細な知見であり、H₂ をアノード、CO₂ をカソードに用いた PEFC を CO₂ 還元反応系として作動させた初めての例である。研究全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。しかし、反応生成物の量がかなり少なく、また反応機構にまだ不明な点が残っており、メタノールなどのアルコール合成には至っていない。またこれまでに得られている成果を、学術論文にまとめていく取組を今後加速していくことも望まれる。今回得られた基礎的知見に留まらず、CO₂ のバルク電解還元も行い、ブレークスルーを成し遂げることを期待する。

■**研究代表者：横野 照尚**（九州工業大学大学院工学研究院・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、露出結晶面制御により触媒活性を高めた高感度な TiO₂ 光アノード電極と、反応生成物の選択性を有する CO₂ 還元触媒として種々の金属フタロシアニンを複合化したガス拡散電極を開発し、これら 2 つの電極を組み合わせた CO₂ 還元光触媒システムの実現を目指し研究を実施した。

その結果、紫外光応答型の高機能な TiO₂ 光アノード電極と、金属フタロシアニン (Co, Ni, Sn) の種類によって CO とギ酸の生成比を制御可能な高機能ガス拡散電極の作製に成功した。そして、開発した光アノード電極とガス拡散電極を組み合わせた複合システムを構築し、低バイアス下かつほぼ 100% のファラデー効率で CO₂ を連続的に還元する反応装置を実現した。また、照射下、液中で表面電位分布をナノスケールの分解能で計測できるオープンループ電位顕微鏡 (OL-EPM) という新しい技術を開発し、光触媒電極表面の活性／不活性サイトの分布の観察にも成功している。

これらの成果は、ガス拡散電極と光電気化学系を組み合わせた、CO₂ 還元選択性を有した効率的な光触媒還元システムの実現可能性を示すものである。また、液中での電極表面電位をナノスケールで解析できる手法を開発したことは高く評価できる。研究全体として、当初の目標は概ね達成できており、期待通りの成果が得られていると評価できる。今後は、主たる共同研究者グループで得られた光触媒・助触媒に関する知見を最大限活用し、太陽光照射下で駆動する実用的なシステム開発へと発展させていただきたい。

■**研究代表者：生越 専介**（大阪大学大学院工学研究科・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、既に研究代表者が開発した多様なニッケラサイクルの構造と反応性との相関に関する研究成果に基づき、新しい不斉炭素-炭素結合形成反応を効率よく論理的に構築する手法の開発と確立を目指した。

その結果、触媒的に発生させた不斉ニッケラサイクルを鍵中間体とし、不斉 [2+2] 環化反応、[2+2+2] 環化反応、光学活性ベンゾオキサシロール合成、低圧 CO を用いる不斉カルボニル化などに加えて、フェノールからヒドロナフト [1, 8-bc] フラン骨格をわずかに二段階の多点不斉環化反応の手法やテトラフルオロエチレン (TFE) とアルデヒドとヒドロシランとの三成分カップリング反応にも顕著な成果を上げた。

特に、ニッケル触媒系に CO 導入を可能にしたこと、錯体化学の観点からニッケラサイクル中間体と生成物の立体化学を関連付けたことなど、特筆すべき成果も多く、期待通り

の成果が得られていると評価できる。今後は、多点不斉環化反応の医薬品合成への応用や新規含フッ素光学活性アミノ酸合成等への展開に期待したい。

■**研究代表者：小澤 文幸**（京都大学化学研究所・教授）

○**評点：A+** 期待を超える十分な成果が得られている

本研究課題では、次世代有機エレクトロニクスの構成に必要な π 共役系高分子を簡便かつ精密に合成するための重合法（直接的アリール化重合：DArP）を目指し、炭素-水素結合活性化を素反応とする脱ハロゲン化水素型クロスカップリング反応（直接的アリール化反応）の高性能な触媒の開発を実施した。

その結果、準安定なキレート特性を示す配位子 P(2-MeOC₆H₄)₃ (L1) を発見し、これまで直接的アリール化反応に不向きであったトルエンや THF などのポリマー良溶媒中で高活性を示す特異な Pd 触媒を開発することが出来た。この触媒を用いて、有機電子デバイスの構成材料として有用なドナー・アクセプター型交互共重合体 (DA ポリマー) を高精度に合成することができた。また、L1 に TMEDA を組み合わせた混合配位子触媒を開発し、炭素-水素結合活性化を素反応とする DArP に内在する本質的な欠点であったポリマー不溶化の問題を劇的に改善した。一方、P(2-Me₂NC₆H₄)₃ (L2) を配位子として、99%以上の頭尾規則性を有するポリ(3-ヘキシル)チオフェン (P3HT) も合成することができた。

以上の成果は、詳細な反応機構解析に基づいた π 共役系分子の高分子化に有効な触媒系が開発されたものとして、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。本研究課題から得られた触媒や DArP 反応は、有機金属モノマーを必要とせず、反応操作が簡単なが重合精度が極めて高く基質適用範囲も広いことから、今後有機エレクトロニクス材料の合成ツールとして幅広く利用されていくものと期待される。

■**研究代表者：垣内 史敏**（慶應義塾大学理工学部・教授）

○**評点：A** 期待通りの成果が得られている

本研究課題では、炭素-水素結合や炭素-酸素結合などの不活性結合切断を利用したカップリング反応を基軸とした π 共役系を拡張させた芳香族系 n 型半導体材料の創出と n 型有機電界効果トランジスタ (OFET) への展開を目的に、n 型半導体特性を示すことが期待される電子求引性基を末端にもつ新しい π 共役系の構築法の開発を中心に取り組んだ。

その結果、1,4-ジメトキシアントラキノンの炭素-酸素結合切断を経るアリールボロン酸エステルとのカップリング反応とカルボニル基の変換を利用した、ジベンゾペンタフェンの短工程合成法などを開発した。さらに、ベンゾチオフェンを導入したキノイド構造オリゴチオフェンが OFET で良好な特性を示すことを明らかにした。

これらの成果は、OFET に適した芳香族系 n 型半導体特性を示す材料の、新たな物質設計指針や合成方法指針を示したものとして、期待通りの成果が得られているものと評価できる。一方で、中間評価の際にも指摘したような、企業とのネットワーク形成などを通じて、n 型有機半導体材料の実用化に向けて産業界で何が求められているのかを十分に把握することで、本研究課題の深みが増すことを期待したい。

■**研究代表者：川口 博之**（東京工業大学大学院理工学研究科・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、錯体化学、遷移金属クラスター化学、有機典型元素化学に携わる研究者と連携し、多様な元素の特性を最大限に引き出し、安定小分子の物質変換反応を可能とする反応場の構築を目指している。反応場としては、遷移元素と典型元素から構成される分子性化合物である無機金属クラスター錯体を主な対象とし、安定小分子である N_2 や CO_2 の活性化に関する研究を実施した。

その結果、特異な多座配位子を有する V 錯体を用いて、 N_2 の三重結合を切断したニトリド錯体を生成することを見いだした。さらに、このニトリド錯体に CO を反応させてシアン酸塩を生成し、V 錯体は回収出来ることも見いだした。また、Zr 錯体を用いて CO_2 をヒドロシランと反応させてメタンとシロキサンを合成する反応や、二核 Ru 錯体を用いる環状アミンからラクタムに変換する反応なども見いだしている。

これらの成果は、独自のクラスター創製に基づく安定小分子の活性化に関する基盤技術を示したものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。その一方で、中間評価の際にも指摘したような、当該研究の応用展開についても、視野を広げることを今後期待したい。

■**研究代表者：北川 進**（京都大学高等研究院・拠点長/特別教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、多孔性配位高分子（PCP）を用いた CO_2 の多電子還元によるメタノール合成触媒の開発を目指し、高い熱的・化学的安定性と混合ガスからの高い CO_2 分離能を有する PCP の開発、及びこの PCP 骨格中への触媒活性点の導入による複合触媒の開発と反応性の評価に基づき研究を実施した。

その結果、合成した La と有機架橋配位子からなるハニカム状一次元細孔型 PCP が、幅広い pH 耐性（pH 2-12）と CO_2 に対する選択的な吸着特性を持つことを明らかにし、高い水中安定性と CO_2 分離能を併せ持つ PCP の開発に成功した。また、Zr を含む PCP 骨格中に、 CO_2 還元触媒および光増感剤として機能する 2 種類の Ru 錯体と有機ヒドリド反応剤を導入し、四元系 PCP 複合触媒の合成に成功した。さらに、 CO_2 還元触媒である Ru 錯体を導入した二元系 PCP 複合触媒を用いることで、 CO_2 濃度 5% の低濃度条件でも、濃度 100% と同等の触媒活性で CO およびギ酸へと還元可能であることを見出した。

これらの成果は、PCP 複合触媒の新しい設計指針を示すとともに、PCP の機能開拓に新たな方向性を与えるものである。また、低濃度の CO_2 を還元できる PCP 型光触媒の開発に成功したことは、PCP を用いることの有効性を初めて明確に示した大きな成果であり、研究全体として、概ね期待通りの成果が得られていると評価できる。一方で、メタノール合成に向けた多電子還元反応については未達成である。今後は PCP 複合触媒の光触媒としての機能を高め、他の手法と比較した際の優位性と実用性が示されることを期待する。

■**研究代表者：北村 雅人**（名古屋大学大学院創薬科学研究科・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、「環境・安全・健康」の観点にも鑑み、カルボニル化合物の金属エノラ

ートとアリルエステルやハライドを用いる従来の間接的脱塩型反応から脱却して、直接的脱水型反応に刷新する新たな分子不斉触媒の開発を目的としたものである。そのために、「プロトン性炭素求核剤(NuCH) + アリルアルコール(Al1OH) → NuCA11 + H₂O」の直接的脱水型反応をエナンチオ選択的に実現する、新型分子不斉触媒の開発を実施した。

その結果、ビスアミジン型 C₂ 対称性 sp² 窒素系キラル 2 座配位子 Naph-diPIM-dioxo-iPr を設計し、メラドラム酸等に代表される活性メチレン・メチン型カルボニル化合物の α 位アリル化を高不斉収率で達成することができた。また、レドックス介在型ドナー・アクセプター 2 官能性触媒(RDACat) コンセプトのもとに行列的触媒探索を実施した結果、CpRu/ブレンステッド酸混合触媒を用いる脱水型 Tsuji-Trost 反応を実現化し、単純ケトンのアリル化にも成功し、4 級不斉炭素を含む全炭素スピロ化合物法を確立した。

これらの成果は、ファインケミカル分野での多段階合成の戦略に新たな展開をもたらす明確な配位子設計に対するコンセプトや脱水型での反応を可能にするための斬新な反応系のデザインが示されたものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。質、量ともにスケールの大きな研究展開となったと認められるが、今後創薬プロセスへ実装されていくことを期待したい。

■**研究代表者：久新 莊一郎** (群馬大学大学院理工学府・教授)

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、シリル基を芳香族化合物に置換することにより様々な物性を向上させた有用な機能性材料を開発することを目的として、シリル基を持つ高効率室温りん光化合物の分子設計やキュービック液晶の構造と物性の解明、シリル置換ポルフィリン誘導体の光物性の解明、およびシリル基の新規導入法の開発を主軸として研究を実施した。

その結果、9-フェニル-9, 10-ジシラトリプチセンの室温りん光特性には、Si と結合したフェニル基が寄与していることを明らかにした。また、シリル置換 p-テルフェニル誘導体の Si 原子上の側方置換基がメチル基やエチル基である場合、ケイ素-炭素結合の分極によって分子間相互作用が働くことで分子がミセルを形成し、立方最密充填を伴ってキュービック相となることを見出した。さらに、一重項酸素生成の高い量子収率(0.72 および 0.82)を示すシリル置換テトラフェニルポルフィリンとシリル置換テトラフェニルクロリンの合成に成功し、マウスへの投与実験からも、がんの光線力学療法に用いる増感剤として有望であることを見出した。

これらの成果は、有機分子の発光特性や液晶形成能などへのシリル基の導入による効果を示唆するものであり、シリル置換芳香族化合物の機能材料としての可能性を示した。研究全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。しかし、個々の基礎研究としての成果は十分であるものの、大きな視点での新しい発見や展望を見出したとは言い難い。今後は、より幅広い関連化合物を合成するとともに、企業や他機関との共同研究による多方面からの機能解析も行い、応用上のインパクトがある材料が見出されることを期待する。

■**研究代表者：倉橋 拓也** (京都大学大学院工学研究科材料化学専攻・准教授)

