

国立研究開発法人 科学技術振興機構
戦略的創造研究推進事業
ACT-C
追跡評価用資料

先導的物質変換領域(ACT-C)
(2012.10～2018.3)

研究総括：國武 豊喜

2024年3月

目次

要旨	1
第 1 章 研究領域概要.....	2
1.1 戦略目標.....	2
1.2 研究領域の目的.....	2
1.3 研究総括.....	2
1.4 研究総括補佐.....	3
1.5 領域アドバイザー、研究推進委員について.....	3
1.6 研究課題および研究代表者.....	5
第 2 章 追跡調査	12
2.1 追跡調査について.....	12
2.1.1 調査の目的	12
2.1.2 調査の対象	12
2.1.3 調査方法	12
(1) 研究助成金	12
(2) 論文	12
(3) 特許	13
(4) 受賞、共同研究や企業との連携等	13
(5) ベンチャー	13
2.2 追跡調査概要.....	13
2.2.1 研究助成金	13
2.2.2 論文	13
2.2.3 特許	16
2.2.4 受賞状況	18
2.2.5 共同研究や企業との連携	18
2.2.6 実用化・製品化	20
2.2.7 ベンチャー	21
(1) 株式会社 Atomis.....	21
(2) 株式会社ペップイノーバ	22
2.3 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果.....	23
2.3.1 研究領域の展開状況（まとめ図）.....	23
2.3.2 研究成果の科学技術の進歩への貢献.....	30
(1) 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.....	30

(2) 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的物質変換技術の創出	32
(3) 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	36
2.3.3 研究成果の社会・経済への貢献.....	36
(1) 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.....	37
(2) 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的物質変換技術の創出	39
(3) 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	40
2.3.4 その他の特記すべき事項(新たな展開や分野間融合).....	40

要旨

本資料は、戦略的創造研究推進事業の「先導的物質変換領域(ACT-C)」(2012年10月～2018年3月、以後本研究領域と記載)において、研究終了後一定期間を経過した後、副次的効果を含めて研究成果の発展状況や活用状況を明らかにし、国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)事業および事業運営の改善などに資するために、追跡調査を実施した結果をまとめたものである。

研究終了後の研究進展を、以下のような目次に沿って、本報告書にまとめた。

第1章では、研究領域概要について、戦略目標、研究領域の目的、研究総括、研究総括補佐、領域アドバイザー、研究推進委員、研究課題および研究代表者をまとめた。

第2章では、追跡調査の目的、対象および方法、研究助成金、論文、特許、受賞、共同研究や企業との連携、実用化・製品化およびベンチャーについてまとめた。また、研究領域の展開状況、研究成果の科学技術の進歩への貢献、研究成果の社会・経済への貢献および新たな展開や分野間融合をまとめた。

第 1 章 研究領域概要

本調査の対象である先導的物質変換領域 (ACT-C) (以後、本研究領域と記載) の概要を下記に示す。

1.1 戦略目標¹

「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。

① 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

② 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的物質変換技術の創出

③ 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。

1.2 研究領域の目的²

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した。

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推進した。

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研究が行われた。また、反応機構の解明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された。

1.3 研究総括

國武 豊喜 (九州大学高等研究院 特別主幹教授)

¹ https://www.jst.go.jp/kisoken/archives/act-c/evaluation/research_area_posteriori_evaluation_reference.pdf

² <https://www.jst.go.jp/kisoken/archives/act-c/>

1.4 研究総括補佐

根岸 英一 (パデュー大学 特別教授)

1.5 領域アドバイザー、研究推進委員について

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 電子系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を選定した(表 1-1)。

表 1-1 領域アドバイザー

No.	領域 アドバイザー (専門分野)	終了時の所属	役職	任期
1	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
2	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
3	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
4	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
5	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
6	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
7	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
8	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
9	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
10	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
11	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

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た。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を選定した（表 1-2 No. 1～4）。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」の企業出身の研究推進委員も選定した（表 1-2 No. 5～9）。

表 1-2 研究推進委員

No.	研究推進委員 (専門分野)	終了時の所属	役職	任期
1	飯田 琢也 (生体光物理、非平衡ナノ光学等)	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
2	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
3	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
4	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
5	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
6	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
7	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
8	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
9	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

1.6 研究課題および研究代表者

研究課題と研究代表者を表 1-3 にまとめた。

表 1-3 研究課題と研究代表者

No.	研究課題	研究者名	所属・役職		
			採択時	研究終了時	追跡調査時
1	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	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	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	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
2	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・光触媒的変換	犬丸啓	広島大学大学院工学研究院 教授	広島大学大学院工学研究院 教授	広島大学大学院先進理工系科学研究科 教授
3	機能的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	岩澤伸治	東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻 教授	東京工業大学理学院 教授	東京工業大学 教育本部 特任教授
4	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	梅田実	長岡技術科学大学工学部 教授	長岡技術科学大学工学部 教授	長岡技術科学大学工学部 教授
5	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	横野照尚	九州工業大学大学院工学研究院物質工学研究系 教授	九州工業大学大学院工学研究院物質工学研究系 教授	九州工業大学大学院工学研究院物質工学研究系 教授
6	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	生越専介	大阪大学大学院工学研究科 教授	大阪大学大学院工学研究科 教授	大阪大学大学院工学研究科 教授
7	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	小澤文幸	京都大学化学研究所 教授	京都大学化学研究所 教授	京都大学化学研究所 名誉教授
8	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	垣内史敏	慶應義塾大学理工学部 教授	慶應義塾大学理工学部 教授	慶應義塾大学理工学部 教授

No.	研究課題	研究者名	所属・役職		
			採択時	研究終了時	追跡調査時
9	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	川口博之	東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻 教授	東京工業大学理学院 教授	東京工業大学理学院 教授
10	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	北川進	京都大学物質-細胞統合システム拠点 拠点長・教授	京都大学物質-細胞統合システム拠点 拠点長・教授	京都大学物質-細胞統合システム拠点 拠点長・特別教授
11	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	北村雅人	名古屋大学大学院創薬科学研究科 教授	名古屋大学大学院創薬科学研究科 教授	名古屋大学 物質科学国際研究センター 名誉教授
12	シリル置換芳香族化合物の機能と物性	久新莊一郎	群馬大学大学院工学研究科 教授	群馬大学大学院理工学府 教授	群馬大学大学院理工学府 教授
13	電子構造の揺らぎに基づく機能性触媒の創製	倉橋拓也	京都大学工学研究科材料工学専攻 助教	京都大学大学院工学研究科材料工学専攻 准教授	関西学院大学理学部 教授
14	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	小林修	東京大学大学院理学系研究科化学専攻 教授	東京大学大学院理学系研究科化学専攻 教授	東京大学大学院理学系研究科化学専攻 教授
15	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	近藤美欧	自然科学研究機構分子科学研究所生命・錯体分子科学研究領域 助教	自然科学研究機構分子科学研究所生命・錯体分子科学研究領域 助教	大阪大学工学研究科 准教授
16	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	斎藤進	名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻および高等研究院 准教授	名古屋大学大学院理学研究科 教授	名古屋大学物質科学国際研究センター 教授
17	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	櫻井英博	自然科学研究機構分子科学研究所 准教授	大阪大学大学院工学研究科 教授	大阪大学大学院工学研究科 教授
18	触媒的不斉ドミノ反応を基盤とする実用的分子変換	笹井宏明	大阪大学産業科学研究所 教授	大阪大学産業科学研究所 教授	大阪大学 産業科学研究所 招へい教授

No.	研究課題	研究者名	所属・役職		
			採択時	研究終了時	追跡調査時
19	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	佐藤 哲也	大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻 准教授	大阪市立大学大学院理学研究科 教授	大阪市立大学大学院理学研究科 教授
20	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	佐藤 美洋	北海道大学大学院薬学研究院 教授	北海道大学大学院薬学研究院 教授	北海道大学大学院薬学研究院 教授
21	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	澤村 正也	北海道大学大学院理学研究院 教授	北海道大学大学院理学研究院 教授	北海道大学大学院理学研究院 教授
22	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	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	公益財団法人微生物化学研究会 微生物化学研究所 所長	公益財団法人微生物化学研究会 理事長
23	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	柴田 高範	早稲田大学理工学術院 教授	早稲田大学理工学術院 教授	早稲田大学理工学術院 教授
24	インターロック触媒を用いる高選択的高効率物質変換	高田 十志和	東京工業大学大学院理工学研究科有機・高分子物質専攻 教授	東京工業大学物質理工学院 教授	広島大学大学院先進理工系科学研究科 特任教授
25	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	東京農工大学大学院工学研究院応用化学部門 教授	東京工業大学物質理工学院 教授	東京工業大学物質理工学院 教授
26	革新的低環境負荷型分子変換反応めざした新規方法論の創成	茶谷 直人	大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻 教授	大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻 教授	大阪大学 環境安全研究管理センター 特任教授
27	二酸化炭素からの新しいC1化学プロセスの創成	椿 範立	富山大学理工学研究部 教授	富山大学理工学研究部(工学) 教授	富山大学学術研究部 工学系 教授
28	不活性シグマ結合の触媒的変換手法の開発	鳶巢 守	大阪大学大学院工学研究科 准教授	大阪大学大学院工学研究科 教授	大阪大学大学院工学研究科 教授
29	二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール	中村 潤児	筑波大学数理物質系・学際物質科学研	筑波大学数理物質系・学際物質科学研	九州大学カーボンニュートラル・エネ

No.	研究課題	研究者名	所属・役職		
			採択時	研究終了時	追跡調査時
	室温合成触媒の創成		究センター センター 一長・教授	究センター センター 長・教授	ギー国際研究所三井 化学カーボンニュー トラル研究センター 教授
30	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	成田 吉徳	九州大学先端物質化 学研究所 主幹教授	中部大学総合工学研 究所 教授	中部大学総合工学研 究所 教授
31	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	西原 康師	岡山大学大学院自然 科学研究科 教授	岡山大学異分野基礎 科学研究所 教授	岡山大学異分野基礎 科学研究所 教授
32	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	野村 琴広	首都大学東京大学院 理工学研究科 教授	首都大学東京大学院 理工学研究科 教授	東京都立大学 理学研 究科 教授
33	π 共役系分子の自在合成 法の開発と機能開拓	羽村 季之	関西学院理工学部 准 教授	関西学院大学理工学 部 教授	関西学院大学生命環 境学部 教授
34	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	東林 修平	自然科学研究機構分 子科学研究所 助教	慶應義塾大学薬学部 准教授	慶應義塾大学薬学部 准教授
35	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	姫田 雄一 郎	独立行政法人産業技 術総合研究所エネル ギー技術研究部門 主 任研究員	国立研究開発法人産 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	国立研究開発法人産 業技術総合研究所ゼ ロエミッション国際 共同研究センター 首 席研究員
36	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	檜山 爲次 郎	中央大学研究開発機 構 教授	中央大学研究開発機 構 教授	京都大学 名誉教授
37	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	平野 雅文	東京農工大学大学院 工学研究院応用化学 部門 准教授	東京農工大学大学院 工学研究院応用化学 部門 教授	東京農工大学大学院 工学府応用化学専攻 教授

No.	研究課題	研究者名	所属・役職		
			採択時	研究終了時	追跡調査時
38	低環境負荷型前周期遷移金属レドックスシステムの設計に基づく先導的物質変換テクノロジーの創出	平尾俊一	大阪大学大学院工学研究科 教授	大阪大学産業科学研究所 特任教授	大阪大学産業科学研究所 特任教授
39	プ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	名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻 助教	名古屋大学大学院理学研究科物質理学専攻 准教授	京都大学高等研究院 教授
40	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	藤嶋昭	東京理科大学 学長	東京理科大学 学長	東京理科大学 名誉教授
41	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	東京大学大学院薬学系研究科 准教授	北海道大学大学院薬学研究院 教授	北海道大学大学院薬学研究院 教授
42	フッ素化合物の触媒的不斉炭素-炭素結合生成技術の開発と工業化	三上幸一	東京工業大学大学院理工学研究科応用化学専攻 教授	東京工業大学物質理工学院 教授	東京工業大学 名誉教授
43	量子ドットによる二酸化炭素の光還元システムの構築	宮内雅浩	東京工業大学大学院理工学研究科 准教授	東京工業大学物質理工学院 教授	東京工業大学物質理工学院 教授
44	アゾール類をコアとする直交 π 電子系分子群の創製	村井利昭	岐阜大学工学部 教授	岐阜大学工学部 教授	岐阜大学工学部 教授
45	太陽エネルギーを駆動力とする新変換技術の開発	村上正浩	京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻 教授	京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻 教授	京都大学 名誉教授
46	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	株式会社豊田中央研究所先端研究センター 光エネルギー貯蔵プログラム 主席研究員 PM	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	株式会社豊田中央研究所 森川特別研究室 シニアフェロー
47	セルフコンタクト有機トランジスタの基礎技術	森 健彦	東京工業大学大学院理工学研究科有機・高分子物質専攻 教授	東京工業大学物質理工学院 教授	東京工業大学物質理工学院 教授

No.	研究課題	研究者名	所属・役職		
			採択時	研究終了時	追跡調査時
48	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	山田陽一	独立行政法人理化学研究所基幹研究所 副チームリーダー	国立研究開発法人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	国立研究開発法人理化学研究所環境資源科学研究センター チームリーダー
49	分子性酸触媒の設計	山本尚	中部大学総合工学研究所 教授	中部大学総合工学研究所 教授	中部大学 ペプチド研究センター長/先端研究センター長/分析計測センター長/教授
50	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	吉田 弘人	広島大学工学研究院 准教授	広島大学工学研究院 准教授	広島大学大学院先進理工系科学研究科 教授
51	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	依光英樹	京都大学大学院理学研究科化学専攻 准教授	京都大学大学院理学研究科化学専攻 教授	京都大学大学院理学研究科化学専攻 教授
52	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	香月 勲	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 教授	九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 教授	2014年逝去
53	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	桑野良一	九州大学大学院理学研究院化学部門 教授	九州大学大学院理学研究院化学部門 教授	九州大学大学院理学研究院化学部門 教授

