

## 平成30年度研究拠点形成事業 (A. 先端拠点形成型) 実施計画書

### 1. 拠点機関

日本側拠点機関：	名古屋大学
(ドイツ)側拠点機関：	ミュンスター大学
(カナダ)側拠点機関：	クィーンズ大学

### 2. 研究交流課題名

(和文)：革新的触媒・機能分子創製のための元素機能攻究

(英文)：Elements Function for Transformative Catalysis and Materials

研究交流課題に係るウェブサイト：<http://core.rcms.nagoya-u.ac.jp>

### 3. 採択期間

平成26年4月1日 ～ 平成31年3月31日

( 5年度目)

### 4. 実施体制

#### 日本側実施組織

拠点機関：名古屋大学

実施組織代表者(所属部局・職名・氏名)：総長・松尾清一

コーディネーター(所属部局・職名・氏名)：

トランスフォーマティブ生命分子研究所・教授・山口茂弘

協力機関：京都大学

事務組織：名古屋大学研究協力部研究支援課、名古屋大学理学部事務部

名古屋大学物質科学国際研究センター事務室

#### 相手国側実施組織 (拠点機関名・協力機関名は、和英併記願います。)

(1) 国名：ドイツ

拠点機関：(英文) University of Muenster

(和文) ミュンスター大学

コーディネーター(所属部局・職名・氏名)：(英文)

Organic Chemistry Institute・Professor・Frank GLORIUS

協力機関：(英文) Berlin University of Technology

(和文) ベルリン工科大学

経費負担区分：パターン1

(2) 国名：カナダ

拠点機関：(英文) Queen's University

(和文) クィーンズ大学

コーディネーター (所属部局・職名・氏名)：(英文)

Department of Chemistry・Professor・Cathleen CRUDDEN

協力機関：(英文) なし

(和文) なし

経費負担区分：パターン1

## 5. 全期間を通じた研究交流目標

現代社会は、物質のもつ多様な性質の活用の上に成り立っている。真に優れた新規物質と機能の創出は、経済・産業活動、さらには我々の日常生活にも大きな影響を与え、高度化された文明社会の維持、発展という社会的要請に答えるものといえる。これに対し本事業では、持続可能な社会の実現に資する「グリーン物質変換のための革新的触媒開発」と「人々の暮らしを豊かにする機能性物質の開発」を究極目標に掲げ、元素機能の攻究という視点で切り拓く基礎研究と、それにより創出される物質群の材料科学・生命科学への応用研究に、強力な国際共同研究の推進により挑む。

分子性機能は、触媒機能であれ、光・電子機能であれ、究極的には元素固有の性質とその組み合わせに起因される。それら元素の個性を決定づける基本的性質・要素として、ルイス酸性、酸化還元、配位数、軌道相互作用などを挙げ、これらの視点から遷移金属、典型元素の特性を追究することにより、秀逸な分子系の創出、分子性機能の発現につなげる。これが本事業で掲げる元素機能の攻究である。分子科学は多様な物質を扱う学問であり、元来個別的に発展してきたが、それら従来のアプローチとは異なり、元素機能という統一的視点からの探求により、元素選択則の深い理解が可能となり、触媒、機能性物質の新たな分子設計へとつながるはずである。この切り口をもとに、(i) 高効率触媒および (ii) 光・電子機能性物質の創出を目指した基礎研究と、(iii) 有機エレクトロニクスや高機能ポリマー、(iv) 生物活性物質の探索など、材料科学・生命科学への展開を指向した応用研究を、基礎と応用の双方向性を縦糸に、国際的な連携を横糸に統括的に推進し、触媒・機能分子創製の国際先導研究拠点を形成する。

## 6. 前年度までの研究交流活動による目標達成状況

名古屋大学-京都大学-ミュンスター大-ベルリン工科大-クィーンズ大の5拠点の連携で進めている本プロジェクトでは、これまでの「日独共同大学院プログラム」、「頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム」で推進してきた共同研究を引き続き遂行するとともに、新たなメンバーを加え、いくつかの新規共同プロジェクトをスタートさせた。特に、27年にミュンスターで開催したジョイントシンポジウムでは、ミュンスター側が