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、CO₂などを炭素源とした有用物質生産への貢献及び不斉炭素-炭素結合形成反応による複雑な分子骨格の自在合成の実現を目的としている。この目的の実現に向けて、ポルフィリン金属錯体の電子構造の揺らぎに着目し、機能性触媒を設計・合成して触媒反応に応用した。

その結果、Ru ポルフィリン錯体を触媒に用いることによるトランス付加型 Diels-Alder 反応の開発に成功し、天然物などの分子骨格に多く見られる、縮合六員環骨格であるトランス型オクタロンを選択的に構築できる新規触媒反応を見いだした。また、Fe ポルフィリン錯体を設計して触媒に用いることで、従来は達成できなかった形式のアルデヒドとジエンの hetero-Diels-Alder 型環化付加反応が進行することを見いだした。また、磁化率測定や赤外吸収分光、核磁気共鳴分光、XAFS といった分光測定に加えて、量子化学計算を実施することにより、反応機構解析に取り組んでポルフィリン金属錯体のルイス酸触媒機能を解明した。

これらの成果は、ポルフィリン錯体のルイス酸触媒としての基本的な特徴を明らかにするとともに、従来触媒では困難であった反応を実現したものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。今回の成果を通じて、強いルイス酸性と高い触媒生産性の両立の手がかりを得たと認められるが、今後方法論が確立できれば、工業的に様々な展開が考えられるものと期待できる。

■**研究代表者：小林 修**（東京大学大学院理学系研究科・教授）

○**評点：A+** 期待を超える十分な成果が得られている

本研究課題では、研究代表者らが従来開発してきた独自の基礎科学による有機合成の技術革新を目的として、工業レベルでも使用することのできる真に有効な不斉触媒の創出とそれを用いる不斉炭素-炭素結合生成反応の開発、さらに、それらを鍵段階とする次世代の理想的な精密有機合成手法の実現に向けた開発を実施した。

その結果、高活性な新規不斉金属アミド触媒の開発、新規不斉アルカリ土類金属触媒の開発、新規高分子固定化金属ナノ粒子触媒の開発および不斉反応への展開、低反応性原料を用いる触媒的反応開発等において重要な成果が得られた。また、高分子固定化キラルカルシウムカルシウム触媒を用いることにより、不斉 1,4-付加反応を鍵段階とする連続フローシステムを確立し、抗炎症剤(R)-ロリプラムの多段階不斉全合成を達成した。また、共同研究者グループは本研究で得られた成果を企業において工業化する可能性に関する調査および技術的橋渡しを行うことを目的に研究を行い、企業との共同研究に発展させるに至った。

これらの成果は、極めて独創的で幅広く、しかも実用的なポテンシャルを持つものが多数あることから、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。上述のロリプラムの多段階全合成をはじめとした連続フロー合成方法の、さらなる発展に大いに期待できる。

■**研究代表者：近藤 美欧**（分子科学研究所生命・錯体分子科学研究領域・助教）

○**評点：B** 成果がやや不足している

本研究課題では、多核金属錯体による多電子酸化還元触媒群の創製を目的とし、金属イ

オンの精密集積によるクラスター触媒の開発、分子内部に反応場を構築した超分子触媒の開発、そしてクラスター触媒と反応場を組織化した超分子クラスター触媒の開発に基づき、高選択・高効率CO₂還元系の構築を目指し研究を実施した。

その結果、鉄五核錯体(Fe₅O(bpp)₆)が、大きな酸素発生速度(触媒回転頻度:1,900 s⁻¹)、高い電流変換効率(96%以上)、十分な耐久性(触媒回転数:1,000,000以上)を有する良好な酸素発生触媒であることを見出し、その知見に基づいた新たな多核金属錯体および異種金属錯体触媒の開発にも成功した。また、反応場として基質の認識サイトおよび疎水サイトに着目し、Ru単核錯体にスルホ基を導入した場合、および鉄ポルフィリン錯体にピレニル基を導入した場合に、それぞれ酸素発生反応とCO₂還元反応に対する触媒活性が向上することを明らかにした。

これらの成果は、多核金属錯体の設計に基づいた新しい酸化還元触媒を提案するものであり、特に鉄五核錯体による酸素発生触媒反応を見出したことは注目に値する。一方で、CO₂還元反応系の構築という観点では、超分子触媒については還元生成物や反応の詳細解明には至っておらず、また超分子クラスター触媒の開発についてはほぼ未着手であるため、研究全体としては、成果がやや不足していると評価せざるを得ない。開発された酸素発生触媒については、独創的で、現状での機能も優れた面が多々あるため、人工光合成技術開発への貢献も含めて、今後の更なる発展に期待したい。

■**研究代表者：櫻井 英博** (大阪大学大学院工学研究科・教授)

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、2種類以上の金属を混ぜ合わせてナノメートルサイズの大きさにした合金クラスターを用いて、金属の組み合わせ次第で従来の金属触媒では出来ない触媒機能を発現させることを目的に研究を実施した。

その結果、多核合金クラスターを用い、これまでの単独の金属ではできない触媒機能を発現させることに成功し、その原因を理論解析により明確にした。一例として、Pd/Au合金クラスターが単独のPdでは不可能な低温での炭素-塩素結合の活性化及びUllmann反応を実現した。また、クラスター表面のPdとAuの協働作用による酸化的付加の活性化エネルギーの著しい減少と、引き続き生じる塩素の隣接金属へのスピルオーバー現象が本反応の鍵を握っていることを理論計算により明らかにした。

これらの成果は、多核金属の協働作用で生み出すクラスター触媒の新反応として顕著な反応特性を実験的及び理論的に示したものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。一方で、中間評価の際にも指摘したような、この反応系の応用展開にも端緒が見いだせる取組についても、今後期待したい。

■**研究代表者：斎藤 進** (名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻・教授)

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、CO₂をアルコール等に変換して資源化することを目的として、第一に分子表面触媒と水素と熱を用いて、第二に分子-固体表面触媒と光と水を用いて、目的へのアプローチの妥当性を検証する研究を実施した。

その結果、CO₂からメタノールを間接的に得る方法を多数開発した。また分子触媒を用い

るカルボン酸の触媒的水素化法も4種類(中心金属はRu, Ir, およびRe)開発した。また、自己誘導型カルボン酸の水素化という新しい触媒作用原理を発見し、この原理を分子性Ru触媒およびRe触媒に応用して、カルボン酸の一般的な水素化法による選択的アルコール合成を達成した。また、バイオマス由来の多価カルボン酸およびレブリン酸を水素化する分子性Ir触媒の開発にも成功した。

これらの成果は、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達成したものとして、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。本研究課題により、安定アミドを水素化するための、さらに活性の高い実用的な触媒を開発する基盤が得られたと考えられる。今後、天然に豊富に存在する安定アミドを再生可能資源として活用することができれば、持続可能な炭素循環社会に寄与できると期待される。

■**研究代表者：笹井 宏明** (大阪大学産業科学研究所・教授)

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、遷移金属触媒と有機分子触媒が協調的に働いて新規反応を促進するDual Catalysisの創製を目的としている。その実現に向けて、スピロ型不斉配位子や多機能不斉触媒を活用し、これら触媒が促進する炭素-炭素結合形成を起点とする不斉ドミノ反応を開発して、有用キラル資源の効率的合成に関する研究を実施した。

その結果、キラルなPd-spiro bis(isoxazoline)錯体を用いるエナンチオ選択的極性転換反応を基軸とする複雑な複素環化合物の触媒的不斉合成に成功した。本反応では、入手容易な基質に対してPd触媒を作用させるだけで、炭素-炭素結合形成による環構築等の結合形成が連続で起こり、医薬品への応用が期待できる多官能性二環式カルボニル化合物が効率的に生成する。また、レドックス触媒と酸触媒の両機能を有する単核V触媒を多環式フェノールに作用させると、酸化的カップリングと分子内脱水環化の連続反応が進行して、オキサ[9]ヘリセンが高収率かつ高エナンチオ選択的に合成できることを見いだした。

これらの成果は、独自の触媒設計に基づき、複雑なキラル分子骨格を安価な原料から簡便に合成する手法の確立に繋がるものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。今後同手法を実用的なものとするには、使用する触媒量の低減化が必要と考えられ、その端緒が切り拓かれることを期待したい。

■**研究代表者：佐藤 哲也** (大阪市立大学大学院理学研究科・教授)

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、脱水素カップリングにおいて高活性を示すRh触媒系、あるいは他の遷移金属触媒系を開発し、芳香族炭化水素二分子間の脱水素アリール-アリールカップリングおよび配向基に依存しない炭素-水素結合活性化を経る脱水素カップリング開発、さらにそれらの新規 π 電子系機能分子の創製に関する研究を実施した。

その結果、含リンや含硫黄の配向基を用いた炭素-水素結合切断を経る直接カップリングに成功した。これまでの当該カップリング反応は、含酸素や含窒素の配向基を利用して行われてきた点において新規性があり、なおかつ含リンや含硫黄の配向基は容易に除去あるいはさらなる誘導体化も可能なため、幅広い π 電子系分子合成法となる。また、含酸素や含窒素配向基の中でも、除去可能なカルボキシル基やブトキシカルボニル基を用いるこ

とで、多様な π 電子系分子合成が可能となることも示した。さらに、脱水素カップリング反応において、用いる酸化剤である銅塩を触媒とし、空気を再酸化剤として用いる系を見出した。

これらの成果は、産業界で潜在ニーズの多い反応である低エミッション型脱水素カップリング反応で数々の反応を見いだしたのものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。今後同手法を実用的なものとするには、使用する触媒量の低減化が必要と考えられ、その端緒が切り拓かれることを期待したい。

■**研究代表者：佐藤 美洋**（北海道大学大学院薬学研究院・教授）

○**評点：B 成果がやや不足している**

本研究課題では、これまであまり検討されていなかったアルケンとCO₂との反応によるニッケラクトンの生成を詳細に検討し、最終的には化学製品の原料として重要なアクリル酸誘導体合成の効率の良い触媒反応の開発を目的に研究を実施した。また、アルケンとCO₂の反応に展開することを目指した、硫黄修飾金担持ナノ粒子金属（SAMetal）の創製にも取り組んだ。

その結果、Ni 錯体を用いたアルケンへのCO₂固定化反応によるアクリル酸誘導体の合成法の開発を行った。具体的には、LiI（200 当量）及びトリエチルアミン（Et₃N, 400 当量）存在下で、エチレン（7.5 atm）とCO₂（1.5 atm）をクロロベンゼン中で反応させると、アクリル酸が最高収率 6988%（TON=70）で得られることを見出した。しかしながら、類似の触媒を用いるアクリル酸の合成が他のグループからすでに報告されている。また、Ni 以外の他の遷移金属錯体を用いた反応の検討も行なっており、Fe 錯体を用いるとエチレンとCO₂との反応により「フェララクトン中間体」が形成できることが明らかとなりつつあるものの、現段階では、触媒反応化には至っていない。一方のSAMetalの創製については、Ni ナノ粒子触媒 SANi、Fe ナノ粒子触媒 SAFe、及び Ru ナノ粒子触媒 SARu 等の開発に成功した。これらの触媒は、通常不安定なナノ粒子金属が担持されているにも関わらず空気中でも安定に取り扱うことができ、しかもナノ粒子金属特有の高い反応性を有している。また、触媒の再利用が可能であることも大きな特徴である。

上記したように、アルケンとCO₂からのアクリル酸誘導体合成の開発はそもそもこれまであまり検討されておらず、極めて難易度の高い課題設定ではあった。よってその取組は、チャレンジングなものであったものの、他のグループに先行結果を許してしまうなど、独自のブレイクスルーは未達成と判断され、以上を総合すれば、期待した成果がやや不足していると評価する。Ni ナノ粒子により還元剤（Zn）不要でのアクリル酸合成は今後の反応解析にかかっているが、新しいサイエンスに繋がる可能性を秘めているので、今後期待したい。

■**研究代表者：澤村 正也**（北海道大学大学院理学研究院・教授）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、触媒および触媒反応設計を行うにあたり、実験に先立ち量子シミュレーションを行うことにより、従来試行錯誤で行ってきた探索実験の大幅な効率向上とともに、高精度なシミュレーションによる最適化による実験での到達困難な超高活性・高選択

性触媒の追求を目的とした。特に、「反応経路自動探索法」を適用することで、既存の反応機構概念のみでは予測困難な新奇反応の可能性を探り、その結果を実験によって実証するという新たな研究の芽の創出に取り組んだ。