*1 香月、桑野の研究課題は2014年度末で早期終了

各研究チームの主たる共同研究者を、表 1-4 にまとめた。

表 1-4 各研究チームの主たる共同研究者リスト

No.	研究代表者	主たる共同研究者
1	稲垣 伸二	原 賢二 (東京工科大学 工学部応用化学科 教授)
2	横野 照尚	春山 哲也 (九州工業大学 大学院生命体工学研究科 教授)
3		清水 陽一 (九州工業大学 大学院工学研究院 教授)
4		福間 剛士 (金沢大学 ナノ生命科学研究科 教授)
5	川口 博之	高尾 俊郎 (東京工業大学 物質理工学院 准教授)
6		松尾 司 (近畿大学 理工学部 教授)

No.	研究代表者	主たる共同研究者
7	小林 修	石谷 暖朗（東京大学 大学院理学系研究科 特任教授）
8	櫻井 英博	江原 正博（自然科学研究機構 計算科学研究センター 教授）
9	佐藤 美洋	有澤 光弘（大阪大学 大学院薬学研究院 教授）
10	澤村 正也	森 聖治（茨城大学 理工学研究科（理学野） 教授）
11		武次 徹也（北海道大学 大学院理学研究院 教授）
12	中村 潤児	吉信 淳（東京大学 物性研究所 教授）
13		森川 良忠（大阪大学 大学院工学研究科 教授）
14	成田 吉徳	高玉 博朗（中部大学 生命健康科学部 准教授）
15	西原 康師	高井 和彦（岡山大学 大学院自然科学研究科 特命教授）
16		菅 誠治（岡山大学 大学院自然科学学域 教授）
17		久保園 芳博（岡山大学 異分野基礎科学研究所 教授）
18		坂巻 功一（株式会社 ADEKA 環境・エネルギー材料研究所 主任研究員）
19	野村 琴広	浅野 素子（群馬大学 大学院理工学府 教授）
20	檜山 爲次郎	福澤 信一（中央大学 理工学部 教授）
21		石井 洋一（中央大学 理工学部 教授）
22	平野 雅文	川内 進（東京工業大学 物質・情報卓越教育院 特任教授）
23	平尾 俊一	森内 敏之（大阪公立大学 大学院理学研究科 教授）
24	藤嶋 昭	中田 一弥（東京農工大学 農学研究院 准教授）
25	松永 茂樹	坂田 健（東邦大学 薬学部 教授）
26	三上 幸一	網井 秀樹（群馬大学 大学院理工学府 教授）
27		柴田 哲男（名古屋工業大学 大学院工学研究科 教授）
28	山田 陽一	藤川 茂紀（九州大学 カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 教授）
29	山本 尚	赤倉 松次郎（愛知教育大学 教育学部 准教授）

第 2 章 追跡調査

2.1 追跡調査について

2.1.1 調査の目的

追跡調査は、研究領域終了後、一定期間を経過した後、副次的効果を含めて研究成果の発展状況や活用状況を明らかにし、JST の事業および事業運営の改善に資するために行うもので、研究終了後の研究者の研究課題の発展状況等を調査した。

2.1.2 調査の対象

本追跡調査は、「先導的物質変換領域(ACT-C) (2012 年度～2017 年度)」を対象とする。

2.1.3 調査方法

本追跡調査に際し、本研究領域終了後の発展状況を把握するため、研究代表者へのアンケートを実施した。その結果、51 名の研究代表者中、42 名からの回答が得られた。アンケートで得られた回答は、本追跡調査をまとめる際に全般的に活用した。また、研究助成金、論文、特許、受賞、共同研究や企業との連携、実用化・製品化、ベンチャーのより詳細な調査方法を以下に示す。

(1) 研究助成金

調査対象期間は、本研究領域の期間中を含めて調査対象月とし、本研究領域の研究代表者が研究の代表を務める研究助成金を調査した。その中から、原則、研究助成金の総額が 1 千万円/件以上のものを抽出した。

ただし、各研究課題の開始後に研究助成を受け、当該研究課題が終了する前に、その助成期間が終了してしまう事案および当該研究課題終了と同年度に助成期間が終了する事案に関しては対象外とした。

研究助成金の獲得状況について、データベースとしては、調査対象者の所属する研究室のウェブサイトおよび KAKEN 科学研究費助成事業データベースなどの研究助成金に関する検索サイト及び研究代表者へのアンケート、補助的に一般的なウェブ検索サイトを利用した。

(2) 論文

論文の抽出は、文献データベースとして Scopus を用い、文献タイプは、Book (Book chapter、Book review)、Editorial、Erratum を除く全文献タイプを対象とした。研究代表者が著者になっている論文のうち、研究代表者が研究終了の翌年度に成果として JST に報告した論文を①「成果論文」、①の論文を引用している研究終了後の論文を②「発展論文」、③研究終

了後の論文であり①、②以外の論文を③「展開論文」として論文数を集計した。また、これらの論文について、研究代表者が責任著者となっている論文数も調べた。

(3) 特許

特許検索のデータベースとして、主に PatentSQUARE を利用し、補助的に特許情報プラットフォームと espacenet を利用した。特許出願および登録状況は、出願日（もしくは優先権主張日）が研究課題開始以降で、研究代表者が発明者になっているものを抽出した。

(4) 受賞、共同研究や企業との連携等

研究終了以降から現在に至るまでの受賞、共同研究や企業との連携等について、研究室のウェブサイト、一般的なウェブ検索サイトによる調査、各研究代表者へのアンケート、及び、一部の研究代表者へのインタビューを実施し、それぞれのリストを作成した。

(5) ベンチャー

一般的なウェブ検索サイトを用いた調査や各研究代表者にアンケートを実施した。

2.2 追跡調査概要

2.2.1 研究助成金

各研究代表者が獲得した助成金を調査した。ここでは、原則として研究終了後に実施したもの（研究期間中に並行して実施したものも含む）で、助成金総額が1千万円/件以上のものを調査対象としているが、各研究代表者はこれらの他にも助成金（研究分担者として、あるいは研究代表者であるが比較的少額）を獲得して研究を進めている。

研究領域全体では、98件の研究助成金を獲得している。その獲得先の内訳は、科研費70件、JST13件、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）8件、国立研究開発法人日本医療研究開発機構（AMED）3件、内閣府1件、環境省1件、その他2件であった。研究助成金を4件以上獲得している研究者が5名いた（垣内、北川、小林、椿、野村）。1億円/件以上の大型研究助成金を獲得している研究者が12名いた（岩澤、梅田、北川、小林、高田、茶谷、椿、野村、姫田、村上、山本、依光）。

研究終了後の研究助成金の獲得数および獲得金額を考慮すると、多くのグループで研究期間中の成果が科研費、JST、NEDO、AMEDなどの主要な関連事業に継承され、活発に研究活動が展開されている様子が伺える。

2.2.2 論文

論文発表件数は、研究者の研究活動を示す指標としてしばしば用いられている。一方、科学技術の国際競争力の比較を行うためには、質の高い論文（Top%論文）を対象とすることも

重要である。研究代表者の論文を、①ACT-Cの成果と認められるもの、②ACT-Cの発展と認められるもの、及び、③ACT-Cの展開と認められるものに分け、それぞれについての論文数および責任著者論文数、FWCI³の中央値、Top0.1%、Top1%、Top10%以内、10%圏外の論文数を表 2-1 にまとめた。

表 2-1 論文の数と指標

	論文数	責任著者論文数	FWCI の中央値 ⁴	FWCI Top%			
				0.1%以内	1%以内	10%以内	10%圏外
成果論文	2109	728	1.02	0	15	346	1763
発展論文	880	526	0.72	0	5	90	790
展開論文	726	314	0.59	0	8	84	642

検索日：2022年9月22日

なお、①の論文は研究代表者に加えて主たる共同研究者の双方を含むのに対し、②及び③は研究代表者のみの論文を調査対象とした。図 2-1 には①ACT-Cの成果と認められるもの、②ACT-Cの発展と認められるもの、③ACT-Cの展開と認められるものの論文数を、Top10%以内の論文数とともに示した。図 2-2 には各研究代表者の論文数分布を示す。

³ Field-Weighted Citation Impact (FWCI)は該当論文の被引用数を、同じ分野・出版年・文献タイプの文献の世界平均で割ったもの。FWCI が 1 より大きいとは、該当論文が世界の平均より多く引用されていることを意味し、例えば 1.48 は、平均より 48%多く引用されていることを意味する。Field-Weighted Outputs in Top Citation Percentiles は、FWCI がトップ X%の文献。0.01%は、0.01%以内に含まれる論文の数を示し、0.1%は、0.01%より大きく、0.1%以内のものを示す。

⁴ FWCI 中央値は 2021 年までに出版されたもので、FWCI 値を有するものの中央値を算出。

論文数

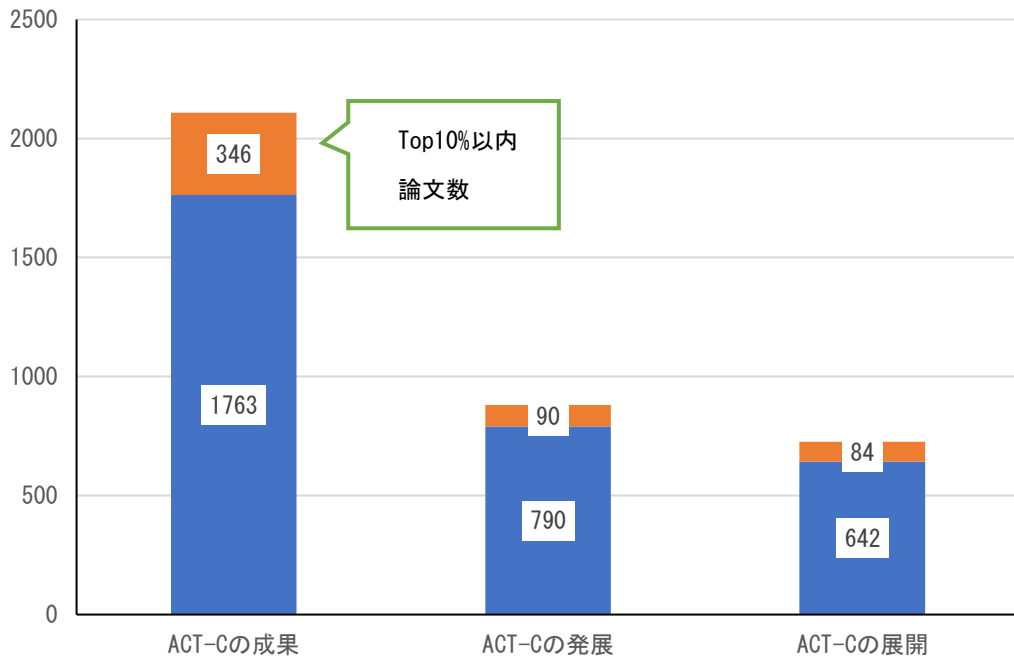


図 2-1 ACT-C の成果、発展及び展開に関する論文数

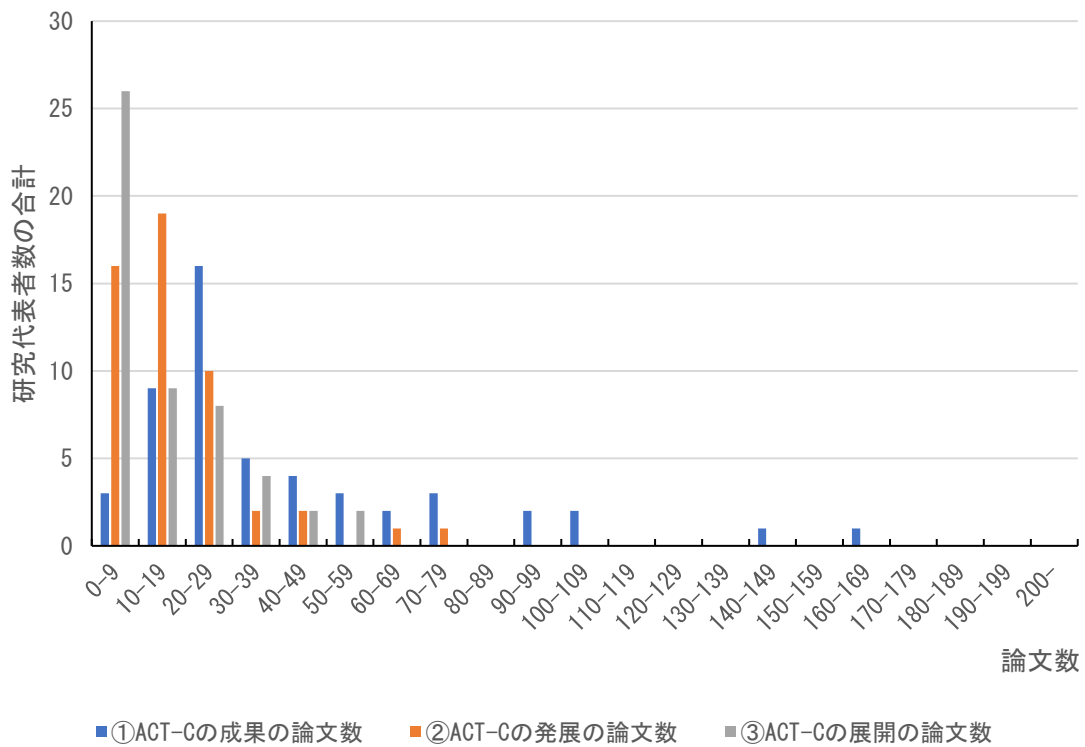


図 2-2 各研究代表者の論文数分布

領域全体の論文数では、研究期間中 2109 報(このうち Top10%以内は 346 報)に対し、研究終了後の発展論文 880 報(このうち Top10%以内は 90 報)、展開論文 726 報(このうち Top10%以内は 84 報)と減少している。この傾向は、各研究代表者の論文数分布に反映されており、全体として研究期間中に対し研究終了後は論文数が減少している。これは、研究期間中は研究代表者に加えて主たる共同研究者の論文も合算されているのに対し、研究終了後は研究代表者のみの論文によるためである。また、研究終了後に定年退職した研究代表者が数名いたことも一因と考えられる。