カナダ・トロント大と新たに始めた IRTG プログラムとの拡大ジョイントシンポジウムを開催し、ミュンスター・ベルリン工科大・クィーンズ大・トロント大・京大・名大の 6 拠点のメンバーが一同に会し、有意義な共同研究の打ち合せの機会をもつことができた。3 年目となる 28 年度は、カナダ・クィーンズ大で初めてジョイントシンポジウムをクィーンズ大の化学科教員・学生にも広く参加してもらい、本活動を宣伝することができた。29 年度には、再度ドイツでジョイントシンポジウムを開催し、個々の共同研究の推進状況を議論するとともに、今後どのようにプログラムとして発展させるかについて議論することができた。共同研究に関しての昨年度の主な成果、実施状況は以下の通りである。

山口グループと OESTREICH グループとの共同研究では、小笠原（博士学生）を派遣し、耐光性蛍光団の開発に取り組んだ。その中でケイ素架橋蛍光体の新規合成法を見だし、Organometallics に成果を報告した。さらに GLORIUS グループと実施している脂質蛍光プローブの開発研究においても、多喜（准教授）、梶原（修士学生）を派遣し議論を進めるなど、細部を詰めている段階にあり、成果発表に向け順調に進めている。

山子グループは、CRUDDEN・CUNNINGHAM グループと有機テルル化合物を用いた単純エマルジョン重合について検討を行った。重要モノマーであるメタクリル酸メチルの重合の最適化を行い、光照射条件でも制御されて進行し、ポリマーの分子量と分布のみならず、生成したポリマー粒子の粒径サイズも制御できることを明らかにした。

中村グループでは、未活用化学資源の有効利用の観点から、鉄を触媒とする精密有機合成反応の開発を進め、ラジカル反応の第一人者である STUDER グループとの議論を通して、次世代糖尿病治療薬として開発が進んでいる SGLT2 阻害剤であるアリアル-C-グリコシド類の立体選択的な合成手法の開発や、鉄触媒クロスカップリング反応の機構解明に成功した。また、再生可能炭素資源である木質バイオマスの直接変換反応の開発についても、CRUDDEN・JESSOP グループが開発した分離精製技術を組み合わせることを進めている。

田中グループでは、イミン結合を介した共役型大環状化合物の合成手法の開発、およびその液晶性材料への展開を行い、RAVOO 研究室で開発した基質認識が可能な分子認識性化合物と複合化について引き続き検討を進めた。

斎藤グループでは、CRUDDEN・JESSOP グループから CO<sub>2</sub> の固定化に有用なポリ(エチレンイミン)の提供を受け、ポリマー鎖に含まれる複数の二級アミンや環状 2 級アミンのポリ N-メチル化を、独自に開発した混合型金属担持半導体光触媒を用いて検討した。また、H27 年度に派遣した鳴戸がクィーンズ大で見出した卑金属源を用いるカルボン酸の水素化の検討を引き続き CRUDDEN・JESSOP 研究室で進めている。さらに、非天然ペプチドの多様化に向けた触媒反応の開発を進め、opioid 受容体のアゴニストもしくはアンタゴニスト候補分子の化合物ライブラリーをさらに拡大した。

唯グループは、ミュンスター大の GLORIUS グループと共同研究を継続し、GLORIUS グループが開発した N-ヘテロサイクリックカルベンを利用し、触媒的に不活性な固体表面を電子的に活性化させ、有用反応へと展開する研究を行い、その成果を *J. Am. Chem. Soc.* 誌に報告した。また、ミュンスター大の RAVOO グループが加わった共同研究を開始し、N-ヘテロサイクリックカルベン修飾バイメタリックナノ粒子触媒の構造解析を進めた。

若宮グループでは、これまでに WANG グループとの共同研究で得た分子内 BN 配位結合の形成を基軸とした  $\pi$  電子骨格の設計を発展させ、ジピロロジケトン骨格に二つホウ素置換基を導入した骨格を開発した。この骨格をもとに、近赤外領域に吸収をもちながら可視領域に吸収帯をもたない透明近赤外色素材料の開発に成功した。また、WANG グループに中村（博士学生）を派遣し、縮合芳香環の合成法を修得し、低分子系 n 型半導体材料の開発へと展開し、ペロブスカイト太陽電池の透明性電子輸送性材料へ応用した。