その過程で、反応性の極めて乏しい sp^3 炭素-水素結合の直接ホウ素化反応を実現する新触媒を確立した。また、ポリスチレンをトリフェニルホスフィンで三点架橋した固定化リン配位子が、塩化アリールの Pd 触媒クロスカップリングや Ir 触媒不活性 sp^3 炭素-水素結合のホウ素化に有効であることを見いだすとともに、ビスホスフィンへと拡張し、炭素-水素結合切断を含む Ni 触媒クロスカップリングに有効な固相担持配位子を開発した。量子シミュレーション法の評価・改良・新手法開発に関しては、人工力誘起反応 (AFIR) 法に基づく反応経路自動探索が炭素-水素活性化を含む不斉触媒反応の機構解明の強力な手段になることを確認した。また Cu 触媒不斉カルボニルアルキル化における第二配位圏溶媒和効果を DFT 計算で検証した。

これらの成果は、本研究課題の発足当初に掲げた目的に十分適う、新たな設計方法を示したものとして、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。今後、ポリスチレン 3 点架橋モノホスフィンやポリスチレン 4 点架橋ビスホスフィンの成果を手がかりに、本研究課題のテーマである炭素-水素活性化や不斉合成という範疇を超えて応用展開されることを望む。また、AFIR 法に基づく反応経路自動探索の深耕も期待する。

■**研究代表者：柴崎 正勝** (微生物化学研究会微生物化学研究所・所長)

○**評点：A+** 期待を超える十分な成果が得られている

本研究課題では、廃棄物を副生しない光学活性化化合物群の生産法を確立することで、重要医薬品の短工程不斉合成へ貢献することを目的として、ソフトルイス酸/ハードブレンステッド塩基協奏触媒系、ハードルイス酸/ハードブレンステッド塩基協奏触媒系等の組み合わせを用いた、新規な触媒の開発を実施した。

その結果、ソフトルイス Lewis 酸/ハードブレンステッド塩基協奏触媒系において、酸性度が低く触媒的なエノラート化が非常に困難なアミドを求核種前駆体とする触媒的不斉炭素-炭素結合形成反応を開発した。すなわち、温和な塩基性条件下にエノラート形成を促し原子効率 100%の不斉 C-C 結合形成を可能にした。この反応は、アミドの α 置換基として各種ヘテロ官能基 (SMe, N₃, RF, R, F, Cl, Br, I) が導入可能で、合成化学的に有用なキラル合成素子を与える実用的な反応に仕上がっている。またハードルイス酸/ハードブレンステッド塩基協奏触媒系では、anti-選択的触媒的不斉ニトロアルドール反応に有効な Nd/Na 異種 2 核金属触媒において、安価な Nd 源を用いる多層カーボンナノチューブ固定型触媒によるフロー反応の実施に成功した。

これらの成果により、医薬品あるいは生物活性天然物の不斉合成に適用し、その合成化学的有用性が示され、今後の工業的な応用に期待を持たせることが可能となった。また、学術的な側面からも世界トップクラスの成果が多く得られたと認められ、これらを総合すると、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。現在多くの小分子合成が従来のバッチ型反応からフロー型反応へと変遷しつつあり、本成果であるキラル Nd/Na 固相触媒による不斉フロー型炭素-炭素結合形成反応は、それに大きく貢献できると予測できる。産業界へ技術トランスファー可能な形にするべく、今後触媒条件の最適化を期待する。

■**研究代表者：柴田 高範**（早稲田大学理工学術院・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、遷移金属触媒を用いた反応によって、複数の芳香環、特に硫黄原子などを含んだヘテロ芳香環により構成される新規なキラル π 空間の創製とそれによる新しい機能・物性の創出を目的とし、環状ヘテロアリレン類や折れ曲がり型縮環芳香族化合物、面不斉シクロファン化合物などの合成と評価に基づき研究を実施した。

その結果、環状ポリヘテロアリレンの高効率合成を達成した上で、光学活性なトリベンゾヘテロピンに焦点を当て、硫黄原子を有するトリベンゾチエピンの高エナンチオ選択的な合成に成功した。また、合成の簡便性とキラル化合物への展開の容易性を考慮し、当初のL字型化合物かららせん化合物へと合成目標を移行した結果、2つの市販品から僅か2段階でテトラアザ[7]ヘリセンを合成することに成功し、さらにこの化合物が高い蛍光量子収率と高い蛍光異方性因子を持つことから優れた円偏光発光材料として有望であることを見出した。その他、新しい面不斉フェロセン化合物であるベンゾシロロフェロセンなどの合成にも成功している。

これらの成果は、独自の触媒的不斉合成を駆使した新規なキラル π 電子系化合物の合成と物性評価により、新しい機能材料の可能性を開拓するものであると認められる。また、物性的にも興味深い複数の化合物を見出していることから、研究全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。材料としての応用に向けた物性・機能性評価に耐えうる、高純度かつ安価・大量合成を考慮した合成経路開拓を積極的に行ったことは高く評価できるので、今後は、特許出願や企業との共同研究等も積極的に検討いただき、新規機能材料の創製へと繋げていただきたい。

■**研究代表者：高田 十志和**（東京工業大学大学院理工学研究科・教授）

○**評点：B 成果がやや不足している**

本研究課題では、環状分子の内孔を貫通する際に触媒機能を発揮する、貫通型構造を鍵とした動的な反応場を提供するインターロック触媒を開発し、サイズ・形状選択的分子変換、有用有機材料合成を達成する革新的触媒系の確立を目指し、平成24年度にACT-C研究領域に採択された。その後平成27年度になって、研究代表者がCREST研究領域「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」における研究課題「緩やかな束縛反応場を活用する高分子の連続改変系の構築と革新的機能化」に採択されたため、研究課題間の調整を行い、ACT-Cでは低分子系の反応を、CRESTでは高分子系の反応に主に取り組むことになった。

その結果、CRESTに採択されるまでの間（ACT-Cにおいて中間評価を実施した時期までの間）に、インターロック触媒を用いた高分子基質に対する連続的触媒反応系において、本触媒は一旦基質に結合すると、擬似的に1分子として振る舞うことで、0次反応を含み反応が進行することが明らかとなった。これにより、高分子量体の基質で反応速度の加速効果が生まれることも見出した。また、ビナフチル基を有するキラルな輪成分とピリジン部位を有するロタキサン型触媒の各コンポーネント間が協同的に作用することで、meso-ジオールのアシル化反応が高選択的に進行することを明らかにした。一方CREST採択以降の取

組では、アシル化反応や Steglich 転位反応に活性を示すロタキサン触媒の合成、また、常圧での CO₂ 固定化反応が進行する Pd 含有環状触媒の合成などの成果が得られた。

CREST 採択前までの成果における、インターロック触媒を用いた高分子基質に対する連続的触媒反応系に関しては、高分子反応のこれまでの概念を一変させるものと評価することができる。しかしながら CREST 採択に伴い ACT-C に残された研究の取組については、報告されている基質・反応が特殊な反応系に限定されており、なおかつ既存の触媒反応より特に優れた成果が得られている例は少ないと認められる。以上を総合すると、ACT-C 全体における研究に対しては、成果がやや不足しているものと判断する。今後、ユニークでオリジナルなインターロック触媒を高分子基質に絞り、分子間連続的触媒反応の開発を目指すことが適切であると考えられ、成果の発展に期待したい。

■**研究代表者：田中 健**（東京工業大学大学院理工学研究科・教授）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、クロスカップリング反応に代わる新しい概念に基づく芳香族化合物の構築法として、遷移金属触媒によるアセチレン部位の分子内および分子間環化三量化を基本概念とする不斉芳香環構築反応の確立を目指した。

その結果、キラル配位子を有する Rh(I), Rh(III), Au(I) カチオン錯体を触媒とする [2+2+2] 環化反応や炭素-水素結合活性化を含む独自の芳香環構築反応を開発し、光学活性ヘリセンなどの高次構造を有する多環状芳香族化合物合成に独創的な研究を展開した。また、S 字型キラルヘリセンの合成と円偏光発光特性の観察、官能基を有する [12] シクロパラフェニレン合成とナノチューブ構造形成の発見なども、本研究課題からのユニークな成果である。

これらの成果は、他の追随を許さない研究代表者自身の鋭い感性に基づいた分子設計・反応設計によるものと認めることができ、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。新しい多官能性フルベン配位子およびロジウム(III) 錯体触媒は、合成が簡便かつ空気や水に対して安定で極めて取り扱いが容易であり、医農薬や機能性有機材料の合成において、探索段階から工業化に至る幅広いステージでの利用が期待できる。今後は、多くの大学研究者や企業の研究者とのネットワークも構築して、新合成法の開発領域のリーダーとして世界的に活躍していただきたい。

■**研究代表者：茶谷 直人**（大阪大学大学院工学研究科・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、炭素-水素結合直截変換反応を従来のクロスカップリング反応に代わる物質変換反応に発展させることを目的としている。従来とは異なり、分子内に 2 つ配位できる原子を有する二座配向基によるキレーションを利用した新規炭素-水素結合変換の開発を実施した。

その結果、今までほとんど例のなかった Ni を触媒とする不活性な飽和炭素-水素結合活性化を経る触媒反応を開発した。また、二座配向基の設計と金属種の検討によって、不活性な炭素-水素結合活性化の可能性を広げる研究も展開し、一定の成果を上げた。さらに、Rh を触媒とする系では、従来の反応機構では説明できない全く新しい炭素-水素結合活性化

化反応を見いだした。

これらの成果は、本研究課題の採択当初に掲げた目的に適う基盤技術であると認められ、期待通りの成果が得られていると評価できる。今後、本研究で得られた知見をもとに、研究代表者の持ち味でもある、未踏の炭素－水素結合活性化反応の開発が期待される。

■**研究代表者：椿 範立**（富山大学大学院理工学研究部・教授）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、CO₂の資源化・有効利用を目的として、CO₂とメタン（天然ガス）と酸素（空気）との反応により効率的に合成ガス（COと水素の混合ガス）を合成し、この合成ガスとCO₂の混合ガスから低温合成法でメタノール、ジメチルエーテルを効率よく合成する触媒反応の開発を実施した。さらに、ジメチルエーテルからエタノールを一気に合成する効率的プロセスの開発を併せ持つ触媒系の確立にも取り組んだ。

その結果、CO₂とメタンと酸素からの合成ガス合成に関しては、新規モノリス SiC-Ni 系触媒を開発することにより、外部熱不要な自己改質方式による合成ガスの高速合成を達成した。触媒開発の際、大きな課題である炭素析出問題と触媒金属の凝集を解決し、触媒の失活問題を克服した。そして、この合成ガスとCO₂によるギ酸エステル経由の新規低温メタノール合成法も銅系触媒を用いることで確立することができた。本法の一段階転化率は90-100%であり、一段階転化率が14%である現行法のICI高温法に比較しても優位性のある新規触媒系である。さらに、安価なCu/Al₂O₃とCu/H-MORとCu/ZnOのカプセル触媒を用いることにより合成ガスから一段階で70%という高選択的なエタノール合成反応を達成した。

これらの成果は、CO₂の資源化・有効利用の観点で極めて興味深く、産業的にも実用化の期待が持たれるものと認められる。また、合成ガスからのエタノール一段階合成については、本研究課題の採択当初には予期していなかった、新たな展開も見込める重要な成果であるとも認められる。以上を総合すると、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。今後、合成ガスからエタノールへの一段階合成反応の触媒メカニズムを解明する基礎研究に一層取り組み、その成果に基づき、より高活性な触媒系の確立と実用化への展開の手がかりを得ることが期待される。

■**研究代表者：中村 潤児**（筑波大学数理物質系・教授）

○**評点：B 成果がやや不足している**

本研究課題は、表面科学・計算科学・触媒設計の融合によって、CO₂活性化の学理を構築し、室温でメタノールを合成する方法を提示することを目的に研究を実施した。研究は2つの柱からなり、第一の柱は、表面科学に基づく反応素過程のダイナミクスおよびキネティクスの詳細な情報を基にメタノール合成の高効率化を目指すものであり、第二の柱は、ナノカーボン、特にグラフェンの触媒利用の確立を目指すものであった。

その結果、第一の柱では、CO₂と水素からメタノールを合成する最初の素過程であるフォルメート生成がEley-Rideal機構であることを提案し、その証拠となる実験事実をいくつか得ることに成功した。一例としては、固体表面に吸着したフォルメートが分解脱離する（フォルメート合成反応の逆反応過程）際に生じるCO₂の熱的非平衡反応過程を実験的に