研究代表者別では、ACT-C の研究成果の論文を最も多く発表したのは、澤村らで 163 報、次いで西原らが 149 報、三上らが 109 報であった。また、ACT-C の研究成果の発展に関しては、椿らの 72 報で最も多く、次いで小林らが 61 報、依光らが 49 報、ACT-C の研究成果の展開に関しては、藤嶋らが 58 報、北川らが 52 報、椿らが 48 報であった。

一方、ACT-C の研究成果における Top10%以内の論文数は、澤村らと茶谷らが 26 報、西原ら、松永ら、三上らが 19 報と多い。また、Top1%以内の論文については、松永らが 5 報と最も多く、茶谷らが 4 報、小林ら、近藤ら、澤村ら、鳶巣ら、中村ら、宮内ら、村上らは 1 報であった。ACT-C の研究成果の発展における Top10%以内の論文数は、椿らが 13 報、次いで松永らが 11 報、北川ら、茶谷らが 7 報であった。Top1%以内の論文については、茶谷らは 2 報、澤村ら、椿ら、藤嶋らには 1 報あった。ACT-C の研究成果の展開における Top10%以内の論文数は、藤嶋らが 16 報、次いで北川らが 12 報、横野ら、宮内らが 9 報であった。Top1%以内の論文については、横野ら、藤嶋らは 2 報、川口ら、北川ら、宮内ら、山田らには 1 報あった。

また、本研究領域内での共著論文数は、研究期間中の研究成果の論文で 25 報、研究終了後の研究成果の発展に関しては 10 報であった。茶谷と鳶巣との共著論文が、研究期間中の研究成果の論文で 13 報、研究終了後の研究成果の発展に関しては 5 報と、共著論文の約半数を占めている。これは、鳶巣が、研究期間の途中の 2016 年までは准教授という立場であり、メンター教授である茶谷との共同研究を通じて研究を推進していたが、2017 年以降は教授に昇進し、単独での論文発表が増加したことが要因として挙げられる。佐藤哲也らと田中らとの共著論文が、研究期間中の研究成果の論文で 4 報、研究終了後の研究成果の発展として、1 報認められた。共著論文の内容は、いずれも遷移金属錯体を触媒とする反応に関するものであり、佐藤哲也や田中の研究終了報告書に記載のある新規 σ 結合活性化反応による触媒的環構築法の開発に関連している。澤村グループの主たる共同研究者の森と西原らとの共著論文が、研究期間中の研究成果の論文で 4 報認められた。この共著論文の内容は、いずれも触媒反応の機構解析に関するものである。

2.2.3 特許

特許は基礎研究から産業への貢献を分析する指標となり、特許からさらに次の段階の研究が発展することから、研究活動の成果を評価する重要な指標である。

本研究領域全体の特許の出願や登録数を調査した。また、図 2-3 に研究期間中・終了後の特許の出願と成立状況をまとめた。研究期間中の特許件数は、研究代表者が成果として報告したものや終了報告書に記載されているものなど、JST が成果として把握しているものである。研究終了後の特許件数は研究代表者が発明者として含まれるすべての特許件数を示す。

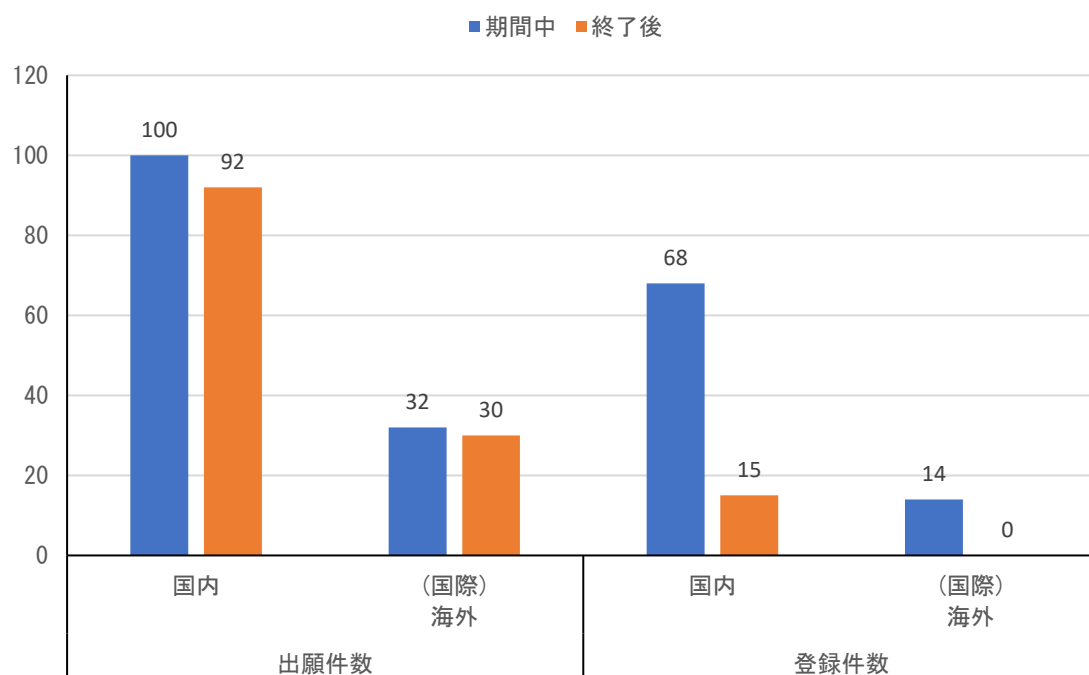


図 2-3 研究期間中・終了後の特許の出願と成立状況

領域全体では、研究期間中と研究終了後を比較すると、出願件数は若干減少しているもののほぼ同等の件数が認められるが、登録件数は研究終了後の方が少なくなっている。この登録件数の減少については、審査請求後、登録までに一定期間必要となるため、現時点で審査請求しているものの登録までに至っていない特許が一定数あることが一因と考えられる。

各研究代表者別では、研究期間中に最も多く国内に出願しているのは、森川らの 12 件、横野らの 9 件、次いで、柴崎ら、椿ら、三上らの 8 件となっている。国内登録については、横野ら、椿らの 7 件が最も多く、次いで、柴崎ら、藤嶋ら、森川らの 6 件となっている。海外出願については、柴崎らの 8 件が最も多く、次いで、椿らの 4 件、横野ら、山田らの 3 件となっている。海外登録については、柴崎らの 4 件が最も多く、次いで、横野の 2 件となっている。

一方、終了後については、最も多く国内に出願しているのは、高田らの 14 件、次いで、椿ら、宮内らの 8 件となっている。国内登録については、小林ら、高田ら、椿ら、宮内ら、山本らの 2 件が最も多かった。海外出願については、高田らの 6 件が最も多く、次いで、北川ら、山本らの 4 件となっている。海外登録については、0 件であった。

2.2.4 受賞状況

科学技術の進歩への貢献や研究成果に関する評価を示す指標の一つとして、受賞が挙げられる。各研究代表者が研究期間終了後の受賞を調査した。主な受賞を以下に示す。

岩澤は、日本化学会賞（2022年）を受賞した。北川は、日本学士院会員（2019年）となった。また、Highly Cited Researchers（2014年～2022年まで毎年連続）を受賞した。小林は、日本化学会賞（2019年）及び紫綬褒章（2020年）を受賞した。笹井は、科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 研究部門（2018年）を受賞した。佐藤哲也は、Highly Cited Researchers（2018年）を受賞した。澤村は、科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 研究部門（2021年）を受賞した。柴崎は、瑞宝中綬章（2020年）を受賞した。茶谷は、Arthur C. Cope Scholar Award（2018年）及び Highly Cited Researchers（2018年）を受賞した。椿は、科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 研究部門（2022年）を受賞した。中村は、科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 研究部門（2018年）を受賞した。村井は、日本化学会賞（2022年）を受賞した。村上は、Arthur C. Cope Scholar Award（2019年）及び日本化学会賞（2020年）を受賞した。森川は、科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 研究部門（2020年）を受賞した。山本は、瑞宝中綬章（2018年）及び文化功労者（2018年）を受賞した。依光は、日本学術振興会賞（2020年）及び日本学士院学術奨励賞（2020年）を受賞した。

2.2.5 共同研究や企業との連携

各研究代表者の共同研究や企業との連携状況を調査した。多くの研究代表者において、国内外の大学/研究機関あるいは民間企業との共同研究が行われている。主な共同研究や企業との連携状況を以下に示す。

北川らは、科研費基盤研究(S)/研究課題「適応性空間の化学」(2018～2022年度)において、京都大学、東京大学、北海道大学、名古屋大学と連携し、科研費基盤研究(S)/研究課題「有害・危険性物質の微量検出・分離・変換の多孔性配位高分子ハイブリッド科学の開拓」(2022～2026年度)において、京都大学、近畿大学と連携し、多孔性配位高分子(PCP)の開発を進めている。また、これまでPCPを用いた気体分離に関する共同研究を継続していた昭和電工株式会社と共に、NEDO「グリーンイノベーション基金事業/CO₂の分離回収等技術開発プロジェクト」の研究課題「革新的分離剤による低濃度CO₂分離システムの開発」(2022～2030年度)を、2022年度からスタートした。

小林らは、国立研究開発法人産業技術総合研究所(産総研)、化学メーカ、科学機器会社等とフロー反応に関する共同研究を進めている。例えば、東京大学のグリーン・サステイナブル・ケミストリー社会連携講座に参画する約20社の企業とフロー反応に関する共同研究を進めている⁵。また、研究助成の枠組みにおいても、多数の機関と連携している。NEDO「エ

⁵ https://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/gsc/index_J.html; 小林先生インタビュー結果(2022年12月21日)

エネルギー・環境新技術先導プログラム」/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」(2016～2018年度)では、産総研、東京大学、京都大学、早稲田大学、富士フイルム株式会社(富士フイルム)、東和薬品株式会社(東和薬品)、クミアイ化学工業株式会社、東京理化学器械株式会社(東京理化学器械)、日本電子株式会社と連携して先導研究を進め、NEDO「ナショナルプロジェクト・実用化促進事業」/研究課題「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」(2019～2025年度)に展開させている。このナショナルプロジェクトは現在、産総研、東京理化学器械、東和薬品、富士フイルム、東京大学のほか多数の再委託先との連携に発展し、フロー反応に関する実装研究を進めている。生物系特定産業技術研究支援センター(生研支援センター)「イノベーション創出強化研究推進事業」/研究課題「農薬の連続合成―連続微粒子化技術の創出による高機能化」(2021～2023年度)では、アイメックス株式会社、富士フイルム、東京大学、大阪公立大学が連携し、連続合成と連続微粒子化を活用した農薬の高機能化技術の開発を進めている。

椿らは、独自に開発した触媒技術を活用し、多くの企業や研究機関と共同研究を進めている。NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「CO₂を原料としたパラキシレン製造に関する技術開発」(2020～2023年度)では、富山大学、日本製鉄株式会社(日本製鉄)、日鉄エンジニアリング株式会社、ハイケム株式会社、千代田化工建設株式会社、三菱商事株式会社と連携して開発を進めている。NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「カーボンリサイクルLPG製造技術とプロセスの研究開発」(2022～2024年度)では、富山大学、ENEOS グローブ株式会社、日本製鉄と連携して開発を進めている。JSTの未来社会創造事業(JST未来社会)/研究課題「二酸化炭素からの新しいGas-to-Liquid触媒技術」(2017～2021年度)では、富山大学、日本製鉄と連携して開発を進めた。NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「CO₂ダイレクト利用ジェット燃料合成によるカーボンリサイクルの国際共同研究開発」(2021～2024年度)では、富山大学、一般財団法人石炭フロンティア機構(石炭フロンティア機構)、チュラロンコン大学(タイ)と連携して開発を進めている。JSTの地球規模課題対応国際科学技術協力プログラム(SATREPS)/研究課題「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)では、富山大学、石炭フロンティア機構、ENEOS株式会社、株式会社巴商会、チュラロンコン大学(タイ)、北部再生可能エネルギー社(タイ)、タイ石油公社が連携し、開発を進めた。また、上記のような研究助成を通じた連携以外にも、多数の企業との共同研究を進めている。

藤嶋らは、NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「ダイヤモンド電極を用いた石炭火力排ガス中のCO₂からの基幹物質製造開発事業」(2020～2021年度)及びNEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/「ダイヤモンド電極を用いた石炭火力排ガス中CO₂からの基幹物質製造」(2022～2024年度)において、慶應義塾、

東京理科大学、石炭フロンティア機構（旧石炭エネルギーセンター）と連携し、ダイヤモンド電極を用いて、CO₂を電気化学的に還元し、ギ酸を製造する研究開発を進めている⁶。

山本らは、JST の研究成果最適展開支援プログラム（A-STEP）「テーラーメイドペプチドの生産が可能な、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」（2016～2017年度）及びA-STEP「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」（2017～2022年度）において、日本理化学工業株式会社、中部大学と連携し、触媒的ペプチド合成システムの実用化に向けた検討を進めた。また、中部大学の山本研究室では、数社の企業からの研究員を受け入れ、触媒的ペプチド合成技術に関する共同研究を進めている⁷。