示し、学術論文誌に掲載した。しかしながら、Eley-Rideal 型反応機構の実験的立証という点では、第一の論点である CO₂ 活性化モードに関し、未だ学術論文として受理されるに至っていない。一方の第二の柱については、グラフェンによる Pd イオンの自発的還元による Pd ナノ粒子の生成や、Pt-Cu 担持窒素ドープグラフェンにより微量のエタノール生成など、系統的研究とまでは言いがたいものの幾つかの興味ある現象を見つけている。

第一の柱、第二の柱ともに、学術的な視点からは重要な知見であると認められるものの、室温メタノール合成の方法論を提示するという採択当初の目的からすると、その道筋を明確にする方向での研究が着実に推進・達成されたとは認めがたい。また、共同研究者は表面科学並びに計算機科学の手法を駆使して、CO₂ の表面吸着に関する興味ある成果を得て論文発表等の成果を挙げてきているが、研究代表者の研究との連携、融合が十分になされているとは言いがたい。以上を総合した結果、成果がやや不足しているものと判断した。今後への期待としては、まず第一の柱については、上記した CO₂ 活性化モードに関する論文の学術誌への掲載を早期に実現することが強く望まれる。一方第二の柱については、グラフェン触媒のポテンシャルをより具体的に示してもらいたい。これらの取組を通じて、室温メタノール合成に対してどのアプローチが有効であるのかを基礎研究の立場から示してもらいたい。

■**研究代表者：成田 吉徳**（中部大学総合工学研究所・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、低い過電圧かつ高効率で水の酸化分解もしくは CO₂ 還元反応を可能にする高い触媒回転数を有する新たな触媒の開発と、触媒修飾性と電気的特性に優れ、水中での安定した CO₂ 還元が可能な新しい触媒修飾電極の開発に基づく、人工光合成システムの創製を目指し研究を実施した。

その結果、水の酸化分解に高い活性と耐久性を示す Mn ポルフィリン二量体錯体触媒や Mn₂O₃ および CaMnO₃ といった酸化マンガン系薄膜触媒を開発し、錯体へのリン酸基アンカーの導入や成膜時のイオン性液体との混合によりフッ素ドープ酸化スズ (FTO) 上に修飾・固定することで、高性能な水分解触媒電極の作製に成功した。また、開発した鉄ポルフィリン二量体錯体触媒が、これまでの分子（錯体）触媒中最も低い過電圧 (0.4 V) で選択的に CO₂ から CO へと還元可能 (93%以上) であることを見出した。その他、FTO 上に SnO₂ メソ多孔層や自己集積単分子膜 (SAM) を修飾する技術の開発により、水中で安定に動作する CO₂ 還元触媒電極の開発にも成功している。

これらの成果は、完全な人工光合成システムの創製に向けた、高性能な水分解触媒電極と CO₂ 還元触媒電極の新しい構築法を提案するものであり、研究全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。しかし、個別の技術は高いレベルである一方で、それらを統合した全体システムの実用可能性や優位性を実証するには至っていない。今後は、より定量的な評価と多方面からの考察、積極的な共同研究の実施などにより、本質的な課題を含めた本方法の実用性をより明確にし、実用化を具体的に目指すプロジェクトへと発展させていただきたい。

■**研究代表者：西原 康師**（岡山大学大学院自然科学研究科・教授）

○評点：A 期待通りの成果が得られている

本研究課題では、高効率な電子エネルギー素子の実現に向けて、遷移金属触媒を用いた新規フェナセン型 π 電子系分子の効率的な合成法、置換基およびヘテロ元素の導入法、および高分子化技術の開発と、合成した分子を用いた超伝導素子・FET・薄膜太陽電池素子の設計・作製・特性評価に基づき研究を実施した。

その結果、レニウム触媒を用いた結合形成反応により、複雑に官能基化されたインデノン誘導体や多置換ベンゼン誘導体といった、[n]フェナセン型分子へ誘導可能な縮環構造の合成中間体を一段階で得られる手法の開発に成功した。また、イリジウム触媒やロジウム触媒などを用いた C-H 活性化および脱水環化反応により、チエノアセン類の効率的合成に成功した。さらに、カリウムをドーパしたピセンが超伝導転移温度 14 K の超伝導体であること、アルキル置換したピセン薄膜 FET が $21 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ の世界最高レベルの移動度を示すこと、およびフェナントロジチオフェンを主鎖とする新規フェナセン型ポリマーが変換効率 6.6% の太陽電池特性を示すことなども見出している。

これらの成果は、遷移金属触媒を用いた独自の合成手法の開拓により、独創性の高い拡張 π 電子系多環式炭化水素化合物を開発し、それらの有機超伝導素子や有機半導体素子への応用可能性を示すものである。新規化合物の合成と機能評価が精力的に行われており、研究全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。また、論文発表等の成果の公表も活発に行われている。今後は、各研究グループが得意とする部分の追究に留まらず相乗的な効果を生み出すことで、イノベーション創出への道筋が明確に示されることを期待する。

■研究代表者：野村 琴広（首都大学東京理工学研究科・教授）

○評点：A 期待通りの成果が得られている

本研究課題では、オレフィンメタセシス重合法を利用した、高立体規則性を持ち共役長や末端が揃った直鎖状・星型・球状の共役ポリマー・オリゴマー集積体の精密合成手法と末端官能基化手法の確立と、光特性解析による光機能と構造との相関解明に基づく新しい光機能材料の創製を目指し研究を実施した。

その結果、Ru 錯体触媒を用いた置換ジビニルフルオレンの非環式ジエンメタセシス (ADMET) 重合において、反応途中で連鎖移動剤を添加することで、両末端を官能基化したポリフルオレンビニレンのワンポット合成に成功した。また、Mo 錯体触媒を用いた ADMET 重合反応をアルデヒドによって停止させることで、片末端のみを官能基化できることも見出しており、続く化学変換反応により各末端に異なる官能基を導入できる手法の開発に成功した。さらに、置換ジビニルベンゼンからの末端官能基化したオリゴフェニレンビニレンの精密合成などにも成功しており、共役ポリマー・オリゴマーの定量的な末端官能基化による強白色発光性などの新しい光機能発現を達成している。

これらの成果は、従来手法では困難であった、高立体規則性と均一な共役長を持ち、両末端に特定の官能基を導入した共役ポリマー・オリゴマーの精密合成手法を実現するものである。また、共役ポリマー・オリゴマーの構造と光特性との相関を明らかにすることにより、光機能材料の設計指針のための重要知見が多数得られており、研究全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。今後は、応用・実用的な観点から、薄膜とし

での光機能評価にも踏み込むとともに、企業との共同研究等により新しい機能材料の創出へと繋げていただきたい。

■**研究代表者：羽村 季之**（関西学院大学理工学部・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、アラインやイソベンゾフランなどの高反応性分子の独特な反応性の開拓と、その潜在的反応性を利用した多点型の逐次活性化や多官能性誘導体の高次反応集積化による新規 π 電子系分子の精密合成を目指し、研究を実施した。

その結果、アラインやイソベンゾフランの逐次活性化を鍵とする反応集積化を駆使して、既存法ではアプローチの困難な置換ポリアセン、高次スターフェン、高次イプチセン、ベルト状芳香族分子をはじめとする二次元・三次元に π 共役系が拡張された多様な芳香族分子を効率良く合成する手法を開発した。さらに、これらの分子の展開として、ハロゲン化ペンタセンを活性層とする有機電界効果トランジスタ、スターフェン型芳香族ポリケトン正極材料の活物質とするリチウム二次電池、さらにD- π -A型のイソベンゾヘテロールを色素とする色素増感太陽電池を作製し、それぞれ優れた特性を見いだした。また、独自に開発したアリアルエチニルイソベンゾフラン合成法を基盤として π 拡張型ルブレンの合成にも成功した。

これらの成果は、本研究課題の採択当初に掲げた目標に適うものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。有機半導体としての機能開拓に加えて、色素増感太陽電池や有機電界効果トランジスタなどのデバイス開発にも一定の成果が得られたものの、これらの将来性に見通しがあるわけではなく、今後の取組には一考を要する。

■**研究代表者：東林 修平**（慶應義塾大学薬学部 准教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、遷移金属触媒を用いた三次元おわん型 π 電子系分子（ヘテロ）バッキーボウル類の効率的合成法の開発と、これらの基礎物性の解明と機能性の発現を第一目標とし、さらにおわん型以外の新規三次元型分子の合成も視野に入れ、平面型分子とは異なる特徴を利用した有機機能性材料の創製を目指し研究を実施した。

その結果、ジインデノクリセン類の骨格内部にヒドラジン構造を有する新規ヒドラジノバッキーボウルの設計・合成を達成し、さらにその過程でヒドラジン構造を有する三次元ビシナルジアザ芳香族類の合成に成功した。そして、物性・機能性評価により、らせん型ヒドラジノヘリセン類が酸・塩基の添加に応答して可逆的に電子移動不均化反応を生じる性質を持つこと、またカルバゾール・フェノチアジンオキシド・アクリドン骨格を持つヒドラジン含有おわん型・バタフライ型・平面型分子が比較的小さな分子構造で長波長の発光を示す優れた蛍光色素であることを見出した。その他、ジプロモカルバゾールのカップリング反応によってフレーク型・リング型シクロカルバゾリレン類の合成にも成功している。

これらの成果は、ヘテロバッキーボウルなどの歪んだ π 電子共役系を有する物質群を創出する新しい分野を開拓するものであり、研究全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。当初目標に掲げたおわん型のバッキーボウル類の合成に留まらず、多く

の新規分子を合成している点は目標を超えた達成であり、合成した分子の基礎物性の解明から機能性の評価までを国内外の多くの研究者と連携して実施したと併せて高く評価できる。今後は、本課題で見出した分子の特徴や応用展開の可能性に基づいた更なる発展を期待したい。

■**研究代表者：姫田 雄一郎**（産業技術総合研究所創エネルギー研究部門・上級主任研究員）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、水素の貯蔵を指向した高効率な CO₂ の水素化触媒の開発と多機能型錯体触媒を目指したプロトン応答性触媒の設計指針の構築を目指している。具体的には、プロトン応答性触媒設計指針に基づいて CO₂ を還元するための高効率触媒の開発とともに、ギ酸やメタノールを燃料や炭素資源として利用するための研究を実施した。

その結果、水中での CO₂ 水素化触媒、ギ酸脱水素化触媒、および CO₂ からのメタノール合成触媒の開発により、それぞれ世界最高性能の触媒を見いだした。この研究成果の過程においては、共同研究者による分光分析・計算化学に基づく反応機構の解明も機能した。また、国際研究支援策において、スイス連邦工科大学ローザンヌ校との共同研究で、錯体触媒を用いた CO₂ からの直接メタノール合成にも成功した。

これらの成果により、ギ酸の直接還元法によるメタノール合成法の開発の方向性が明確になったこと等を踏まえると、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。なお本研究課題を進めて行く上では、ギ酸脱水素化反応による高圧水素製造技術に関する成果が上がったが、これは ACT-C で平成 24 年度に採択された翌年度に CREST 研究領域「再生可能エネルギーからのエネルギーキャリアの製造とその利用のための革新的基盤技術の創出」における研究課題「ギ酸の脱水素化反応による高圧水素の高効率製造技術の開発」として採択され、現在、CREST において連続高圧水素製造プロセスへの展開が図られている。今後の双方の研究課題の発展に期待したい。

■**研究代表者：檜山 爲次郎**（中央大学研究開発機構・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、炭素－水素結合や炭素－炭素結合などの安定な結合を、金属触媒や有機合成化学で汎用されているアルケンやアルキンなどの炭素－炭素不飽和結合との協働作用により活性化・切断し、有用物質創製を可能にする反応の開発を目的に、研究を実施した。

その結果、三重結合に酸素が結合したアルキノキン基や通常のアリール基を用いて Pd 触媒との協働作用により、さまざまな位置の炭素－水素結合を選択的に活性化することに成功した。本手法により、複数の不斉炭素を有する縮合環状化合物や、固体状態で蛍光発光する中性またはカチオン性化合物など、いろいろな含酸素芳香族化合物の直截合成に成功した。一方、共同研究者らのグループは、新たな光学活性配位子を開発し、見いだした反応の不斉化を検討するとともに、面不斉環化反応を開発することにより、生物活性物質の開発に繋がる成果を得た。また、アルキン配位金属錯体の反応性に関する研究を錯体レベルで推進し、炭素－水素結合の活性化や炭素－炭素結合の活性化に関する有益な知見を得た。

これらの成果は、本研究課題が掲げた目的に適うものとして、期待通りの成果が得られていると評価することができる。今後、機能性有機材料化合物や生物活性化合物の創造に利用できる反応を創出することを期待する。