2.2.6 実用化・製品化

各研究代表者の実用化・製品化状況を調査した。主な実用化・製品化状況を以下に示す。

稲垣らは、試薬メーカー2社に、配位子を導入したメソポーラス有機シリカの試薬販売の実施許諾をし、試薬の販売を開始した。

北川らは、①混合気体からCO₂分離を行うPCPや、②水吸着を利用して省エネルギーをはかるデバイス、の実用化に向けた検討を進めている。

小林と共同研究を進めているアクティブファーマは、連続フロー法による前立腺肥大治療薬の原薬製造の商業化に向けて必要な設備を整備し、2023年度には原薬等登録原簿の登録を予定しており、商業化すれば世界初の事例となる⁸。また、小林らは、製薬企業に、医薬品原体（複数）や農薬中間体の製造技術に関する特許の実施許諾をしており、今後、これらの実用化が進むものと期待される。

笹井らは、円偏光発光素子の開発の実用化に向けた検討を進めている。

田中らの開発した新触媒が、企業から発売開始された。

椿らは、NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「CO₂を原料としたパラキシレン製造に関する技術開発」（2020～2023年度）に参画している連携企業への特許の実施許諾をしている。本プロジェクトにおいて、2028年の世界初の低炭素パラキシレン製造工場の運転を目指し、現在、千代田化工建設および日本製鉄にてベンチプラント運転中である。また、NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「カーボンリサイクルLPG製造技術とプロセスの研究開発」（2022～2024年度）に参画している連携企業への技術移転をしている。本プロジェクトにおいて、ENEOS グローブ、日本製鉄が小型プラントの準備を進めている。

成田らの開発した二酸化炭素電解還元システムの実用化に向けた企業からの情報照会が継続している。

⁶ <http://www.jcoal.or.jp/work/02/>

⁷ 山本先生インタビュー結果（2022年12月2日）

⁸ <https://pdf.irpocket.com/C8285/uF1f/sKHo/13f2.pdf>

西原らは、本研究領域で開発した化合物の有機電界効果トランジスタとしての上市を目指した検討を継続している。

姫田らは、低温での二酸化炭素からメタノールの合成の実用化に向けた検討を継続している。

松永らは、松永らの開発したコバルト触媒の安定性評価を行い、関東化学株式会社(関東化学)からの試薬としての市販化へと繋げ⁹、広く利用可能なものとした。

宮内らは、水素生成システムやメタン転換システム開発の実用化に向けた研究を企業と共同で進めている。

依光らの開発した反応に関する試薬が、東京化成工業株式会社(東京化成工業)より販売開始された¹⁰。

2.2.7 ベンチャー

(1)株式会社 Atomis

株式会社 Atomis は、次世代の多孔性材料である多孔性配位高分子 (PCP/MOF) に特化した京都大学発ベンチャー企業であり、北川が発見した多孔性配位高分子(PCP/MOF)技術を用い、あらゆる気体をナノレベルの鳥かごに閉じ込める事で、気体を自在に制御し、未知なる価値の創出に貢献することを目指している。マテリアル分野、ライフサイエンス分野、エネルギー分野で事業を展開しており、生体適合性が高い多孔性配位高分子 bioPCP™や「軽量」「コンパクト」「スマート」な次世代高圧ガス容器 CubiTan®を開発中である。北川は、同社のアドバイザーとして参画している。

表 2-2 株式会社 Atomis の概要

名称	株式会社 Atomis (アトミス)
創業者 (技術諮問委員)	樋口 雅一 (京都大学 高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 特定准教授)
代表取締役 CEO	浅利 大介
取締役 COO	片岡 大
執行役員 CSO	隅田 健治
社外取締役	岡橋 寛明 (みやこキャピタル株式会社 代表取締役 パートナー)
	清木 哲哉 (SBI インベストメント株式会社 CVC 事業部 部長)
	鈴木 聖一 (スパークス・アセット・マネジメント株式会社 次世代成長投資本部 部長)
アドバイザー	北川 進 (京都大学高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 拠点長/

⁹ https://www.kanto.co.jp/dcms_media/other/OFC-11.pdf

¹⁰ https://www.tcichemicals.com/JP/ja/product/tci-topics/ProductHighlights_20210614

	特別教授)
	植村 卓史 (東京大学大学院 工学研究科 応用化学専攻 教授)
	鹿島 久嗣 (京都大学大学院 情報学研究科 知能情報学専攻 教授)
設立	2015年2月10日
所在地	京都市上京区御車通清和院口上る東側梶井町 448-5 クリエーション・コア京都御車 事務所：201室、ラボ：202室、207室、208室、212室
資本金 (資本準備金含)	1,732,035,000円
事業内容	次世代の多孔性材料である多孔性配位高分子(PCP/MOF)に特化した京都大学発ベンチャー企業。京都大学高等研究院北川進教授が発見した多孔性配位高分子(PCP/MOF)技術を用い、あらゆる気体をナノレベルの鳥かごに閉じ込める事で、気体を自在に制御し、未知なる価値の創出に貢献することを目指している。マテリアル分野、ライフサイエンス分野、エネルギー分野で事業を展開しており、生体適合性が高い多孔性配位高分子 bioPCP™ や「軽量」「コンパクト」「スマート」な次世代高压ガス容器 CubiTan® を開発中。
URL	https://www.atomis.co.jp/

(2) 株式会社ペップイノーバ

株式会社ペップイノーバは、山本らが中部大学ペプチド研究センターで開発した革新的ペプチド合成技術 (HiSURE システム™) の活用を通じて、ペプチド医薬品の普及を阻む様々な問題を解決し、難治性疾患治療に有効な革新的医薬品の実用化を促進することを目指している。山本は、同社の最高顧問として参画している。

表 2-3 株式会社ペップイノーバの概要

名称	株式会社ペップイノーバ
代表取締役社長	満田 勝
最高顧問	山本 尚
設立	2022年7月22日
本店所在地	名古屋市西区名駅二丁目 34-17 セントラル名古屋 1101号
資本金	900万円
業務内容	(1) ペプチド化合物に関する研究開発および研究開発支援 (2) ペプチド化合物の製造および製造支援 (3) ペプチド化合物に関する知的財産権の実施許諾

URL	https://pepinnova.com/index.html
-----	---

2.3 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果

2.3.1 研究領域の展開状況（まとめ図）

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した。具体的な達成目標として、次の3つの達成目標として研究開発を進めた。①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、②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的物質変換技術の創出、③ 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。

本研究領域期間中の上記①の達成目標に対する成果としては、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。上記②の達成目標に対する成果としては、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た。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。上記③の達成目標に対する成果としては、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。

本研究領域終了後に研究成果が発展・展開し、発表された学術論文は1606報（本研究領域期間中は2109報だが、これは主たる共同研究者の論文も含む）に達した。特許出願は、国内92件（研究期間中100件）、海外30件（研究期間中32件）、特許登録は、国内15件（研究期間中68件）、海外0件（研究期間中14件）であった。また、受賞については、Highly Cited Researchers 7件、文部科学大臣表彰5件、日本化学会賞4件、瑞宝中綬章2件、Arthur C. Cope Scholar Award 2件、日本学士院会員1件、紫綬褒章1件、文化功労者1件、日本学術振興会賞1件、日本学士院学術奨励賞1件など、著名な賞を含む合計71件の受賞に輝いた。研究助成金（1千万円/件以上）については、科研費、JST、NEDO、AMED等から領域全体で98件を獲得しており、本研究領域における多くの研究テーマがこれらの事業に継承されている。さらに特筆すべき事項として、12名もの研究代表者が、研究終了後に1億円を超える大型の研究助成金プロジェクト事業を獲得している。

特に科学技術への波及効果が大きい代表的な研究成果の発展は、以下に見ることが出来る。

上記①の達成目標に対する発展状況について、

岩澤らは、遷移金属錯体触媒を用いるエチレンと二酸化炭素からのアクリル酸合成法の開拓を進め、ニッケル錯体としては世界最高の触媒回転数や、ルテニウム錯体を用いて初めてアクリル酸合成を実現した。また、可視光エネルギーを利用する二酸化炭素固定化反応の開発にも成功した。可視光エネルギーを利用する二酸化炭素固定化反応の開発は、岩澤らが先導して成し遂げた研究成果であり、現在世界中で活発な研究が行われている。

北川らは、①PCP 触媒を用いた CO₂ とエポキシドの環化付加反応を、高い触媒効率で実現、②PCP を用いた、CO₂ を含む分離困難な気体混合物の分離を行うための新しい機構、理論開発と実証、③アセチレン貯蔵を、ボンベ圧 1 気圧程度で取り出し、2 気圧以下で高い貯蔵能を持つ PCP の開発に成功した。

椿らは、①合成ガスからの新規低温メタノールと DME の合成方法について、直近 20 年来のメタノール・DME 分野における唯一のブレイクスルーと言える画期的な成果を得ることに成功した。②カプセル触媒による多段階反応の一括化の開発に成功した。一例として、新規カプセル触媒を発明し、CO+CO₂+H₂ から 6 つの触媒反応を一括して付加価値の高いパラキシレンまでの直接合成を、世界で初めて成功した。

中村らは、Cu 触媒表面の原子状水素と CO₂ 分子の反応がこれまで例のない CO₂ の振動励起によって進み、Cu 表面のエネルギー（温度）によらないことを明らかにした。本結果は、このようなタイプの反応機構について、実際の事例を見いだした世界初の報告である。

宮内らは、低温でメタンの二酸化炭素改質反応、ドライリフォーミングを起こすことができる光触媒材料の開発に成功した。従来法のような加熱を必要とせず、燃料の消費が大幅に抑えられ、地球温暖化ガスを有効利用できる方策として期待できる。

森川らは、本研究領域期間中において、一枚の板状の電極からなる、CO₂ と H₂O を原料とする太陽光変換効率 4.6%の人工光合成素子(人工の葉)を実現し、本研究領域終了後には、1m 角の大型セルで変換効率 10%を超える世界トップレベルの人工光合成セルを実現した。このような高効率な人工光合成系の実現には、半導体と金属錯体のハイブリッド光触媒および光電極の開発が鍵を握っている。森川は、ハイブリッド光電極を用いる事で、太陽光変換効率を明示可能な CO₂ と H₂O を原料とする人工光合成システムを世界で初めて報告した研究者であり、本技術のパイオニアと言える。この成果が契機となり、半導体と金属錯体のハイブリッド光触媒や光電極を用いる人工光合成の研究開発が、世界的にも活発に行われるようになったことから、現在の研究開発の潮流の形成に大きく貢献したものと言える。

上記②の達成目標に対する発展状況について、

小林らは、本研究領域期間中、「フロー精密合成」という新しい概念を実現した。その後、産業界や学術の世界において、このフロー精密合成に関する研究が世界的に活発に進められており、本成果は、現在の世界的潮流のきっかけを作ったと言える。環境調和を志向した触媒的炭素-炭素結合生成反応の開発に関し、①40 年来の懸案であったアミドやエステルを原料として直接用いる触媒的不斉マンニッヒ反応の開発に成功、②反応媒体としての水、固体のキラル触媒及び水と混和しない原料を反応させることで、水を繰り返し使用可能にす

る廃棄物フリーの不斉合成技術の開発に成功した。近年、②のような、小林らの提唱する有機合成アクアケミストリーと呼ばれる水溶媒有機合成技術が、学術的にも大きく発展してきている。

佐藤哲也らは、カルボン酸やアミド基等のカルボニル基を配向基とする遷移金属触媒を用いた様々な炭素-水素結合活性化によるカップリング反応の開発を進め、 π 共役分子を一段階で合成するための手法、生物活性分子などの機能性分子を簡便に合成するための手法の開発に成功した。

柴崎らは、協奏機能型不斉触媒による安価なアルキルニトリルのダイレクト型不斉付加反応の開発に成功した。この知見は、アルキルニトリルをキラル医薬品合成の原料として広く利用するための突破口になるものと期待される。

茶谷らは、様々な二座配向基を利用した炭素-水素結合活性化を経る触媒反応を見いだした。この知見により、結合の反応性に大きく依存している現在の有機合成手法の多様化が期待できる。

鳶巣らは、様々な不活性シグマ結合の触媒的変換手法の開発に成功した。この知見により、炭素-ハロゲン結合やパイ結合などの切断されやすい化学結合の変換に依存している現在の有機合成手法の多様化が期待できる。

平野らは、ホウ素置換基を有する共役トリエン化合物や非共役ポリエン化合物を触媒的に1段階で合成し、共役トリエン構造の位置選択的導入や非共役ジエン構造を導入する反応を開発した。この手法を活用したホウ素やケイ素置換基などの反応性官能基を有する共役ポリエンやスキップジエンの合成と生理活性物質への応用を進めている。

山本らが開発した触媒的ペプチド合成の手法は、触媒でアミノ基と繋がり、同時にカルボン酸を活性化する方法のため、これまでは、防ぐことができなかったラセミ化を防ぐことができる。従来のペプチド合成では、当量の高価な縮合試薬を用いて、一残基ずつ延長していくことになるため、極めて高コストであった。しかし、山本らの開発した一連の方法では、収束的合成によって合成工程を大幅に減らすことも可能となるため、反応工程数の大幅削減による低コスト化が期待できる。また、これらの取り組みで得られた知見を環状ペプチドや中分子ペプチドの簡便合成に適用することにより、近年創薬分野において注目されているペプチド医薬の新たな創製が期待される。

上記③の達成目標に対する発展状況について、

田中らは、様々な高歪み π 共役分子の触媒的不斉合成を達成した。その中でも、特筆すべき成果として、ロジウム触媒を用いた環状ドデカインおよびペンタデカインの分子内環化三量化反応による高収率なベルト型[8]シクロパラフェニレン(CPP)およびエナンチオリッチメビウス型[10]CPPの合成に世界で初めて成功した。これらの成果は、複雑な3次元芳香族炭化水素の合成にも広く適用可能であるとともに、キラル光学材料など機能性有機材料への応用が期待される。

依光らは、本研究領域期間中において、芳香環に埋め込まれた原子を別の原子に置換する、芳香環メタモルフォシスと呼ばれる画期的な有機合成手法を提案した。本研究領域終了後も本研究を発展させており、ベンゾフラン骨格やピロール環へホウ素などの様々な原子の埋め込みに成功した。本手法により、アザボリン等の様々なヘテロ芳香環の合成が容易になり、新たな医薬品ならびに機能性有機材料の創出も期待できる。