■**研究代表者：平野 雅文**（東京農工大学大学院工学研究院・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、種々の置換アルケンを組み合わせ、選択的に鎖状二量化させる反応の実現を目的としている。この目的に向けて、特に、二つの異なる置換アルケンのカップリングにより光学活性化合物を一段階で、100%の原子利用率で得る新規な位置および立体選択的鎖状炭素骨格の構築に関する研究を実施した。

その結果、Ru ジエン錯体触媒を用いる置換アルケン類の鎖状交差二量化反応の領域で多くの検討を試み、適用可能な基質を明らかにすることができた。特に、ジヒドロフランと共役ジエンの反応による3位に選択的に置換基が導入されたエナンチオ選択的なジヒドロフラン化合物の合成、エナンチオ選択的な共役ジエンと共役カルボニル化合物のカップリング反応、さらに共役ジエンと内部アルキン間のカップリングによる共役トリエンの合成を可能にした。また、共役分子と置換アルケンを選択的に原子利用率100%でカップリングし、鎖状炭素骨格と不斉中心を触媒的に構築する手法を見いだした。

これらの成果は、本研究課題で掲げた目的に適うものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。従来、不斉アリル化反応を利用した不斉ヒドロビニル化反応は知られていたが基質がエチレンに限定されていたため、本研究課題の成果で示されたような置換アルケンや共役分子を利用できる意義は大きいと考えられ、今後の展開が期待できる。

■**研究代表者：平尾 俊一**（大阪大学産業科学研究所・特任教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、レドックス特性およびルイス酸性を有する前周期遷移金属化合物による物質変換反応システムの構築に取り組み、具体的には前周期遷移金属としてバナジウム(V)による酸化反応などに着目した反応に関する研究を実施した。

その結果、高原子価のバナジウムによるボロンエノラートとシリルエノラートの選択的な酸化クロスカップリング反応や、ボロンエノラートからの共役エノンへの酸化反応が高収率で進行することを見いだした。また、オキソバナジウム錯体とアミン誘導体からのイミドバナジウム錯体への一段階合成手法と、このイミドバナジウム錯体を触媒とする常圧CO₂固定による尿素化合物合成にも成功した。

これらの成果は、前周期遷移金属化合物を用いて従来進行し得ないと思われていた反応を可能とした特筆すべきものであり、期待通りの成果が得られているものと評価できる。特に常圧でのCO₂固定による尿素化合物合成は、オキソバナジウム錯体に関して触媒化出来る極めて興味深い成果である。また、ボロンエノラートからの共役エノンへの変換反応は、公知のシリルエノラートからパラジウム(II)錯体を用いる手法より効果的であるため、今後広く用いられる可能性を秘めており、さらなる発展に期待したい。

■**研究代表者：深澤 愛子**（名古屋大学大学院理学研究科・准教授）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、有機エレクトロニクス of 決定的な進歩に貢献する機能性材料の創出を究極のゴールに設定し、新たな分子機能の獲得や、凝集系での優れた物性や機能発現のための高次構造制御の実現を可能とする新奇な非平面 π 共役骨格の開発に取り組んだ。特に、非平面二次元 π 電子系を新たに設計し、固体状態で強い分子間相互作用を生じうる新たな π 共役分子群の構築を行った。

その結果、近接したアルキン部位をもつ非平面大環状 π 電子系化合物を合成して、その熱、光などに対するユニークな反応挙動を明らかにした。また、多環縮環ペンタレンを合成し、この化合物が反芳香族性かつ高い安定性をもつことを明らかにした。さらに、チオラクトンが交差共役した有機色素を開発するとともに、硫黄を含む 9 員環でエンドキャップしたオリゴチオフェンが π 電子系材料の末端修飾基として高いポテンシャルをもつことも明らかにした。

これらの成果は、研究代表者自身の独自性の高い設計指針に基づいており、基礎研究のレベルとして極めて高いものにあると認めることができる。特に、非平面大環状 π 電子系化合物の成果については光機能性材料や有機半導体材料としての展開可能性に、多環縮環ペンタレンの成果については安定な反芳香族分子の設計指針に、それぞれ期待を持たせるものである。以上を総合して、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。研究代表者は、本研究課題推進と並行する形で、多くのアカデミア及び産業界の研究者と共同研究やネットワーク構築も手がけており、今後さらなる展開が切り拓かれることを期待したい。

*なお、研究代表者はライフイベントに伴い研究を一時中断したため、平成 30 年 10 月 27 日まで研究期間の延長を行い、平成 30 年 10 月に最終評価を行う。上記評価は予備評価である。

■**研究代表者：藤嶋 昭**（東京理科大学・学長）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、太陽光を用いた高効率な CO_2 の光電気化学還元技術の開発に向けて、半導体性のダイヤモンドと酸化チタンを積層した pn ヘテロ接合型光電極の開発と電解液としてのイオン液体の利用等により、還元電圧の低減と電荷分離の促進、および高濃度 CO_2 の利用に基づく高効率・高速還元プロセスの構築を目指し研究を実施した。

その結果、p 型半導体のホウ素ドープダイヤモンドと n 型半導体の酸化チタンの高結晶薄膜を作製する手法を確立し、ダイヤモンド上に酸化チタンを積層することで、優れた整流特性と電荷分離効率を示すハイブリッド光電極の開発に成功した。また、ダイヤモンド上に助触媒として銀ナノ粒子を担持した電極を作製し、この電極が波長 222 nm の紫外光照射により常温常圧下で光電気化学的に CO_2 を還元し選択的に CO を生成可能であることを見出した。その他、液中プラズマ装置を用いることで従来法の 100 倍以上の成膜速度でダイヤモンド膜を合成することも見出し、産業化に向けた大面積プロセスの実現可能性も示している。

これらの成果は、主にダイヤモンド電極を用いた光電気化学的 CO_2 還元に関する独自性

の高い基礎的な知見であり、研究全体としては、期待通りの成果が得られていると評価できる。しかし、開発した CO₂ 還元反応系は、紫外光照射や外部バイアスが必要など、太陽光を活用できる実用的な反応系の開発に向けては課題が残っている。一方で、ダイヤモンド電極の p 型半導体としての利用や複合化に関する知見、開発した大面積合成法については、今後波及的な効果が期待できる。また、活発にアウトリーチ活動を行っている点も高く評価できる。

■**研究代表者：松永 茂樹**（北海道大学大学院薬学研究院・教授）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、多彩な協同機能触媒の創製を通じた、医薬品等の生産に応用可能な有用化合物の効率的合成法の開発、具体的には、炭素-水素結合を直接変換する手法を駆使することによる医薬品の探索研究効率化を目指している。加えて、地殻中に豊富に存在する第一列遷移金属を巧みに利用して、高い触媒活性と選択性を実現するための触媒分子設計と触媒機能解明に向けた研究の確立も目指し、これらの目的に資する研究を実施した。

その結果、医薬品物質の骨格として有望な複素環の立体選択的合成（不斉炭素-炭素結合形成反応）および炭素-水素官能基化反応を重点的に開発した。例えば不斉炭素-炭素結合形成反応の開発においては、ワンポット多連続不斉アルドール反応に成功するとともに、不斉水素化では構築不可能な不斉四置換炭素構築における触媒回転数の改善に成功した。また、不活性炭素-水素結合活性化に有用な触媒系においても、新規触媒系の創製に成功した。特に、カチオン性高原子価 Cp*Co(III) 触媒については、計算化学的な触媒機能解析を同時並行で実施しつつ実験を進めることで、Co(III) と Rh(III) の違いを活かした反応開発にまで展開した。

これらの成果は、研究代表者自身の独自性の高い設計指針に基づいており、基礎研究のレベルとして極めて高いものであり、現に世界中の研究者が参照し爆発的に研究が進む契機となったパイオニアとしての業績といえる。Cp*Co(III) 触媒に関する成果は、Co(III) が単なる Rh(III) の代替となるだけではなく、工程数の削減や廃棄物の削減につながる化学変換法として価値の高いものになる可能性を秘めている。以上を総合して、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。今後は、多くの大学研究者や企業の研究者とのネットワークも構築して、世界的なリーダーとして一層活躍していただきたい。

■**研究代表者：三上 幸一**（東京工業大学大学院理工学研究科・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、新規医薬・材料開発に必要な不可欠なフッ素化合物の触媒的不斉合成を、新規不斉炭素-炭素結合生成 (CCF) 反応を基盤に達成し、工業的製造への展開を目的としている。

研究代表者グループは、副課題「革新的 CCF 法の開発と工業化への展開」のもと、新しい触媒的 CCF 反応の開発を基盤に、工業化への展開を視野に入れた有機フッ素化合物の実用的合成法の開発に取り組んだ。その結果、ジカチオン性キラル Pd 触媒による不斉トリフルオロピルベート-エン反応、触媒的不斉エン反応、オキセテン合成反応、3 成分クロスカップリング反応や、フルオロホルム等を用いた Li-enolate、芳香環(sp²)、アセチレン

末端(sp)のジフルオロメチル化などに成功した。また、空气中で安定なトリフルオロメチル亜鉛反応剤を開発し、クロスカップリング反応に展開した。さらに、本成果に基づく含フッ素医薬品合成が製薬企業で試行されるなど、概ね当初の計画通りに研究は進捗した。

共同研究者グループは、副課題「フッ素化合物の先駆的分子変換法の開発と不斉触媒合成への展開」のもと、連携しつつ有機フッ素化合物の不斉合成技術開発の研究を実施した。その結果、トリフルオロメチル化、フルオロアルキル化、フルオロアリール化、炭素-フッ素結合活性化などを、求核性、求電子性、ラジカル反応に展開し、不斉合成も達成した。また、工業化に向けた手法としては、フルオロホルムの利用法の開拓を試み、トリフルオロメチル化およびジフルオロメチル化法を見いだした。本グループは世界でもあまり類のない、レベルの高い成果を上げた。特に、フルオロホルムの炭素-水素活性化のための塩基開発をはじめ、数種の反応剤は市販されるに至るなど、その成果は特筆に値する。

以上を総合すると、研究課題全体として、期待通りの成果が得られていると評価できる。研究代表者ならびに共同研究者は、我が国でも有数なフッ素化学研究のリーダー的存在であり、今後各々の研究を一層発展させるとともに、産業界との連携をより密にして、工業化への展開を遂行していただきたい。

■**研究代表者：村井 利昭**（岐阜大学工学部・教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、独自に開発した、アゾール環を介して連結した電子受容部位と電子供与部位が大きくねじれた π 電子系化合物である5-アミノアゾールの標準合成法の確立と化合物ライブラリー構築、および光物性研究を実施した。

その結果、70種類以上の5-アミノアゾール誘導体の合成に成功した。これらは組込む置換基に依存した立体配座をとり、青色から赤色の蛍光発光色を示すとともに、蛍光ソルバトクロミズム、メカノクロミズム、サーモクロミズム、ベイポクロミズムといった特性も示すことが分かった。また、ルイス塩基性部位を有する誘導体は、酸の添加で発光色が変化し、ルイス酸との組合せにより溶液中白色発光も実現した。さらに、一電子酸化で半減期が最大385時間の近赤外領域に吸収を持つラジカルカチオン種を導くことにも成功した。

これらの成果は、一連の化合物群の光および電気物性の解明を行うとともに、蛍光発光化合物の組合せによる白色発光の実現、外部刺激応答による発光現象の変化を利用した重金属や低分子有機化合物のセンシングへの展開にもつながり、本研究課題で掲げた目標にも適う多くの新規知見を見いだしたものとして、期待通りの成果が得られていると評価できる。今後、得られた知見をもとにした応用展開にも期待したい。

■**研究代表者：村上 正浩**（京都大学大学院工学研究科・教授）

○**評点：B 成果がやや不足している**

本研究課題は、太陽光エネルギーを駆動力とする精密物質変換技術の開発を目指して研究を実施した。具体的には、光合成の二段階の機構に倣い、太陽光のエネルギーを吸収・蓄積して高エネルギー中間体を与える光反応（明反応）と、明反応で得られた高エネルギー

一中間体を触媒によって精密に変換する反応（暗反応）の開発にそれぞれ取り組んだ。

その結果、紫外光と Rh 触媒を複合的に用いる独自のアプローチでオルトシクロファン炭素-水素結合と炭素-炭素結合を位置選択的に交換して、より歪んだ異性体であるメタシクロファンを合成する手法を開発した。また、紫外光の照射下、ケトンと Cu の協同触媒作用によって単純アルケンのアリル位炭素-水素結合に直截的に CO₂ を付加する反応を見出した。さらに、光と光学活性 Rh 触媒を用いる独自のアプローチで N-アリルグリオキシルアミドからエナンチオ選択的に炭素-炭素結合を形成し、3-ヒドロキシピペリドン骨格を構築する手法を開発した。中間評価以降には、入手容易なオルトアルキル安息香酸塩化物を原料として、多様なベンゾシクロブテンを簡便に合成する手法を開発するとともに、これを展開した、置換ベンゾシクロブテンの不斉合成にも成功した。