特に社会・経済への波及効果が大きい代表的な研究成果の発展は、以下に見ることが出来る。

上記①の達成目標に対する発展状況について、

北川が発見した PCP/MOF 技術に関するベンチャー会社 Atomis が起業されている。

椿らは、JST 未来社会において、芳香族（特にパラキシレン）、メタノール、灯油、オレフィンの CO₂ からの直接合成に関して、触媒並びにプロセスの観点で検討を進めた結果、世界をリードする反応効率や生成物収率を得ることに成功している。ここで得られた成果は、更に、NEDO プロジェクトにて、①世界最先端の取り組みとして、CO₂ からキシレンを工業的に製造する実用的な技術開発や、②CO₂ から LPG を製造する実用的な技術開発へと発展している。

姫田らは、本研究領域期間中に見いだした高性能ギ酸脱水素化反応による高圧水素製造技術を、CREST への採択に繋げた。この CREST において、常圧条件で、世界トップレベルの高圧水素を発生する触媒開発に成功した。さらに本成果は、NEDO プロジェクトへと発展している。

藤嶋らは、炭化水素系溶媒にマイクロ波を照射し、液体の中でプラズマを発生させることで基板上にダイヤモンドを合成する技術を確認し、基板を走査することでダイヤモンド面積の拡張に成功した。この研究成果を進展させ、NEDO プロジェクトに採択され、カーボンリサイクル技術の確立に取り組んでいる。

森川らは、人工光合成セルの実用化に向け、高効率化と大型化の検討を進めた。その結果、①光を電子に変換する太陽電池モジュール、②①の出力電力を用いて H₂O を酸化し、電子と水素イオン(プロトン)を取り出す酸化電極、③CO₂ と②で得た電子とプロトンからギ酸を合成する還元電極、の3つを組み合わせた装置を開発に成功し、1m 角で変換効率 10.5% (このクラスでは世界最高) の人工光合成セルを実現した。所属機関は 2030 年代の技術確立を目指すとしており、将来的には、工場等から排出される CO₂ を回収し、この人工光合成にて再資源化するシステムなどの実現が期待できる。

上記②の達成目標に対する発展状況について、

稲垣らの開発したビピリジン配位子を骨格に導入したメソポーラス有機シリカ (BPy-PMO) は、試薬メーカーより販売が開始され、様々な金属錯体の固定化担体としての利用が広がっている。

小林らは、医薬品、香料、殺菌剤、酸化防止剤の合成に連続フロー法の適用が可能であることを示した。また、AMED、国立研究開発法人農業・食品産業技術総合研究機構(農研機構)

生研支援センター、NEDO プロジェクトにも参画し、本フロー法の実用化に向けた技術開発を進めている。一連の成果は、医薬および化学メーカーから大きな注目を集めており、今後同様の手法を用いる医薬品等の実生産につながることを期待される。この実例として、アクティブファーマは、2020 年より小林らと共同で、連続フロー法の商業化検討を進めている。その中でも、前立腺肥大治療薬（タムスロシン塩酸塩）については、日本薬局方の品質基準適合確認を完了し、2023 年度には原薬等登録原簿の登録を予定するなど、本格的な商業化検討を進めており、商業化すれば世界初の事例となる。

松永らは、本研究領域期間中に見いだしたコバルト触媒の安定性評価を行い、関東化学からの試薬としての市販化へと繋げ、広く利用可能なものとした。

山本らは、本研究領域期間中や終了後、A-STEP や NEDO プロジェクトに採択され、産業界と連携し、山本らの触媒的ペプチド合成技術の実用化に向けた技術開発を進めた。また、山本らの開発した触媒的ペプチド合成技術を活用するベンチャー企業「ペップイノーバ」も設立された。山本の研究室では、数社の企業からの研究員を受け入れる形式での共同研究を進めており、これらの企業には、触媒的ペプチド合成技術に関する特許の実施許諾も行った。

上記③の達成目標に対する発展状況について、

企業から、田中らの開発した新触媒の発売が開始された。

依光らの開発した反応に関する試薬が、東京化成より販売開始された。

上記①や②の達成目標に対する一連の成果は、今後、低炭素社会の実現、新規触媒反応の創成、化学・製薬産業の国際的競争力強化や周辺産業の活性化に貢献することが期待される。

上記③の達成目標に対する一連の成果は、今後、新機能を有する π 電子系分子の創成に貢献することが期待できる。

先導的物質変換領域(ACT-C) まとめ図

戦略目標、達成目標/プロジェクトの目標 (ねらい)	インプット	アクティビティ/アウトプット	アウトカム (short/mid-term)		アウトカム (long-term) / インパクト																																																																																																																																		
			～追跡調査時点	今後予想される展開	今後想定される波及効果																																																																																																																																		
<p>目的・目標</p> <p>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」</p> <p>達成目標 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。</p> <p>1. 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</p> <p>2. 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的物質変換技術の創出</p> <p>3. n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</p>	<p>研究体制</p> <p>研究総括： 國武豊喜</p> <table border="1"> <tr> <th>No.</th> <th>研究代表者</th> </tr> <tr><td>1</td><td>稲垣 伸二</td></tr> <tr><td>2</td><td>犬丸 啓</td></tr> <tr><td>3</td><td>岩澤 伸治</td></tr> <tr><td>4</td><td>梅田 実</td></tr> <tr><td>5</td><td>横野 昭尚</td></tr> <tr><td>6</td><td>牛越 専介</td></tr> <tr><td>7</td><td>小澤 文幸</td></tr> <tr><td>8</td><td>垣内 史敏</td></tr> <tr><td>9</td><td>川口 博之</td></tr> <tr><td>10</td><td>北川 進</td></tr> <tr><td>11</td><td>北村 雅人</td></tr> <tr><td>12</td><td>久新 莊一郎</td></tr> <tr><td>13</td><td>倉橋 拓也</td></tr> <tr><td>14</td><td>小林 修</td></tr> <tr><td>15</td><td>近藤 美欧</td></tr> <tr><td>16</td><td>斎藤 進</td></tr> <tr><td>17</td><td>櫻井 英博</td></tr> <tr><td>18</td><td>笹井 宏明</td></tr> <tr><td>19</td><td>佐藤 哲也</td></tr> <tr><td>20</td><td>佐藤 美洋</td></tr> <tr><td>21</td><td>澤村 正也</td></tr> <tr><td>22</td><td>柴崎 正勝</td></tr> <tr><td>23</td><td>柴田 高範</td></tr> <tr><td>24</td><td>高田 十志和</td></tr> <tr><td>25</td><td>田中 健</td></tr> <tr><td>26</td><td>茶谷 直人</td></tr> <tr><td>27</td><td>椿 範立</td></tr> <tr><td>28</td><td>鷲巢 守</td></tr> <tr><td>29</td><td>中村 潤児</td></tr> <tr><td>30</td><td>成田 吉徳</td></tr> <tr><td>31</td><td>西原 康師</td></tr> <tr><td>32</td><td>野村 琴広</td></tr> <tr><td>33</td><td>羽村 季之</td></tr> <tr><td>34</td><td>東林 修平</td></tr> <tr><td>35</td><td>姫田 雄一郎</td></tr> <tr><td>36</td><td>檜山 爲次郎</td></tr> <tr><td>37</td><td>平野 雅文</td></tr> <tr><td>38</td><td>平尾 俊一</td></tr> <tr><td>39</td><td>深澤 愛子</td></tr> <tr><td>40</td><td>藤嶋 昭</td></tr> <tr><td>41</td><td>松永 茂樹</td></tr> <tr><td>42</td><td>三上 幸一</td></tr> <tr><td>43</td><td>宮内 雅浩</td></tr> <tr><td>44</td><td>村井 利昭</td></tr> <tr><td>45</td><td>村上 正浩</td></tr> <tr><td>46</td><td>森川 健志</td></tr> <tr><td>47</td><td>森 健彦</td></tr> <tr><td>48</td><td>山田 陽一</td></tr> <tr><td>49</td><td>山本 尚</td></tr> <tr><td>50</td><td>吉田 拓人</td></tr> <tr><td>51</td><td>依光 英樹</td></tr> </table>	No.	研究代表者	1	稲垣 伸二	2	犬丸 啓	3	岩澤 伸治	4	梅田 実	5	横野 昭尚	6	牛越 専介	7	小澤 文幸	8	垣内 史敏	9	川口 博之	10	北川 進	11	北村 雅人	12	久新 莊一郎	13	倉橋 拓也	14	小林 修	15	近藤 美欧	16	斎藤 進	17	櫻井 英博	18	笹井 宏明	19	佐藤 哲也	20	佐藤 美洋	21	澤村 正也	22	柴崎 正勝	23	柴田 高範	24	高田 十志和	25	田中 健	26	茶谷 直人	27	椿 範立	28	鷲巢 守	29	中村 潤児	30	成田 吉徳	31	西原 康師	32	野村 琴広	33	羽村 季之	34	東林 修平	35	姫田 雄一郎	36	檜山 爲次郎	37	平野 雅文	38	平尾 俊一	39	深澤 愛子	40	藤嶋 昭	41	松永 茂樹	42	三上 幸一	43	宮内 雅浩	44	村井 利昭	45	村上 正浩	46	森川 健志	47	森 健彦	48	山田 陽一	49	山本 尚	50	吉田 拓人	51	依光 英樹	<p>論文</p> <table border="1"> <tr><td>成果論文</td><td>2109(346)</td></tr> <tr><td>発展論文</td><td>880(90)</td></tr> <tr><td>展開論文</td><td>726(84)</td></tr> </table> <p>()はtop10%以内の論文数</p> <p>特許出願・登録</p> <table border="1"> <tr> <th rowspan="2">出願・登録状況</th> <th rowspan="2">期間中</th> <th colspan="2">終了後</th> </tr> <tr> <th>出願</th> <th>登録</th> </tr> <tr> <td rowspan="2">出願</td> <td>国内</td> <td>100</td> <td>92</td> </tr> <tr> <td>海外</td> <td>32</td> <td>30</td> </tr> <tr> <td rowspan="2">登録</td> <td>国内</td> <td>68</td> <td>15</td> </tr> <tr> <td>海外</td> <td>14</td> <td>0</td> </tr> </table> <p>実用化・製品化</p> <ul style="list-style-type: none"> 配位子を導入したメソポーラス有機シリカの試薬販売開始 (稲垣) 共同研究先のアクティブファーマが、連続フロー法による前立腺肥大治療薬の本格的な商業化を検討中 (小林) 医薬品原体 (複数) や農薬中間体の製造技術に関する特許の実施許諾 (小林) 新触媒の発売開始 (田中) CO₂と水素からのパラキシレン直接合成に関する特許の実施許諾及び連携企業によるベンチプラント運転 (椿) CO₂と水素からのLPGの直接合成に関し、連携企業による小型プラント準備中 (椿) コバルト触媒の試薬販売開始 (松永) 新反応に関する試薬販売開始 (依光) <p>ベンチャー</p> <ul style="list-style-type: none"> 株式会社 Atomis (京大発、北川が発見したPCP/MOF技術のベンチャー。北川は、同社のアドバイザー) 株式会社 ペッピーノバ (山本が開発した革新的なペプチド合成技術のベンチャー。山本は、同社の最高顧問) 	成果論文	2109(346)	発展論文	880(90)	展開論文	726(84)	出願・登録状況	期間中	終了後		出願	登録	出願	国内	100	92	海外	32	30	登録	国内	68	15	海外	14	0	<p>科学技術的および社会・経済的な波及効果</p> <p>(1)遷移金属錯体触媒を用いるエチレンとCO₂からのアクリル酸合成法の開拓 (岩澤) (2)PCP触媒によるCO₂固定化反応の開拓 (北川) (3)CO₂からの新しいGas-to-Liquid触媒技術開発 (椿) (4)CO₂分子の振動励起によるCu触媒表面における原子状水素との反応過程の実証 (中村) (5)ギ酸からの高圧水素製造技術の開発 (姫田) (6)大面積・高品質ダイヤモンド電極の製造技術開発 (藤嶋) (7)メタンによるCO₂改質反応用光触媒の開発 (宮内) (8)太陽光と水でCO₂を資源化する光触媒反応系の開発 (森川)</p> <p>(1)フローシステムを用いる医薬品等の連続生産法の開発 (小林) (2)カルボン酸やアミド基等のカルボニル基を配向基とする遷移金属触媒を用いたC-H結合活性化によるカップリング反応の開発 (佐藤哲也) (3)協奏機能型不斉触媒によるアルキルニトリルのダイレクト型不斉付加反応開発 (柴崎) (4)二座配向基を利用したC-H結合活性化を経る触媒反応の開発 (茶谷) (5)不活性シグマ結合の触媒的変換手法の開発 (鷲巢) (6)触媒的直鎖交差二量化反応による合成ビルディングブロックの合成と応用 (平野) (7)触媒的ペプチド合成技術の開発 (山本)</p> <p>(1)高歪みn共役分子の触媒的不斉合成法開発 (田中) (2)芳香環メタモルフォシスによる新規n電子系分子構築法の提案 (依光)</p>	<p>(1)低環境負荷なアクリル酸合成法の実現 (岩澤) (2)PCPのCO₂固定化触媒としての応用範囲の拡大 (北川) (3)CO₂からパラキシレン等有用化学品への変換技術の実用化 (椿) (4)CO₂からメタノールへの合成反応の省エネプロセスの実現 (中村) (5)安価・大規模な水素の貯蔵・輸送と高圧水素供給システム構築への貢献 (姫田) (6)カーボンリサイクル技術への応用 (藤嶋) (7)ドライイフォーミング実用化への貢献 (宮内) (8)人工光合成によるCO₂の再資源化システムの実現 (森川)</p> <p>(1)フローシステムを活用した医薬品等の実用化 (小林) (2)本合成法の医学や天然物分野での活用 (佐藤哲也) (3)本合成法の医薬品合成への活用 (柴崎) (4)新規C-H結合活性化による有機合成法多様化の実現 (茶谷) (5)新規シグマ結合活性化による有機合成法多様化の実現 (鷲巢) (6)短工程な生理活性物質合成の実現 (平野) (7)新規ペプチド医薬創製 (山本)</p> <p>(1)キラル光学材料など機能性有機材料の創成 (田中) (2)新規ヘテロ芳香環を含む医薬品や機能性材料の創成 (依光)</p>	<p>・低炭素社会実現への貢献 ・新規触媒反応の創成 ・化学・製薬産業の国際的競争力強化、周辺産業の活性化</p> <p>・低炭素社会実現への貢献 ・新規触媒反応の創成 ・化学・製薬産業の国際的競争力強化、周辺産業の活性化</p> <p>・新機能を有するn電子系分子の創成</p>
No.	研究代表者																																																																																																																																						
1	稲垣 伸二																																																																																																																																						
2	犬丸 啓																																																																																																																																						
3	岩澤 伸治																																																																																																																																						
4	梅田 実																																																																																																																																						
5	横野 昭尚																																																																																																																																						
6	牛越 専介																																																																																																																																						
7	小澤 文幸																																																																																																																																						
8	垣内 史敏																																																																																																																																						
9	川口 博之																																																																																																																																						
10	北川 進																																																																																																																																						
11	北村 雅人																																																																																																																																						
12	久新 莊一郎																																																																																																																																						
13	倉橋 拓也																																																																																																																																						
14	小林 修																																																																																																																																						
15	近藤 美欧																																																																																																																																						
16	斎藤 進																																																																																																																																						
17	櫻井 英博																																																																																																																																						
18	笹井 宏明																																																																																																																																						
19	佐藤 哲也																																																																																																																																						
20	佐藤 美洋																																																																																																																																						
21	澤村 正也																																																																																																																																						
22	柴崎 正勝																																																																																																																																						
23	柴田 高範																																																																																																																																						
24	高田 十志和																																																																																																																																						
25	田中 健																																																																																																																																						
26	茶谷 直人																																																																																																																																						
27	椿 範立																																																																																																																																						
28	鷲巢 守																																																																																																																																						
29	中村 潤児																																																																																																																																						
30	成田 吉徳																																																																																																																																						
31	西原 康師																																																																																																																																						
32	野村 琴広																																																																																																																																						
33	羽村 季之																																																																																																																																						
34	東林 修平																																																																																																																																						
35	姫田 雄一郎																																																																																																																																						
36	檜山 爲次郎																																																																																																																																						
37	平野 雅文																																																																																																																																						
38	平尾 俊一																																																																																																																																						
39	深澤 愛子																																																																																																																																						
40	藤嶋 昭																																																																																																																																						
41	松永 茂樹																																																																																																																																						
42	三上 幸一																																																																																																																																						
43	宮内 雅浩																																																																																																																																						
44	村井 利昭																																																																																																																																						
45	村上 正浩																																																																																																																																						
46	森川 健志																																																																																																																																						
47	森 健彦																																																																																																																																						
48	山田 陽一																																																																																																																																						
49	山本 尚																																																																																																																																						
50	吉田 拓人																																																																																																																																						
51	依光 英樹																																																																																																																																						
成果論文	2109(346)																																																																																																																																						
発展論文	880(90)																																																																																																																																						
展開論文	726(84)																																																																																																																																						
出願・登録状況	期間中	終了後																																																																																																																																					
		出願	登録																																																																																																																																				
出願	国内	100	92																																																																																																																																				
	海外	32	30																																																																																																																																				
登録	国内	68	15																																																																																																																																				
	海外	14	0																																																																																																																																				
<p>展開</p> <p>研究終了後の科研費、JST、NEDO、AMED等からの研究助成金 (1千万円/件以上) の獲得 (領域全体98件)。うち、1億円/件以上の大型研究助成金を獲得の研究代表者 12名 (岩澤、梅田、北川、小林、高田、茶谷、椿、野村、姫田、村上、山本、依光)。</p> <p>国内外の研究機関ならびに企業との多数の共同研究やネットワークの形成</p>			<p>受賞/人材育成・成長等</p> <p>受賞計71件： 文部科学大臣表彰 (笹井、澤村、椿、中村、森川)、 Highly Cited Researchers (北川、佐藤哲也、茶谷)、 瑞宝中綬章 (柴崎、山本)、 Arthur C. Cope Scholar Award (茶谷、村上)、 日本化学会賞 (岩澤、小林、村井、村上)、 日本学士院会員 (北川)、 紫綬褒章 (小林)、 文化功労者 (山本)、 日本学術振興会賞 (依光)、 日本学士院学術奨励賞 (依光) 等、 著名な賞を多数受賞</p>																																																																																																																																				