これらの一連の成果は、独自の考え方で新しい炭素-炭素結合形成反応を見だし、それを不斉合成へと展開されている点で評価することが出来る。しかしながら、いずれも紫外光を用いたものである。可視光を用いた成果としては、オルトアルキルフェニルケトンに CO₂ を効率的に導入する方法があるが、中間評価時にも指摘した、太陽光エネルギーを化学エネルギーに変換するという本研究課題の課題設定を体現するという観点からは十分なものは認められない。また、本評価に当たって、成果の報告、発表のされ方にも問題があったように思われる。以上を総合し、成果がやや不足しているものと判断した。本研究課題から得られたものは、熱反応では不可能な反応への光の利用、炭化水素と CO₂ の直接反応、あるいは不斉炭素-炭素結合形成反応への展開の観点からは興味深いものであるので、今後の研究に期待したい。しかしながら、太陽光エネルギーを化学エネルギーに効率よく変換するという課題設定に対して、特に可視光の利用などにも精力的に取り組んでいただきたい。

■研究代表者：森川 健志（株式会社豊田中央研究所森川特別研究室・室長、シニアフェロー）

○評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている

本研究課題では、人工光合成技術の将来性を明確にするために、常温常圧付近での人工光合成反応の超効率化を目標として、半導体と金属錯体触媒の機能を融合したハイブリッド型光触媒をベースに、植物並みの効率での CO₂ の光固定化の実現と、粉末の水溶液懸濁系や資源量豊富な材料を用いた反応系の実証を目指し研究を実施した。

その結果、Ru 錯体/carbon 多孔体/Si-Ge 接合型半導体/IrO_x 構造の板状素子を開発し、この素子を水溶液中に投げ込む簡便な方式で、太陽光変換効率 4.6%での CO₂ 還元によるギ酸生成を達成した。また、Ru 錯体/硫化物半導体/電子メディエータ/BiVO₄ 構造の粉末光触媒を開発し、この触媒を懸濁させた水溶液への可視光照射によって、CO₂ 還元によるギ酸生成が起こることを確認した。さらに、水の酸化反応に高い活性を示す Fe 酸化物（β-FeOOH:Ni）ナノ粒子を開発し、Mn 錯体を用いた触媒電極と組み合わせることで、1%を超える太陽光変換効率での CO₂ 還元による CO 生成に成功した。この系に結晶 Si 太陽電池を組み込んだ電気化学的な系では、3%を超える太陽光変換効率を達成している。

これらの成果は、半導体材料、金属錯体触媒、電極材料などを巧みに組み合わせることで、水を電子源とした高効率な CO₂ 還元反応系の実現可能性を示すものであり、特に CO₂ からのギ酸生成の太陽光変換効率 4.6%は世界レベルでインパクトの大きい成果である。ま

た、半導体/触媒ヘテロ界面の電子状態解析などの動作解析に関する成果も独自性があり、基礎研究としての価値が高いと判断できる。以上を総合すれば、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。技術的に重要性が大きいテーマであり、今後とも継続的に研究開発を推進いただきたい。

■研究代表者：森 健彦（東京工業大学大学院理工学研究科・教授）

○評点：A 期待通りの成果が得られている

本研究課題では、化学ドーピングした電荷移動錯体と単成分で働く有機半導体を融合した新しいタイプの有機エレクトロニクスの開拓を目指し、電荷移動錯体を電極とした「セルフコンタクト有機トランジスタ」の開発や、有機半導体と電荷移動錯体の両方として働く π 電子系の物質およびアンバイポーラ有機半導体の開発に基づき研究を実施した。

その結果、ヘキサメチレンテトラチアフルバレン (HMTTF) を活性層に用い、テトラシアノキノジメタン (TCNQ) をインクジェット印刷法によってドーピングすることで、移動度 $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超えるセルフコンタクト有機トランジスタの作製に成功した。また、ベンゾチエノベンゾチオフェン (BTBT) が PF_6 や AsF_6 等のアニオンと高伝導の電荷移動錯体を形成すること、そして、特に AsF_6 塩が有機熱電材料としても有望であることを見出した。さらに、電子・ホール伝導とも $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 近い移動度を示すアンバイポーラ有機半導体として、フェニル基やヨード基を持つインジゴ誘導体を開発し、その他にもイソインジゴ、ビナフチル化合物、ジケトピロロピロールなどがアンバイポーラなトランジスタ特性を示すことを明らかにした。

これらの成果は、電荷移動錯体を電極に用いた有機エレクトロニクスデバイスの新しい設計指針を提案するものである。セルフコンタクト型トランジスタやアンバイポーラ有機半導体の開発といった基礎研究として興味深い成果を挙げており、研究全体としては、期待通りの成果が得られていると評価できる。今後はこれまでに得られた知見等をもとにして、物質設計や材料開発の新しい方向性を打ち出すようなより挑戦的な課題を設定いただくなど、フレキシブルなオール有機エレクトロニクスデバイスの実用化に向けた展開を期待したい。

■研究代表者：山田 陽一（理化学研究所環境資源科学研究センター・副チームリーダー）

○評点：A 期待通りの成果が得られている

本研究課題では、低エネルギー・低環境負荷で持続可能な物質変換のために、触媒が ppm-ppb レベルの量でかつ再利用可能な不溶性金属触媒システム群の開発を目的としている。そのために、高活性・高再利用な不溶性触媒型合成システムや、ナノ構造を活用した高活性触媒による高速合成システムの開発などに取り組んだ。

その結果、ナノ剣山間隙を3次元ナノ反応空間として活用した反応システムを構築し、これまでにないタイプの新しい不均一系触媒の開発に成功した。また、開発した両親媒性高分子 Pd 触媒が、鈴木-宮浦反応、アリル位アリール化反応に加え、 π 分子合成に重要な溝呂木-ヘック反応に有効であることを示し、かつその触媒量が 7 mol ppm で進行することを明らかにした。

これらの成果は、基礎研究のレベルとして高いものと認めることができ、期待通りの成

果が得られていると評価できる。特に、高分子 Pd 触媒に関する一連の成果にさらなる発展を期待したい。特に、開発された触媒系をマイクロリアクターに組み込み、実践的な触媒反応システムを構築することに取り組んでもらいたい。

■**研究代表者：山本 尚**（中部大学総合工学研究所・教授）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、酵素を凌駕する小分子の人工触媒の設計と開発を目指している。1)0.01mol 以下の触媒量で、2)回収可能な、3)生体に安全な触媒を用い、4)水かその他の無害な溶媒中、5)温室、数時間以内で完結するほどの、6)高い反応性を持ち、7)同時に完全な立体制御が可能で、8)炭素骨格を 99%以上の光学純度で進行する有機合成プロセスの開発を究極のゴールとしている。そのために、Si、B、Al 等の典型金属か、あるいはブレンステッド酸を用いた触媒設計と、それを用いる不斉合成、特に炭素-炭素不斉合成の新反応開発に取り組んだ。

その結果、高い反応性と選択性を併せ持つ酸触媒の設計及び合成に成功した。具体例を挙げるだけでも多岐に亘るが、中でも、独立した2種の金属が分子内に配位する新規バイメタリック触媒の開発においては、触媒の金属間距離と合致するホモアリルアルコール等の基質を用いることで、不斉エポキシ化反応等のこれまで難しかった反応が可能になった。また、Ta 触媒の存在下ヒドロキシル基含有エステルとアミンのアミド化反応がヒドロキシル基を有する基質選択的に進行することを見いだした。

これらの成果は、研究代表者自身の独自性の高い設計指針に基づいており、基礎研究のレベルとして極めて高いものにあると認めることができる。例えば新規バイメタリック触媒による反応の開発は、類似例が見られず、また、ここで得られた概念を応用すればより遠隔位に官能基を有する化合物の官能基変換も可能となると考えられ、今後更なる反応への応用が期待できる。これらを総合すれば、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。なお新規アミド化反応の開発は、JST 研究成果展開事業（A-STEP）ステージⅡ（シーズ育成タイプ）において、研究課題「基質支配による触媒的ペプチド合成システムの実用化検証」に発展した。産業界との連携による、ペプチド合成への発展を期待したい。

■**研究代表者：依光 英樹**（京都大学大学院理学研究科・教授）

○**評点：A+ 期待を超える十分な成果が得られている**

本研究課題では、高性能遷移金属触媒を使って、窒素原子の非共有電子対に由来する柔軟な電子状態を示す含窒素大型平面分子を合成する超高効率手法を開発することを目指し、研究を実施した。

その結果、まず、 β , meso, β -トリハロポルフィリンに塩基存在下遷移金属触媒を使わずにジアリールアミンを反応させると、ラジカル機構で一気に窒素埋め込み型三重縮環ポルフィリンを超高効率合成できることを発見した。この成果を手掛かりに、N-ヘテロ環状カルベン配位子を有する Pd 触媒を駆使して大型平面 π 電子系分子の周辺部に窒素原子を高効率で導入する手法を開発した。これらは、当初の狙い通り、紫外可視吸収帯の長波長シフトや蛍光量子収率の増大といった有用な光化学特性を示すことを明らかにした。さらに、当初は想定していなかった、窒素原子以外にホウ素や炭素などを鍵元素とする三重縮環体

の合成、ベンゾフラン骨格へのホウ素原子の直接埋め込法の開発など、新たな研究展開も見せた。

これらの成果は、研究代表者自身の独自性の高い設計指針に基づいており、基礎研究のレベルとして極めて高いものにあると認めることができる。特に、新たな展開として挙げた含ホウ素環骨格合成をはじめとした成果は、医農薬ならびに機能性有機材料の鍵骨格の革新的な分子変換として世界的にも高く評価されつつある。以上を総合して、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。今後は、多くの大学研究者や企業の研究者とのネットワークも構築して、世界的なリーダーとして一層活躍していただきたい。

■**研究代表者： 齋巢 守**（大阪大学大学院工学研究科・教授）

○**評点：A+** 期待を超える十分な成果が得られている

本研究課題では、従来の有機合成反応が、炭素-ハロゲン結合などの切断されやすい化学結合の変換に依存してきたことからの脱却を目的とし、炭素-酸素結合などの不活性な結合の直截的な化学変換技術を開発することで、有機合成における方法論を多様化させ、有用物質の製造効率を根本的に向上させる触媒技術の開発に資する研究を実施した。

その結果、まず、新たに開発したN-ヘテロ環状カルベン配位子を有するNi触媒により、アニソールのメトキシ基の切断をとともう有機ホウ素化合物とのクロスカップリングを開発し、一般性の高い炭素-酸素結合を炭素-炭素結合に変換する手法を世界に先駆けて開発した。また、炭素-水素結合活性化とともに第3級ホスフィンの炭素-リン結合を切断し、新たな炭素-リン結合を作るという興味深い反応系を見出すとともに、この概念がリンのみならず、硫黄やセレンなどの他のヘテロ原子へ応用可能であることも実証した。

これらの成果は、遷移金属触媒を用いた不活性結合の切断に基づく有機合成法の開拓に関し、研究代表者自身のユニークな視点を堅持した極めて高いレベルの取組の表れと認めることができ、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。本研究で開発されたクロスカップリングは、従来のハロゲンやトリフラートをを用いたクロスカップリングと比し、コストや環境調和性の面で優位性があるため、今後のさらなる展開が期待される。

■**研究代表者： 宮内 雅浩**（東京工業大学大学院理工学研究科・教授）

○**評点：A** 期待通りの成果が得られている

本研究課題では、半導体光触媒をベースにしてCO₂を還元して燃料を製造する光還元システムの構築を目的としている。システムの高効率化を実現するため、半導体の量子効果や複合化による還元力向上と、多電子還元を起こす新規助触媒の開発を実施した。

その結果、ユビキタス元素からなる助触媒/半導体光吸収相の複合体をベースとし、植物と同様に可視光照射下で水を電子源としてCO₂を還元する光触媒システムを開発した。具体的には、COを選択的に生成するCu_xOナノクラスター助触媒、ギ酸を優先的に生成するCu-Zn助触媒を開発した。そしてこれらの助触媒をまず、ワイドギャップ酸化物であるNb₃O₈⁻やSrTiO₃に担持させ、紫外線照射下での駆動を確認した後、可視光を吸収するZスキームへと展開するシステムを構築した。また別のシステム構築にも取り組み、Cu-Znを担持したCaFe₂O₄膜を光カソード、WO₃ナノツリー薄膜を光アノードとした二極型セルを組み、両極に可視光を照射することでカソード側では主にギ酸が生成、アノード側ではカソ