2.3.2 研究成果の科学技術の進歩への貢献

研究成果の科学技術の進歩への貢献につき、1.1項に記載の3つの具体的達成目標別の代表的事例を以下に示す。

(1) 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

岩澤らは、①遷移金属錯体触媒を用いるエチレンと二酸化炭素からのアクリル酸合成法の開拓を進めた。例えば、エチレンと二酸化炭素からのアクリル酸合成に取り組み、側鎖にホスフィノメチル基を有するN-ヘテロ環カルベン配位子(NHC-P配位子)を持つニッケル錯体を用いて、ニッケル錯体としては世界最高の触媒回転数を達成した¹¹。また、ルテニウム錯体を用いて初めてエチレンと二酸化炭素からのアクリル酸合成を実現した¹²。②可視光エネルギーを利用する二酸化炭素固定化反応の開発にも成功した。例えば、光酸化還元触媒とカルボキシル化触媒を組み合わせることで、スチレン類や電子不足アルケン類のヒドロカルボキシル化反応¹³、ハロゲン化アリアル、アリアルトリフラート、アルケニルトリフラート類を基質とするカルボキシル化反応¹⁴、及び、CO₂およびH₂によるスチレンの接触直接ヒドロカルボキシル化¹⁵が効率良く進行することを世界に先駆けて明らかにした。可視光エネルギーを利用する二酸化炭素固定化反応の開発は、岩澤らが先導して成し遂げた研究成果であり、現在世界中で活発な研究が行われている。

北川らは、①サイズ選択性を示す触媒サイトを組み込んだ柔軟PCPを用いたCO₂とエポキシシドの環化付加反応を、高い触媒効率で実現した¹⁶。②柔軟骨格を持つPCPを用いた、CO₂を含む分離困難な気体混合物の分離を行うための新しい機構、理論開発と実証に成功した¹⁷。③室温では2気圧圧縮するだけで爆発的に反応するアセチレン貯蔵を、ボンベ圧1気圧程度で取り出し、2気圧以下で高い貯蔵能を持つPCPの開発に成功した¹⁸。

椿らは、研究期間中の成果として、合成ガスからギ酸エステル経由の新規低温メタノール合成方法を開発した。Cu-ZnOやCu-Zn-Al-O系触媒系の高表面積化や、固定床、超臨界相反応器の導入により、驚異的な高活性が得られた。本方法は、既に工業化されているICI法の圧力と温度の半分にも関わらず、ワンパス転化率が100%近く、ICI法の理論最大値14%を

¹¹ Chem. Eur. J., 2019, 25, 13504-13508. ; https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI-PROJECT-17H06143/17H06143_kenkyu_shinchoku_hyoka_gaiyo_ja.pdf

¹² Organometallics, 2019, 38, 205-209; Organometallics, 2020, 39, 1561-1572.

¹³ Frontiers in Chemistry, 2019, 7, 371.

¹⁴ Org. Lett., 2019, 21, 4486-4489.; Bull. Chem. Soc. Jpn., 2021, 94, 1846-1853.

¹⁵ Nat. Commun., 2022, 13, 7584.

¹⁶ Nat. Commun., 2019, 10, 4362-4369. ; https://www.kyoto-u.ac.jp/sites/default/files/embed/jaresearchresearch_results2019documents190925_101.pdf

¹⁷ Science, 2019, 363, 387-391. ; https://www.kyoto-u.ac.jp/sites/default/files/embed/jaresearchresearch_results2018documents190125_101.pdf; Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59, 15517-15521.

¹⁸ Nat. Chem., 2022, 14, 816-822. ; https://www.icems.kyoto-u.ac.jp/_wp/wp-content/uploads/2022/04/pr_icems_kitagawa_2204.pdf

大幅に上回り、触媒空時収率 (STY) は 500–1300g/kg-cat · h (未反応ガスのリサイクルなし) と、ICI 法の 400g/kg-cat · h (未反応ガスのリサイクルあり) を超える結果を得た。本発明は、直近 20 年来のメタノール・DME 分野における唯一のブレイクスルーである。また、合成ガス転換の諸反応において、椿が発明したカプセル触媒を用いて、複数の反応を一括で完結する画期的な新触媒プロセスを開発した。一例として、新規カプセル触媒を発明し、CO+CO₂+H₂ から 6 つの触媒反応を一括して付加価値の高いパラキシレンまでの直接合成を、世界で初めて成功した。

中村らは、①Cu 触媒表面の原子状水素と CO₂ 分子の反応がこれまで例のない CO₂ の振動励起によって進み、Cu 表面のエネルギー (温度) によらないことを明らかにした¹⁹。本結果は、このようなタイプの反応機構について、実際の事例を見いだした世界初の報告である。これにより、二酸化炭素からメタノールを合成する触媒反応を、「状態間化学 (State-to-State Chemistry)」を応用した省エネルギープロセスによって実現する道が開かれた。②メタノール合成のメカニズムに関し、原子状水素とフォルメートの反応実験において、ジオキシメチレン中間体を初めて検出し、エネルギーダイアグラムを作製することにも成功した²⁰。

姫田らは、複数の活性点による二酸化炭素の連続的な水素化を狙い、イリジウム金属を 2 個持つ複核イリジウム触媒を新たに開発した。その結果、水相で複核錯体触媒を用いると、温和な条件でもメタノールの生成が確認できた。複核イリジウム錯体触媒を固体の状態で、水素と二酸化炭素の混合ガスと反応させると、メタノール生成量は 30 倍増加し、メタンや一酸化炭素も検出されなかった。反応の温度が 30℃、あるいは圧力が 0.5MPa でも、二酸化炭素をメタノールへ変換することに成功した。本成果により、二酸化炭素からのメタノール合成を低温・低圧化するための触媒開発の基盤的な知見が得られた。今後カーボンリサイクルの基幹物質であるメタノール製造プロセス用高効率触媒開発への貢献が期待される²¹。

ドライリフォーミングは、温室効果ガスのメタンと二酸化炭素を有用な化学原料に変換できる魅力的な反応であるが、800 度以上の加熱が必要で、かつ加熱による触媒凝集並びに炭素析出による劣化の問題から、実用化には至っていない。一方、宮内らは、低温でメタンの二酸化炭素改質反応、ドライリフォーミングを起こすことができる光触媒材料の開発に成功した²²。ロジウムとチタン酸ストロンチウムからなる複合光触媒を開発し、光照射のみでドライリフォーミングを達成した。加熱を必要としないため、燃料の消費が大幅に抑えられるとともに、ヒーターなどによる加熱による触媒の劣化が起こらず長期間安定的に反応を継続することができ、地球温暖化ガスを有効利用できる方策として期待できる。

¹⁹ Nat. Chem., 2019, 11, 722–729.; <https://www.tsukuba.ac.jp/journal/images/pdf/190624nakamura-1.pdf>

²⁰ J. Am. Chem. Soc., 2022, 144 (27), 12158–12166.; <https://www.kyushu-u.ac.jp/ja/researches/view/773>

²¹ https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2021/pr20210114/pr20210114.html; J. Am. Chem. Soc. 2021, 143, 1570–1576.; 特開 2019–202301.

²² <https://www.jst.go.jp/pr/announce/20200128/index.html#YOU01>; Nat. Catal., 2020, 3, 148.; Chem Catalysis, 2022, 2, 321.; J. Energy Chem., 2022, 71, 562.; 特許第 6933337 号.

森川らは、本研究領域期間中において、太陽光変換効率 4.6%、本研究領域終了後には、大型セル (7.2% (36cm 角)、10.5% (10,000cm²)) で世界トップレベルの人工光合成セルを実現した。このような高効率な人工光合成系の実現には、半導体と金属錯体のハイブリッド光触媒や光電極の開発が鍵を握っている。森川は、ハイブリッド光電極を用いる事で、太陽光変換効率を明示可能な CO₂ と H₂O を原料とする人工光合成システムを世界で初めて報告した研究者であり、本技術のパイオニアと言える。この成果が契機となり、半導体と金属錯体のハイブリッド光触媒や光電極を用いる人工光合成の研究開発が、世界的にも活発に行われるようになったことから、現在の研究開発の潮流の形成に大きく貢献したものとと言える²³。

(2) 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的物質変換技術の創出

小林らは、研究期間中において、独自に開発した高分子固定化キラルカルシウム触媒を用いる不斉 1,4-付加反応を鍵段階とする連続フロー法による抗炎症薬 (*R*)-ロリプラム ((*R*)-Rolipram) の全合成を実現し、医薬品等の精密化学品の供給法を大きく換えうる画期的な成果を得た。この成果は、「フロー精密合成」という新しい概念を実現したものであり、現在の世界的な潮流を作るきっかけを作った。また、環境調和型有機合成手法の開発を志向した、有害性の低い金属や水や光を活用する触媒的炭素-炭素結合生成反応を開発した^{24,25,26}。この中でも特筆すべき成果としては、以下の①、②が挙げられる。①有機反応の中でも最も基本的かつ重要なマンニッヒ反応において、40 年来の懸案であったアミドやエステルを原料として直接用いる触媒的不斉マンニッヒ反応の開発に成功した²⁵。本研究で得られた成果により、反応点上に存在する水素原子の酸性度が非常に低い地球上に豊富に存在する原料を用いる、さまざまな触媒的不斉合成反応の開拓につながることを期待される。②反応媒体として水を用い、キラル触媒と水を繰り返し使用可能にする廃棄物フリーの不斉合成技術の開発に成功した²⁶。本研究成果は、水そのものの環境調和性、安全性、経済性に加えて、後処理の簡便性や有機溶媒中を凌駕する触媒活性の発現など、精密有機合成の基本戦略に革新的なパラダイムシフトをもたらし得るものである。近年、②のような、小林らの提唱す

²³ 森川先生インタビュー結果 (2023 年 1 月 24 日)

²⁴ Chem. Lett., 2019, 48, 1248-1250.; Org. Lett., 2020, 22, 2328-2332.; ACS Catal., 2020, 10, 10546-10550.; Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60, 3407-3411.; Bull. Chem. Soc. Jp., 2021, 94, 1757-1759.; J. Am. Chem. Soc., 2021, 143, 5598-5604; Org. Lett., 2021, 23, 5693-5697.; Angew. Chem. Int. Ed., 2022, 61, e202202335.