ード側で生成した分子の約半数となる酸素の生成を確認した。

これらの成果は、学問的・社会的に重要な課題に対するものとして、期待通りの成果が得られているものと評価できる。なお成果創出の過程においては、企業との共同研究により、 Cu_xO の合成や Cu-Zn 合金ナノインク of 製作を行っていることにも注目することができ、今後の展開に期待したい。

■**研究代表者：吉田 弘人**（広島大学大学院工学研究院・准教授）

○**評点：A 期待通りの成果が得られている**

本研究課題では、高歪み・高反応性な炭素-炭素三重結合を有する反応性中間体アラインを駆使した芳香環の融着法を開発することで、クマリン骨格を有する新しい芳香族 π 電子共役系分子などのライブラリを構築するとともに、色素増感太陽電池 (DSSC) 材料等へと応用展開することを目指し研究を実施した。

その結果、アラインとジメチルホルムアミド (DMF) の [2+2] 環付加・電子環状反応と、続くエステルエノラートとの [4+2] 環付加の多段階過程が連続的かつ制御されて起こる、アライン・DMF・エステルの三成分連結反応を開発し、クマリンの一段階合成に成功した。また、配位子フリーのシアニ化銅を触媒として用いることで、カルボスタニル化反応によりアラインをアルキニルスズの sp 炭素-スズ結合に速やかに挿入できることを見出した。この反応を用いて合成したジアリールアルキンは、続く反応によってシアノアクリル酸を吸着基とするジアリールアルキン型色素へと短工程で誘導可能であり、この色素を用いた DSSC デバイスがエネルギー変換効率 1.50% を示すことを明らかにした。

これらの成果は、アラインから有用な芳香族 π 電子共役系分子、特に新奇な色素を誘導する新しい反応を提案するものであり、実際に合成したクマリンなどを用いた DSSC 素子の作製・評価も行っており、研究全体としては、期待通りの成果が得られていると評価できる。しかし、作製した DSSC 素子の性能は低く、また得られた化合物の有機エレクトロニクス材料としての有用な機能も見いだせていない。今後は、積極的な共同研究などを通して、より広い視野で研究を展開し、独自のアプローチに基づく学問的な一般性が明確に示されることを期待する。

8. 総合所見

(1) 研究領域および研究総括の設定

① 研究領域設定の妥当性

本研究領域では、低炭素社会の実現や、医薬品・機能性材料等の持続的かつ発展的な生産など、我が国のみならず世界が直面している諸課題の解決に貢献しうる、触媒による先導的な物質変換技術の創出を目指すものである。その戦略は「1. 研究領域の概要(1)②」に記載したように、「第4期科学技術基本計画」の対応策としての根幹をなすものである。

具体的な達成目標として、(i)二酸化炭素還元法の創出、(ii)不斉炭素-炭素結合等の直截的生成法の開拓、(iii) π 電子系分子の化学合成と新機能創成、が設定されている。これらの達成目標の実現に向けて、「触媒」および「触媒反応」が全体のキーワードとなっているのが特徴である。

触媒研究の分野は日本が世界を牽引してきた分野であり、高い学術的な成果のみならず、数多くの反応手法が多様な製品製造過程で実用化されるなど社会の発展にも大きく貢献している。触媒研究の分野に高まる期待と重要性、また日本の研究基盤の強みを鑑みると、この分野の重点化を図ることが、我が国発の大きなイノベーションの創出につながると考えている。

そして、「戦略目標」、「具体的な達成」、「目標設定の背景および社会経済上の要請」ならびに「目標設定の科学的な裏付け」も的確に記載されている。また、「将来実現しうる重要課題の達成ビジョン」も適切と考える。

② 研究総括設定の妥当性

学界と産業界共に国際的に高い評価を得ている研究総括の下で、研究領域の明確な運営マネジメントが展開された。すなわち、本研究領域では研究課題数が多いため、研究総括と専門の領域アドバイザーが研究課題を分担し、四半期ごとの研究進捗レポートによる進捗把握とアドバイスの実施、及び年1回程度の領域会議等で、きめ細やかな研究推進フォローを行った。さらに、15回のサイトビジットと度重なる軌道修正会議の実施により、研究代表者が担当アドバイザーの建設的な意見を取り入れ、研究方針を変更・最適化することで、研究が好転するといった事例が数多く生まれた。また、研究課題間等の連携に関しては、各重点課題でのワークショップ、領域会議、公開シンポジウム等を開催し交流の活性化を推進した。グローバル人材育成を目指した国際強化支援、レクチャーシップ等の取り組みも的確な手腕を発揮した。この5年間で着実に成長している若手研究者も多い。一方、科学技術イノベーション創出への貢献に向けた取り組みとして、企業有識者を研究推進委員とした社会的貢献推進会議、公益社団法人新化学技術推進協会(JACI)との連携企画は、成果の社会還元をより活発にするものであり、研究総括の経験や人脈を活用した好例として特筆される。

以上、研究領域および研究総括の設定は極めてバランスが取れ、かつ適材適所の設定であったと考えられる。

(2) 研究領域のマネジメント(研究課題選考、研究領域運営)

① 研究課題選考

本研究領域の目標達成のためには、オールジャパンで集中的に取り組むことが必要と考え、公募は2012年度の1回限りとした。研究提案は、真に新たな物質変換を提案できる研究者であれば、既に優れた業績を挙げている研究者のみならず、発展途上にある若手研究者からの挑戦的な提案も広く募った。

各研究課題への研究費の配分については、3段階の予算クラス[研究費(大)、(中)、(小)]を設定した。(i)研究費(大)の研究課題:幅広く野心的な研究テーマで、複数の分野が連携・融合したチーム型として運営することでシナジー効果による成果を期待した。また、研究代表者には、複数の分野が連携・融合したチーム型運営を経験することで、的確なマネジメント能力の育成に資することも視野に入れた。(ii)研究費(中)の研究課題:研究提案はチーム型・個人型の形態を問わず中堅的な研究テーマを想定した。(iii)研究費(小)の研究課題:多数の若手研究者が応募しやすいように想定した。特に若手研究者には、ACT-Cでの経験を今後の研究に生かすよう期待し指導した。

選考にあたっては、(a)明確な目的をもった研究提案であるか(本当に求められている研究か)、(b)新たな種を生む研究なのか、既にある研究を伸ばす研究なのか、(c)既に種のある研究の場合は、飛躍的に研究のレベルを向上するものかどうか、(d)研究構想を実現する上で適切な研究費であるか、を評価基準とした。

その結果198件の研究提案があり、書類選考と面接選考を実施して、30代から60代に及ぶ幅広い年齢層から50件の研究課題を採択した。採択課題された研究代表者および共同研究者に関しては、触媒科学をキーワードにして、各々の専門分野が物理、化学、工学、材料科学、計測技術、計算科学と多岐に渡り、本研究領域の掲げる3つの達成目標に合致した、非常にバランスのとれたものになったと考えている。

また、30歳代~40歳代前半の若手研究者からの研究提案も多く、結果的に全採択件数の約3割にあたる14件は、若手研究者が研究代表者を務める課題であった。このことから、本研究領域が、次世代を担う人材育成を採択時の段階から重要視していたことが理解いただけると思う。一方で、年齢制限の廃止によるシニア研究者の採択も注目される。

更に採択課題とは別に、選考時に一定の評価は得たものの、本採択には至らなかった6件の研究課題を、フイージビリティスタディ(FS)課題として別途選定した。FS課題では1年間、研究データの補完等の調査研究を少額の研究費で実施して頂き、その調査研究の結果によって改めて採択課題に選定するか評価した。2013年度に実施したFS課題評価の結果、3件の研究課題を採択課題として追加選定した。

以上により、本研究課題の選考は、広く平等に公募を行い、新規な費用配分方式とFS

課題の導入により、従来に無い選考運営を行ったと言え、極めて優れていると考えられる。

②研究領域運営のマネジメント

厳選した研究課題の採択に基づき、50 を超える研究代表者で構成される研究チーム群に対して、的確な領域アドバイザーの選定と配置、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・ネットワーク型研究所というコンセプトでの領域運営等、適切なマネジメントが行われた。すなわち、領域アドバイザーについては、国内外で評価が高い研究者を含め、分野を代表する研究者が選定され、かつ学界と産業界共に国際的に高い評価を得ている研究総括の下で、研究領域の明確な運営方針が示された。そして、本研究領域では研究課題数が多いため、研究総括と専門の領域アドバイザーが対応する専門分野の研究課題を分担し、四半期ごとに研究進捗レポートによる進捗把握とアドバイスの実施や領域会議等で、きめ細やかな研究推進フォローを行った。さらに、15回のサイトビジットと多数の軌道修正会議により、研究代表者が担当アドバイザーの建設的な意見を取り入れ、研究方針を修正することで研究が着実に進捗する例が数多く生まれた。また、研究課題間等の連携に関しては、各重点課題でのワークショップ、領域会議、公開シンポジウム等を開催し交流の活性化を推進した。グローバル人材育成を目指した国際強化支援、レクチャーシップ等の取り組みも特筆される。一方、科学技術イノベーション創出への貢献に向けた取り組みとして、企業有識者を研究推進委員とした社会的貢献推進会議、公益社団法人新化学技術推進協会（JACI）との連携企画は、研究総括の豊富な経験が紡ぎ出した好例として特筆される。

以上により、本研究領域運営のマネジメントは特に優れていると考えられる。

(3) 研究領域としての研究成果

①科学技術の進歩に資する成果

研究領域全体としてすでに1,749報（2017年8月末時点）の学術論文が国際誌に発表されており、しかも著名な国際学術誌への掲載が数多い。口頭発表の数はさらに多く、特に国際学会での招待講演数が1,067件にのぼることは研究成果が世界中の研究者から注目されている証である。

特筆すべき研究成果として、柴崎正勝（微研）が革新的な触媒反応を開発することで、今までは合成不可能であった低活性基質の活性化に成功し向山アルドール反応の拡大化、および触媒の不斉炭素-炭素結合生成反応の実現化を達成したことが挙げられる。山本尚（中部大）は独自に設計した配位子を有する革新的なバイメタリック触媒を開発し、不斉エポキシ化反応の基質多様化にも成功している。澤村正也（北大）の主たる共同研究者である武次徹也と同じ研究室の前田理（北大）との協働研究は、新たな量子シミュレーション法である人工力誘起反応（AFIR）法に基づく反応経路自動探索法を開発することで精度の

高い触媒設計を可能にした。これは極めて大きな成果である（前田は、平成 26 年度より CREST 分子技術の研究代表者も務めている）。森川健志（豊田中研）は人工光合成においては、太陽光変換効率 4.6%での CO₂ からギ酸合成反応を、田中健（東工大）は新規触媒開発と新たな分子設計を駆使して、精密に分子構造が制御された新規 π 電子系分子群を多く生み出すことに成功した。これらの研究成果はいずれも国際的に極めて高い水準に有り、また科学技術に大きなインパクトを与えたと考えている。

受賞及び表彰関係では、2017 年度には山本尚が ACS National Award Roger Adams Award を受賞し、続く 2018 年度には茶谷直人（阪大）が ACS National Award Arthur C. Cope Scholar Awards を、檜山爲次郎（中央大）が ACS National Award Frederic Stanley Kipping Award in Silicon Chemistry をそれぞれ受賞する予定である。また、2016 年 7 月には、トムソン・ロイター社（現在のクラリベイト・アナリティクス社）が選出した日本がリードする先端領域で活躍する研究者に贈られるリサーチフロントアワードを松永茂樹（北大）、鳶巢守（阪大）と茶谷直人がそれぞれ受賞した。そして 2017 年度文化勲章を藤嶋昭（理大）が受賞した。採択された多くの研究者が国内外から極めて高い評価を得ている。

以上により、研究成果の科学技術への貢献については、極めて高い水準にあると考えられる。

②科学技術イノベーション創出に貢献する成果

研究領域全体として中間評価以降の特許出願数は、69 件（国際特許 9 件）から 115 件（国際特許 13 件）と一応の増加傾向を示しており、科学技術イノベーション創出に貢献する可能性のある研究成果が数多く見出されつつある。