²⁵ プレスリリース「マンニッヒ反応における 40 年来の問題を解決」(2021. 4. 7)、<https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2021/7247/>

²⁶ プレスリリース「キラル触媒と溶媒を繰り返し使用可能な不斉合成技術：水溶媒による環境負荷低減とエネルギー消費量の削減を実現」(2022. 4. 27)、<https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2022/7842/>

る有機合成アクアケミストリー²⁷と呼ばれる水溶媒有機合成技術が、学術的にも大きく発展してきている^{28, 29}。

佐藤哲也らは、カルボン酸やアミド基等のカルボニル基を配向基とする遷移金属触媒を用いた様々な炭素-水素結合活性化によるカップリング反応の開発を進めた。その結果、遷移金属触媒を用いる芳香族カルボン酸類と不飽和化合物との直接カップリングによる様々な π 共役分子を一段階で合成するための手法、生物活性分子などの機能性分子を簡便に合成するための手法の開発に成功した³⁰。これらの成果は、医学や天然物分野の研究者にも注目されており、今後、これらの分野への発展が期待される。

柴崎らは、協奏機能型不斉触媒による安価なアルキルニトリルのダイレクト型不斉付加反応の開発に成功した。一例として、安価なアルキルニトリル類を、デザイン型 Ni ピンサー錯体により触媒的に求核的に活性化し、イミン、アルデヒドに対する高エナンチオ選択的反応の開発に成功した³¹。また、デザイン型 Ni ピンサー錯体によるアルキルニトリルの求核的活性化を進展させ、プロピルニトリルやブチロニトリルといった高級アルキルニトリル類を用いたイミンに対する高エナンチオ選択的反応の開発に成功した³²。アルキルニトリルに関するこれらの一連の成果は、独自の触媒デザインによりこの汎用材料をキラル医薬品合成の原料として広く利用するための突破口となるものであり、今後益々注目されていくものと考えられる。

茶谷らは、以下の①～③を含む二座配向基を利用した炭素-水素結合活性化を経る様々な触媒反応を見いだしている³³。①N, N-二座配向基を有する芳香族スルホンアミドをロジウム触媒存在下、ビニルシランと反応させると、オルト位の炭素-水素結合がビニルシランに分枝型に付加することを初めて見いだした³⁴。②N, N-二座配向基を有するベンジルアミン類がロジウム触媒存在下、様々なアルケンと反応し、炭素-水素結合アルキル化生成物を与えることを見いだした³⁵。この反応はフロー法にも適用できる。③N, S-二座配向基を有する芳香族ア

²⁷ 不溶性有機化合物を水中で反応させるための手法として、有機溶媒や大量の界面活性剤によって可溶化、均一化を図ることがある。これに対して有機溶媒などを用いない手法では、原料は水と混和しない状態で反応し、無溶媒下や有機溶媒中で進行する化学反応とは異なる反応性や選択性を示すことがある。最新の研究ではこのような事例が蓄積されつつあり、小林らのグループでは、このような可溶化を前提としない有機合成手法を有機合成アクアケミストリーと呼んでいる。

²⁸ 小林先生インタビュー結果（2022年12月21日）

²⁹ ACS Cent. Sci. 2021, 7, 5, 739–747.

³⁰ J. Org. Chem., 2018, 83, 5639–5649.; Adv. Synth. Catal., 2019, 361, 5253–5257.; Chem. Asian J., 2020, 15, 802–806.; Chem. Lett., 2020, 49, 1481–1483.; Eur. J. Org. Chem., in press (10.1002/ejoc.202200550); Asian J. Org. Chem., 2022, 11, e202100774.; Synthesis, 2021, 53, 3029–3036.; Asian J. Org. Chem., 2021, 10, 868–871.; Chem. Lett., 2021, 50, 585–588.

³¹ Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60(16), 8739–8743.; Org. Lett. 2019, 21(20), 8187–8190.; Chem. Lett. 2019, 48(11), 1322–1327.

³² Org. Lett. 2022, 24, 3901–3906.

³³ Chem. Rev., 2020, 120 (3), 1788–1887.

³⁴ Chem. Sci., 2020, 11 (2), 389–395.; https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI-PROJECT-17H06091/17H06091_kenkyu_shinchoku_hyoka_gaiyo_ja.pdf

³⁵ Chem. Sci., 2021, 12, 3202–3209.

ミドがパラジウム触媒存在下、オルトベンジル C-H およびメタ C-H 結合の活性化を介したマレイミドとの[3+2]環化反応が進むことを見いだした³⁶。この知見により、結合の反応性に大きく依存している現在の有機合成手法の多様化が期待できる。

鳶巣らは、以下の①～③を含む様々な不活性シグマ結合の触媒的変換手法の開発に成功している。①ニッケル/N-ヘテロ環状カルベン触媒を用いて、安息香酸由来のアミドとノルボルネンを反応させると、アミドのベンゼン環とカルボニル炭素の間の C-C 結合にノルボルネンが挿入した生成物が得られることを発見した³⁷。ひずみにも配向基にも依存しない C-C 結合の触媒的な活性化を達成した点で意義深い。②パラジウム触媒存在下でアシルシランとアルケンとを反応させるとシロキシシクロプロパンが生成することを発見した³⁸。さらにアルケンの代わりにアレンを用いると炭素-ケイ素結合への挿入反応が進行することを明らかにした³⁹。これまでに、触媒的な反応が可能であったのは電子不足および中性誘導体に限定されており、本発見は、触媒的な電子豊富カルベン（フィッシャー型カルベン）の発生法を確立した点で意義深い。③ニッケル触媒による不活性 C-O 結合活性化を活用することで、カルバメートの脱炭酸によるアミノ化を達成した⁴⁰。アミンを用いずに中性条件下でアミノ化できるため、アミンと反応する官能基を持つ基質のアミノ化が可能となった。これらの知見により、炭素-ハロゲン結合やパイ結合などの切断されやすい化学結合の変換に依存している現在の有機合成手法の多様化が期待できる。

平野らは、①共役ジエンとアルキンとの触媒的 direct coupling により、1 つまたは 2 つのホウ素置換基を有する共役トリエン化合物を 1 段階で合成し、共役トリエン構造を位置選択的に導入する反応を開発した⁴¹。これにより、生物活性物質に多く見られる共役ポリエン構造を簡単に短工程で導入できるようになった。②共役ジエンとアルケンとの触媒的交叉二量化反応により、1 つまたは 2 つのホウ素置換基を有する非共役ポリエン化合物を 1 段階で合成し、これまで合成が難しかった 1,4-ジエンや 1,5-ジエンなどの非共役ジエン構造を導入する反応を開発した⁴²。さらにこの反応では、1,4-ジエンなどの 3 位のメチレン上にメチル基などの置換基を有する化合物をエナンチオ選択的に合成することに成功している。

³⁶ Angew. Chem., Int. Ed., 2021, 60 (10), 5189–5192.

³⁷ J. Am. Chem. Soc., 2022, 144(2), 662–666.

³⁸ J. Am. Chem. Soc., 2022, 144(3), 1099–1105.

³⁹ Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202202387.

⁴⁰ J. Am. Chem. Soc., 2019, 141(18) 7261–7265.

⁴¹ New J. Chem., 2021, 45, 14988–14998.; New J. Chem., 2020, 44, 2129–2145.; Chem. Commun., 2019, 55, 10527–10530.; ACS Catalysis, 2019, 9, 1408–1430.; W02020/059824 A1. ; 日本経済新聞電子版 2019 年 8 月 23 日「東京農工大、ホウ素化されたポリエン骨格を 1 つの反応容器内で合成し他の有機分子への骨格導入に成功」

⁴² Tetrahedron Letters, 2019, 60, 150924.; Chem. Commun., 2019, 55, 10527–10530.; W0/2020/162575.

③上記①～②の知見を生かし、ホウ素やケイ素置換基などの反応性官能基を有する共役ポリエンやスキップジエンの合成と生理活性物質への応用を進めている⁴³。

従来のペプチド合成は、主に、アミノ酸のカルボン酸部位を活性化剤で活性化する手法が用いられてきたが、ラセミ化が起こることが課題となっていた。一方、本研究領域期間中やその後の検討で山本らが開発した触媒的ペプチド合成技術は、触媒でアミノ基と繋がり、同時にカルボン酸を活性化する方法のため、これまでは、防ぐことができなかったラセミ化を防ぐことができる⁴⁴。本研究領域時点では、反応基質の配向基としてヒドロキシ基を含有する必要があったが、その後の検討で、ペプチド合成に汎用されている Boc、Cbz、Fmoc の三大保護基に含まれるカルボニル酸素も配向基として働くことを見だし、反応基質の汎用性も大きく広がった⁴⁵。その後、このカルボニル酸素すら必要ない、さらなる画期的な方法を発見した。本方法は、ジケトピペラジン等のラクタムの C-N 結合開裂を利用した方法であり、無溶媒、無金属での合成が可能であるため、経済的である。従来のペプチド合成に不可欠な縮合剤の必要性がなく、原子効率も非常に高い。この反応は、さまざまな官能基を持つ側鎖を持つ基質にも適用可能であり、ラセミ化や重合を伴わないため、対応するペプチドを高収率で得ることができる^{46,7}。従来のペプチド合成では、当量の高価な縮合試薬を用いて、一残基ずつ延長していくことになるため、極めて高コストであった。しかし、山本らの開発した一連の方法では、収束的合成によって合成工程を大幅に減らすことも可能となるため、反応工程数の大幅削減による低コスト化が期待できる⁴⁷。また、これらの取り組みで得られた知見を環状ペプチドや中分子ペプチドの簡便合成に適用することにより、近年創薬分野において注目されているペプチド医薬の新たな創製が期待される⁴⁸。

⁴³ Bull. Chem. Soc. Jpn., 2021, 94, 2113-2132.; Organometallics, 2021, 40, 3370-3388.; Organometallics, 2022, 41, 390-411.; Org. Lett., 2022, 24, 2973-2977.; 日本経済新聞電子版 2022 年 4 月 19 日掲載; 日刊工業新聞 2022 年 4 月 22 日掲載; Chem-Station スポットライトリサーチに選出。
<https://www.chem-station.com/blog/2022/04/iminotriene.html>; <https://www.chem-station.com/blog/2022/02/bdiene.html>; <https://www.youtube.com/watch?v=o50uEnraDL4>

⁴⁴ <https://www.chem-station.com/blog/2019/08/peptide.html>;
https://www3.chubu.ac.jp/documents/research/news/25200/25200_79876a816e3608b24cf0cd245a77b4d1.pdf

⁴⁵ <https://www.chem-station.com/blog/2019/08/peptide.html>;
<https://www.journal.csj.jp/doi/10.1246/bcsj.20200057>

⁴⁶ Chem. Sci., 2022, 13, 6309-6315

⁴⁷ <https://labchem-wako.fujifilm.com/jp/journal/docs/jiho874.pdf>

⁴⁸ https://www.jst.go.jp/kisoken/archives/act-c/evaluation/research_area_posteriori_evaluation.pdf

(3) 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

田中らは、様々な高歪み π 共役分子の触媒的不斉合成を達成した^{49,50,51}。その中でも、特筆すべき成果として、ロジウム触媒を用いた環状ドデカインおよびペンタデカインの分子内環化三量化反応による高収率なベルト型[8]シクロパラフェニレン(CPP)およびエナンチオリッチメビウス型[10]CPPの合成に世界で初めて成功した^{50,52}。さらに、ベルト型芳香族炭化水素の中でも未踏の分子とされた「シクロフェナセン」類縁体のボトムアップ合成と、「キラル型ベルト共役分子」の不斉合成を世界で初めて達成した⁵¹。これらの成果は、複雑な3次元芳香族炭化水素の合成にも広く適用可能であるとともに、キラル光学材料など機能性有機材料への応用が期待される。

依光らは、本研究領域期間中において、芳香環に埋め込まれた原子を別の原子に置換する、芳香環メタモルフォシスと呼ばれる画期的な有機合成手法を発案した。本研究領域終了後も本研究を発展させており⁵³、以下の①～②のような成果を得ている。①ベンゾフラン骨格への埋め込む原子を、ホウ素のみならず、Si、P、Ge、Tiなどの原子への拡張に成功した⁵⁴。②ピロール環の還元的開環を利用するアザボリン環構築法の開発にも成功した⁵⁵。この手法では、ピロール誘導体であるN-フェニルインドールに対して単体リチウム粉末を作用させると、環内炭素-窒素結合の切断を伴った還元的リチオ化がおこる。生じた有機リチウム種に対してホウ素求電子剤として有機ボロン酸エステルを作用させることで、ベンゾアザボリンを合成できることを示し、アザボリン環構築の新技术を確立した。アザボリンの合成ルートはつい最近まで存在せず、最近報告された合成法も、多段階を要し、一般性に欠けていた。本合成方法は、アザボリンの簡便な合成法であり、一般的合成法への第一歩と言える。ベンゼンと等電子構造を有するアザボリンは、将来の重要なヘテロ芳香環の一員となる可能性を秘めており、今後、本手法を用いたアザボリン含有医薬品ならびに機能性有機材料の創出も期待できる。

2.3.3 研究成果の社会・経済への貢献

研究成果の社会・経済への貢献につき、1.1項の3つの達成目標別の代表的事例を以下に示す。

⁴⁹ J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 9834–9842.; Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 11020–11027.; Angew. Chem. Int. Ed. 2019, 58, 9439–9442.; Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61,; Chem. Sci. 2021, 12, 7858–7865.; Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 17951–17957.