特筆すべき研究成果として、椿範立（富山大）は革新的な触媒反応を開発することで、合成ガスと CO₂ によるギ酸エステル経由の新規低温メタノール合成法を確立した。さらに、合成ガスから一段階で 70%と高選択的にエタノール合成を達成し、実用化を目指している。そして、小林修（東大）は連続フローシステムの確立で、工業化を目指し企業との共同研究に発展させるに至っている。また、柴崎正勝（微研）は共有結合を使わない固相担持不斉触媒の創製により新規フロー型反応を開発している。山本尚（中部大）はオリジナルの高触媒設計による革新的アミド化技術を開発した。産業界との連携によりペプチド合成への発展が大いに期待できる。また、小澤文幸（京大）は新規 Pd 触媒を開発し、構成材料として有用な DA ポリマーを高純度でかつ短工程で合成を可能にしたことは工業化にとって非常に重要である。

以上により、研究成果の科学技術イノベーションへの貢献については、高い水準にあると考えられる。

(4) 科学技術イノベーション創出への展望

本研究領域の期間中に生み出された数々の研究成果は、今後、科学技術イノベーション

創出に貢献する可能性が数多く見込まれる。

具体的には、「二酸化炭素の有用物質への変換」では、椿範立（富山大）が合成ガスとCO₂によるギ酸エステル経由の新規低温メタノール合成法を確立している。さらに、安価なカプセル触媒を用いることにより合成ガスから一段階で70%と高選択的にエタノール合成ができる技術を達成した。その際、外部熱不要な合成ガスの合成法も併せて確立している。この研究課題は企業との共同研究もなされており、「6. ②(iv)」で記載したようにJACI内でも興味を持って検討して頂いている。また、姫田雄一郎（産総研）はギ酸から高压水素 (>10 MPa) を発生できる高性能なプロトン応答性2核触媒を見出した。この触媒は、実用化に適した100°C以下の低温条件かつ有機添加物を含まない水中反応で、COを副生しない優れた特性を有している。

「選択的な不斉炭素-炭素結合生成等」では、小林修（東大）は連続フローシステムを確立し、抗炎症剤(R)-ロリプラムの多段階不斉全合成を達成した。さらに、本研究で得られた成果を企業において工業化する可能性に関する調査および技術的橋渡しを行うことを目的に研究を伸展させ、今日、企業との共同研究に至っている。また、柴崎正勝（微研）は共有結合を使わない固相担持不斉触媒の創製に成功し、フロー反応系での触媒的不斉ニトロアルドール反応に適用した。種々の医薬品中間体の工業的合成への応用が期待できる。一方、松永茂樹（北大）はロジウム触媒の性能を凌駕するコバルト触媒の創製に成功した。安価な触媒への代替に留まらず、工程数の削減や廃棄物の削減につながる化学変換法として、価値の高いものと期待される。このコバルト触媒の創製は、世界の研究者が模倣し、爆発的に研究が進む契機となったパイオニア的研究成果である。また、山本尚（中部大）は、タンタル触媒の存在下において、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ことを見出した。この新規アミド化反応の開発は、JST 研究成果展開事業 (A-STEP) ステージII (シーズ育成タイプ) において、研究課題「基質支配による触媒的ペプチド合成システムの実用化検証」に発展した。今後、産業界との連携によるペプチド合成への発展が期待できる。

「 π 電子系分子の化学合成と新機能創成」では、深澤愛子（名大）が独特の分子設計とオリジナリティーの高い触媒の創出により、チオラクトンが交差共役した新たな有機色素を開発し、実用化を目指し企業と共同研究を行っている。また、田中健（東工大）はオリジナリティーの高いロジウム触媒を用い自己集合によりナノチューブを形成するという前例のない優れた性質を持つシクロパラフェニレン誘導体の合成に成功した。さらに、小澤文幸（京大）は新規リン配位子を有するPd触媒を開発し、有機電子デバイスの構成材料として有用なドナー・アクセプター型交互共重合体 (DA ポリマー) を高純度でかつ短工程で合成できるようになった。製造コストと安全性の面で大幅な改善が図られ、DAポリマー実用化への流れが加速するものと期待される。

上記したように、独自の分子開発、触媒開発を目指し、長期的な観点で海外との競争に勝てるような状況になってきたと言える。

以上により、科学技術イノベーション創出に関しては、本研究領域の多くの研究成果が将来への発展の確固たる礎を築いたと考えられる。

(5) 本研究領域を設定したことの意義、科学技術に対する貢献、問題点等

① 本研究領域を設定したことの意義と科学技術に対する貢献度

触媒科学は、我が国の研究者が、世界の有機合成化学に大きな変革をもたらす反応経路を数多く開発するなど、世界を牽引してきた分野であり、我が国は非常に高いポテンシャルを有している。しかしながら、多くの課題も存在している。ACT-C 研究開始以前、実現できていなかった課題を抽出し、目標ビジョンとして以下に記す。

(i) 二酸化炭素の有用物質への変換については、脱化石資源に向け、二酸化炭素を原料にして、一酸化炭素(CO)、メタノール(CH₃OH)、エチレン(C₂H₄)といった非常に汎用性の高い、C1、C2、C3 化合物への効率的合成法の確立。(ii) 選択的な不斉炭素-炭素結合生成等については、複雑な構造を持つ医薬品等の工業的な合成を可能とする不斉炭素-炭素結合反応の開発。(iii) π 電子系分子の化学合成と新機能創成については、従来、有機半導体材料の研究開発においては既知化合物の改良研究が中心であったが、既存概念を越えた新たな発想の分子設計を用いた高性能有機材料の創出。(iv) 化学、物理、数理、工学等の分野の垣根を越えた異分野融合研究の推進。特に、革新的触媒設計のための計測分析及び計算科学を主とした理論化学に関する研究との連携促進。

ACT-C の研究成果において、(i) 二酸化炭素の有用物質への変換については、二酸化炭素を原料にして、CO、HCOOH、CH₃OH、C₂H₅OH の効率的合成法を達成した。脱化石資源へ向けて、二酸化炭素を還元し有用な C1、C2 化合物へ効率的に変換する反応を開発することができた。(ii) 選択的な不斉炭素-炭素結合生成等については、今までは合成不可能であった低活性基質を活性化する触媒を数多く開発し、その中のいくつかは工業化を目指したフローシステムを確立している。工業的な利用につながる不斉炭素-炭素結合生成等の反応を開発することができた。(iii) π 電子系分子の化学合成と新機能創成については、既存概念を越えた多数の新規触媒を開発し、新たな発想の分子設計を用いた高性能有機材料も創製することができた。目標としていた、革新的な結合形成、開裂および組み換えにより優れた特性や機能を有する π 電子系分子を創出する研究および π 電子系分子に官能基導入を行う等による新機能を創成することを達成した。(iv) 計算化学との融合、すなわち新たな量子シミュレーション法である人工力誘起反応 (AFIR) 法に基づく反応経路自動探索法を開発することで精度の高い触媒設計を可能にしたことは極めて大きな成果である。即ち、理論化学に関する研究との連携も促進することで、革新的触媒設計を開発することができた。いずれも国際的に極めて高い水準に有り、また科学技術に大きなインパクトが期待できる。

以上により、本研究領域を設定した結果から生まれた幾多の科学技術への貢献やイノベーション創成に資する成果の数々は、国際的水準から見ても極めて有意義であったと考えられる。

②問題点（要望）

触媒研究の分野は日本が世界を牽引してきた分野であり、高い学術的な成果のみならず、数多くの反応手法が多様な製品製造過程で実用化されるなど社会の発展にも大きく貢献している。触媒研究の分野に高まる期待と重要性、また日本の研究基盤の強みを鑑みると、この分野の一層の重点化を図ることが、我が国発の大きなイノベーションの創出につながると考えている。JST では、触媒を扱うプログラムが数多くあるが、ここ数年で ACT-C、分子技術など触媒科学の基幹的プログラムが終りを迎える。今後、本研究領域で育った研究代表者も含めて、次代を担う研究者が応募できる JST 発の後継プログラムの企画を切望したい。

(6) 今後への期待、展望

触媒研究の分野は日本が世界を牽引してきた分野であり、高い学術的な成果のみならず、数多くの反応手法が多様な製品製造過程で実用化されるなど社会の発展にも大きく貢献している。触媒研究の分野に高まる期待と重要性、また日本の研究基盤の強みを鑑みると、この分野の継続的重点化を図ることが、我が国発の大きなイノベーションの創出につながると考えている。

ACT-C の研究成果はこれら日本の研究基盤の強みをさらに強化し、多大な科学技術の進歩に資する成果と科学技術イノベーション創出に貢献する成果を生み出した。特に、中間評価以後には、適切な研究マネジメントにより軌道修正を行った研究課題も含め、大半の研究課題の進捗は目を見張るものである。各研究課題の今後の展開に対する期待は大きい。より安全な、高原子効率、高収率、高選択性の分子変換法を創出することを目指し、化学、物理、数理、工学等の分野の垣根を越えて引き続き挑戦的な分野融合的研究を推進することを望む。また、革新的触媒設計のための計測分析及び計算化学を主とした理論化学に関する研究と連携することを期待する。

(7) 所感、その他

本研究領域では、低炭素社会の実現や、医薬品・機能性材料等の持続的かつ発展的な生産など、我が国のみならず世界が直面している諸課題の解決に貢献しうる、触媒による先導的な物質変換技術の創出を目指すものであった。その戦略は「1. 研究領域の概要(1)②」に記載したように、「第4期科学技術基本計画」の対応策としての根幹をなすものである。

具体的な達成目標として、(i)二酸化炭素還元法の創出、(ii)不斉炭素-炭素結合等の直截的生成法の開拓、(iii) π 電子系分子の化学合成と新機能創成、が設定された。これらの達成目標の実現に向けて、日本の研究基盤の強みである「触媒」および「触媒反応」が全体のキーワードとなっていたのが特徴である。

本研究領域は、厳選した研究課題の採択に基づき、50 を超える研究代表者で構成される

研究チーム群に対して、的確な領域アドバイザーの選定と配置、バーチャル・ネットワーク型研究所というコンセプトでの領域運営等、適切なマネジメントが行われた。すなわち、領域アドバイザーについては、海外でも評価が高い研究者を含め、分野を代表する研究者が選定され、かつ学界と産業界共に国内外から高い評価を得ている研究総括の下で、研究領域の明確な運営方針が示され、的確な研究マネジメントがなされた。

研究領域全体としてすでに1,774報の学術論文が国際誌に発表されており、しかも著名な国際学術誌への掲載が数多い。口頭発表の数はさらに多く、特に国際学会での招待講演数が1,067件にのぼることは研究成果が海外からも注目されている証である。さらに、採択された研究者は ACS National Award Roger Adams Award、ACS National Award Arthur C. Cope Scholar Awards、ACS National Award Frederic Stanley Kipping Award in Silicon Chemistry、トムソン・ロイター社のリサーチフロントアワードそして文化勲章を受賞するなど国内外から極めて高い評価を得ている。そして、研究成果として、(i)二酸化炭素の有用物質への変換については、二酸化炭素を原料にして、CO、HCOOH、CH₃OH、C₂H₅OHの効率的合成法を達成した。(ii)選択的な不斉炭素-炭素結合生成等については、今までは不可能であった低活性基質を活性化する触媒を数多く開発し、その中のいくつかは工業化を目指したフローシステムを確立している。(iii)π電子系分子の化学合成と新機能創成については、既存概念を越えた多数の新規物質を開発し、新たな発想の分子設計を用いた高性能有機材料も創製することができた。(iv)計算化学との融合、すなわち新たな量子シミュレーション法である人工力誘起反応(AFIR)法に基づく反応経路自動探索法を開発することで精度の高い触媒設計を可能にしたことは極めて大きな成果である。

いずれも国際的に極めて高い水準に有り、科学技術の進歩に大きなインパクトが期待できるだけでなく、科学技術イノベーションへの貢献についても期待できる。

今後より安全で、高原子効率、高収率、高選択性の分子変換法を創出することを目指し、化学、物理、数理、工学等の分野の垣根を越えて挑戦的な分野融合的研究を推進することを望む。また、革新的触媒設計のための計測分析及び計算化学に関する研究と連携することを期待する。また、本研究領域の成果は、AMEDプロジェクト1件(小林)、JST未来社会創造事業1件(椿)、JST研究成果最適展開支援プログラムA-Step1件(山本)、JST戦略研究推進事業のCREST2件(姫田、高田)[澤村と協働した前田理(北大)もCRESTに採択]に引き継がれており、今後の発展にも大いに期待したい。一方で、JSTでは、触媒を扱うプログラムが数多くあるが、ここ数年でACT-C、分子技術など触媒科学の基幹的プログラムが終りを迎えることを鑑みるに、後継プログラムの企画実現を切に願う。

以上