⁵⁰ J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 14955–14960.

⁵¹ <https://www.titech.ac.jp/news/2022/063258>

⁵² 田中先生インタビュー結果 (2022年11月17日)

⁵³ Chem. Sci. 2021, 12, 2784–2793.; Chem. Eur. J. 2021, 27, 4567–4572.

⁵⁴ Chem. Lett. 2019, 48, 1019–1028.

⁵⁵ https://www.jstage.jst.go.jp/article/afreport/90/0/90_2021_040/_pdf/-char/ja

(1) 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

2.2.7(1)項に記載のとおり、北川の開発した PCP/MOF 技術に関するベンチャー企業の株式会社 Atomis が起業されている。

椿らは、①JST 未来社会/研究課題「二酸化炭素からの新しい Gas-to-Liquid 触媒技術」(2017～2021 年度)において、日本製鉄と共同で、芳香族(特にパラキシレン)、メタノール、灯油、オレフィンの CO₂からの直接合成に関して、触媒並びにプロセスの観点で検討を進めた結果、世界をリードする反応効率や生成物収率を得ることに成功している^{56,57}。ここで得られた成果は、更に、NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「CO₂を原料としたパラキシレン製造に関する技術開発」(2020～2023 年度)において、世界最先端の取り組みとして、企業と共同で CO₂からキシレンを工業的に製造する実用的な技術開発へと発展している。また、JST 未来社会/研究課題「二酸化炭素からの新しい Gas-to-Liquid 触媒技術」(2017～2021 年度)において、新規複合固体触媒による CO₂と水素からの LPG の直接合成の開発にも成功しており、この技術は、NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「カーボンリサイクル LPG 製造技術とプロセスの研究開発」(2022～2024 年度)において、企業と共同で実用的な技術開発へと発展している⁵⁸。②Fischer-Tropsch (FT) 合成を用いて、合成ガス(一酸化炭素と水素の混合ガス)から航空機ジェット燃料を直接合成することにも世界で初めて成功した。EU による 2020 年からのバイオジェット燃料の商業使用の決定を背景に、航空業界では、バイオジェット燃料もしくは二酸化炭素由来のジェット燃料の実用化が大きな課題となっている。今回開発に成功したジェット燃料製造法は、バイオマスあるいは二酸化炭素をも原料として使用できるため、航空業界の要望に速やかに対応できると期待される⁵⁹。ここで得られた成果は、更に、NEDO「クリーンエネルギー分野における革新的技術の国際共同研究開発事業」/研究課題「CO₂ダイレクト利用ジェット燃料合成によるカーボンリサイクルの国際共同研究開発」(2021～2024 年度)へと発展している⁶⁰。

姫田らは、研究期間中に見いだした高性能ギ酸脱水素化反応による高圧水素製造技術を、CREST/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」(2013～2018 年度)への採択に繋げた。ここでの検討の結果、最終目標最大 40MPa を上回る 100MPa 超の高圧ガス発生現象を確認した。また、発生した高圧ガスの圧力を維持しながら冷却することで気液および固気分離を行い、99%以上の回収率で水素純度 95%以上の高圧水素を得る

⁵⁶ <https://www.nipponsteel.com/tech/report/pdf/417-09.pdf>;

https://www.jst.go.jp/mirai/jp/uploads/saitaku2017/JPMJMI17E2_tsubaki.pdf; Nat. Commun., 2020, 11, 4098.; Chem. Commun., 2020, 56, 9372-9375.; ACS Catal., 2019, 9, 895-901.;

<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20200814/pdf/20200814.pdf>

⁵⁷ 椿先生インタビュー結果(2022年11月24日)

⁵⁸ https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_101530.html; https://www.u-toyama.ac.jp/wp/wp-content/uploads/20220613_2.pdf

⁵⁹ <https://www.jst.go.jp/pr/announce/20180918/index.html>; Nat. Catal., 2018, 1, 787-793.

⁶⁰ <https://www.nedo.go.jp/content/100937924.pdf>

ことにも成功した。常圧条件での触媒性能で世界トップであるだけでなく、高圧ガス発生に関して 30MPa を超える例は、姫田らのチームを除けば 1 例しかなく、100MPa を超える例は姫田らのチームのみが達成している。しかも、連続した高圧ガスの分離精製技術は世界初であり、すなわち、姫田らのチームが開発した一連の技術は、ギ酸からの高圧水素供給技術として、世界唯一の技術といえる。さらに、本成果は、NEDO「クリーンエネルギー分野における革新的技術の国際共同研究開発事業（将来の水素社会実現に向けた水素利用の大幅促進・拡大に貢献しうる革新的技術開発）」/研究課題「ギ酸を活用した化学昇圧による高圧・高純度水素供給技術の国際共同研究開発」（2021～2024 年度）へと発展している⁶¹。姫田らが開発した一連の技術は、将来的な安価・大規模な水素の貯蔵・輸送と高圧水素供給システム構築への貢献が期待される。

ダイヤモンドは半導体や電極などの機能材料として注目されている。ところが、工業利用するには、安価であることや大面積であることが求められている。藤嶋らは、ダイヤモンドの新規な合成法の開発を行い、炭化水素系溶媒にマイクロ波を照射し、液体の中でプラズマを発生させることで基板上にダイヤモンドを合成する技術を確立した。基板を走査することでダイヤモンド面積の拡張に成功した⁶²。本技術によって、従前とは異なる成膜法が確立すれば、ダイヤモンド機能材料が産業界に広く普及することにつながる。これらの研究成果を発展させ、NEDO プロジェクト（NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「ダイヤモンド電極を用いた石炭火力排ガス中の CO₂ からの基幹物質製造開発事業」（2020～2021 年度）、NEDO「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発」/研究課題「ダイヤモンド電極を用いた石炭火力排ガス中 CO₂ からの基幹物質製造」（2022～2024 年度））に採択され、カーボンリサイクル技術の確立に取り組んでいる。

森川らは、研究終了後、人工光合成セルの実用化に向け、更なる高効率化と大型化の検討を進めた。①光を電子に変換する太陽電池モジュール、②①の出力電力を用いて H₂O を酸化し、電子と水素イオンを取り出す酸化電極（触媒：IrO_x）、③CO₂ と②で得た電子とプロトンからギ酸を合成する還元電極（触媒：Ru-polymer）、の 3 つを組合せた装置を開発した。光電変換効率の優れるシリコン太陽電池からの電子生成と、電極の多層化により②③で起こる反応とのバランスを工夫するなど、太陽光変換効率 7.2%（このクラスでは世界最高）の実用太陽電池サイズ（36cm 角）の人工光合成セルを実現した⁶³。この成果に続いて、10,000cm²で 10.5%（このクラスでは世界最高）も実証した⁶⁴。所属機関は 2030 年代の技術確立を目指すとしており⁶⁵、将来的には、工場等から排出される CO₂ を回収し、この人工光合成にて再資源化するシステムなどの実現が期待できる。

⁶¹ <https://www.nedo.go.jp/content/100942512.pdf>

⁶² Diam. Relat. Mater., 2019, 92, 41-46.; Diam. Relat. Mater., 2016, 63, 12-16.; 特許第 6969743 号.

⁶³ Joule, 2021, 5, 1-19.; https://www.tytlabs.co.jp/cms/news/pdf/press/20210421_press.pdf

⁶⁴ ACS Sustain. Chem. Eng., 2021, 9, 16031-16037.

⁶⁵ <https://www.nature.com/articles/d42473-021-00577-7>

(2) 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的物質変換技術の創出

稲垣らが開発した BPy-PMO は、試薬メーカより販売が開始され⁶⁶、様々な金属錯体の固定化担体としての利用が広がっている。

小林らは、プレガバリン、バクロフェン、ドネペジル、タムスロシン等の医薬品、香料である α -フェランドレン、フェニルアミド系殺菌剤であるメタラキシル、潤滑油の酸化防止剤である Irganox HP-136 にも連続フロー法の適用が可能であることを示した⁶⁷。また、AMED 創薬基盤推進研究事業/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」(2017~2019 年度)、AMED 創薬基盤推進研究事業/研究課題「原薬の実生産へ向けたフロー精密有機合成の高度化」(2020~2022 年度)、農研機構生研支援センターイノベーション創出強化研究推進事業/研究課題「農薬の連続合成一連続微粒子化技術の創出による高機能化」(2021~2023 年度)、NEDO「エネルギー・環境新技術先導プログラム」/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」(2016~2018 年度) や NEDO「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」/研究課題「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」(2019~2025 年度) にも参画し、本フロー法の実用化に向けた技術開発を進めている。一連の成果は、医薬および化学メーカから大きな注目を集めており、今後同様の手法を用いる医薬品等の実生産につながることを期待される。この実例として、アクティブファーマは、2020 年より小林らと共同で、連続フロー法の商業化について検討を進めた結果、前立腺肥大治療薬(タムスロシン塩酸塩)の原薬が、日本薬局方の品質基準に適合することを確認した。今後、この前立腺肥大治療薬の原薬製造の商業化に向けて必要な設備を整備し、2023 年度には原薬等登録原簿の登録を予定しており、商業化すれば世界初の事例となる。このように、小林が、本研究領域期間中に実現した「フロー精密合成」技術は、徐々に実用化段階に来ている⁶⁸。

松永らは、本研究領域期間中に見いだしたコバルト触媒の安定性評価を行い、関東化学からの試薬としての市販化へと繋げ⁶⁹、広く利用可能なものとした。

山本らは、山本らの開発した一連の触媒的ペプチド合成技術の実用化に向けた取り組みも進めている。例えば、A-STEP/研究課題「テーラーメイドペプチドの生産が可能な、タン

⁶⁶ <https://www.tcchemicals.com/US/en/p/B5516>; <https://labchem-wako.fujifilm.com/jp/journal/docs/chem13.pdf>

⁶⁷ <https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/2019/6488/>; <https://www.amed.go.jp/content/000065845.pdf>; https://www.amed.go.jp/news/release_20220126-01.html; Org. Process. Res. Dev., 2019, 23, 961-967.; Angew. Chem. Int. Ed., 2019, 58, 13313-13317.; Chem. Asian J., 2020, 15, 1688-1691.; Org. Process. Res. Dev., 2021, 25, 192-198.; Chem. Asian J., 2021, 16, 1906-1910.; Adv. Synth. Catal., 2021, 364, 18-23.; Angew. Chem. Int. Ed., 2022, 61, e202115643.

⁶⁸ <https://pdf.irpocket.com/C8285/uF1f/sKHo/13f2.pdf>

⁶⁹ https://www.kanto.co.jp/dcms_media/other/OFC-11.pdf

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」(2016～2017年度)や研究課題「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」(2017～2022年度)に採択され、産業界との連携による実用化に向けた技術開発を継続した。NEDO「新産業創出新技術先端研究プログラム」/研究課題「革新的ペプチド合成とペプチド・ハイブリッド樹脂の開発」(2021年度)において、本触媒的ペプチド合成技術を活用した、以下の①～③の開発を進めている。①リユープリン(子宮内膜症治療薬)を直線型と収束型で合成し、市場に提供する。②耐性菌への新抗生物質を合成すると同時に分子修飾し、医薬品として市場に提供する。③蜘蛛の糸人工繊維、ペプチド型接着剤、生分解性樹脂、燃料電池の電解質等のマテリアル合成に向けてペプチドを合成し今後の高分子樹脂、繊維との混合紡糸合成等を達成する⁷⁰。

また、最近、山本らの開発した触媒的ペプチド合成技術を活用するベンチャー企業「ペップイノーバ」(2.2.7(2)項参照)も設立された^{71,7}。中部大学の山本研究室では、数社の企業からの研究員を受け入れる形式で、触媒的ペプチド合成技術に関する共同研究を進めており、これらの企業には、触媒的ペプチド合成技術に関する特許の実施許諾も行った。

(3) 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

企業から、田中らの開発した新触媒の発売が開始された。

依光らの開発した反応に関する試薬が、東京化成より販売開始された⁷²。

2.3.4 その他の特記すべき事項(新たな展開や分野間融合)

本研究領域終了時点では、想定していなかった展開やイノベーション創出への貢献としては、主に、以下のようなものが挙げられる。

小林らが本研究領域期間中に初めて実現した「フロー精密合成」は、当初の予想を超える発展を遂げ、現在の産業界や学術の世界における活発な研究開発の世界的潮流のきっかけを作った。また、小林らの提唱する有機合成アクアケミストリーと呼ばれる水溶媒有機合成技術についても、当初の予想を超える勢いで学術的にも大きく発展してきている²⁸。

椿らの、本研究領域終了時点では、想定していなかった展開として、JST 未来社会/研究課題「二酸化炭素からの新しいGas-to-Liquid触媒技術」(2017～2021年度)にて開発した3Dプリント技術を活用した「自己触媒機能付き金属触媒反応器」を開発した⁵⁷。この技術を用いると、反応管内にかさ高い担持触媒を充填する必要がなくなり、多くの触媒反応器を小型化でき、設備投資・触媒コストの低減につながる。さらに、プラント自体を劇的にコンパクト化することで、従来技術ではスペース的に難しかった洋上生産・車両・船舶上での生産にも展開できる。

⁷⁰ <https://www.nedo.go.jp/content/100942094.pdf>

⁷¹ <https://pepinnova.com/index.html>

⁷² https://www.tcichemicals.com/JP/ja/product/tci-topics/ProductHighlights_20210614

山本らが開発した一連の触媒的ペプチド合成技術は、これまでのペプチド合成の常識を覆す画期的な技術として発展してきており、今後の医薬品市場を一変させるポテンシャルがある⁷。