## 7. 平成30年度研究交流目標

### <研究協力体制の構築>

名古屋大とミュンスター大とはこれまで実施してきた「日独共同大学院プログラム」、「頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム」での活動を通じて、強固な共同研究体制がすでにできあがっている。26 年度をもってドイツ側のこれまでの基幹プログラムであった IRTG プログラムが終了したため、これまでのアクティビティをいかに維持／強化するかが課題であったが、27 年度にはミュンスターにおいて有意義なジョイントシンポジウムも実施し、順調に活発な共同研究を実施できた。28 年度も、カナダクィーンズ大にて、ミュンスター・ベルリン工科大・クィーンズ大・京大・名大のメンバーが集うジョイントシンポジウムを開催し、地元クィーンズ大より JESSOP 教授や EVANS 教授にも参加してもらい、その際の議論をもとにさらに研究を拡大・加速することができた。29 年度には再度ジョイントシンポジウムの場所をドイツに移し、ミュンスター大学にて実施した。この機会を利用して、本プログラムで構築した国際研究基盤をどのように発展させていくかについて議論した。最終年度の 30 年度には、名古屋にてジョイントシンポジウムを開催し、本プログラムの総括を行うとともに、元素機能の攻究という切り口の下、進行中の共同研究について集中的に議論し、今後の発展へとつなげる。また、国際研究拠点としての今後の展開を具体化するための議論を進める。

### <学術的観点>

本事業では、(1) 元素の特性を活かした触媒機能の攻究、(2) 元素の特性を活かした光・電子機能の攻究、そして、(3) 材料科学・生命科学への応用展開の 3 つを柱に取り組んでいる。遷移金属錯体の配位環境、酸化還元特性や、典型元素化合物のルイス酸性といった要素を構造修飾により最適化することで、高い触媒機能を実現する。また、遷移金属や典型元素の特異な軌道相互作用を活かした分子設計により、特徴的な電子構造をもつ分子系を創出し、優れた光・電子機能を実現する。さらに、有機エレクトロニクス、高機能ポリマー、ソフトマテリアル、表面科学、ケミカルバイオロジーへの展開を図り、(1)、(2) で創出する物質群の価値を高める。最終年度となる本年度は、進行中の共同研究および新たに開始する共同研究を継続的に推進し、総括するとともに、研究活動の新たな基盤となるシーズの探索を行う。

### <若手研究者育成>

本事業では、触媒、機能性分子、材料・生命科学への応用を 3 本柱として共同研究を進めてきた。このような縦割りは、化学を深く掘り下げる上では重要であるが、幅広い視野を

もった人材育成という点では問題である。そこで、本事業を推進する意味の一つとして、この 3 項目を通した幅広い研究能力を養成するため、大学院生や博士研究員、若手研究員を対象に 2~5 ヶ月程度の相互派遣を項目間で行う。この成功例として、山口グループから派遣した大崎（当時博士 2 年）が、GLORIUS 研で最先端の C-H 活性化反応を学び作り上げた蛍光分子を持ち帰り、これをもとにバイオイメージングの蛍光プローブとして造り込むことを達成してみせた。触媒分野と材料・生命分野との専門性の違う分野間で成し得た国際共同研究の成果であり、大崎はこの成果を柱に博士号を取得した。このような事例をさらに増やし、リーダー人材養成と共同研究の推進に努めたい。

#### <その他（社会貢献や独自の目的等）>

本事業の成功の要は、グループ間での密な共同研究の実行にある。これまで名大-ミュンスター大-ベルリン工科大間で培ってきた共同研究の土壌をうまく京大、クィーンズ大も含めた五大学体制へと拡張することに力を入れ、円滑に移行できたと考えている。名古屋大学で推進している WPI 事業や、文部科学省特別経費「統合物質創製化学推進事業」と連動させて多角的に研究展開を図ることで、国際化における理想的な研究環境の構築に引き続き全力で取り組みたい。そして、今後申請予定である卓越大学院プログラム等の国際化事業の基盤としたい。

## 8. 平成30年度研究交流計画状況

### 8-1 共同研究

整理番号	R-5	研究開始年度	平成27年度	研究終了年度	平成30年度
共同研究課題名	(和文) 有機テルル化合物を用いた水系でのリビングラジカル重合 (英文) Ab initio Organotellurium-mediated living radical polymerization in aqueous media				
日本側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	(和文) 山子 茂・京都大学・教授・1-7 (英文) Shigeru YAMAGO・Kyoto University・Professor・1-7				
相手国側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	(英文) Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor・3-1 Michael CUNNINGHAM・Queen's University・Professor・3-22				
30年度の 研究交流活動 計画	<p>山子グループと CRUDDEN・CUNNINGHAM グループとで27～29年度に、水溶性の有機テルル重合制御剤を用いることで、単純なエマルジョン重合 (ab initio emulsion polymerization) が代表的な共役モノマーである スチレン、アクリル酸エステル、メタクリル酸エステルで可能であり、分子量、分子量分布のみならず、ポリマー粒子径も制御できることを明らかにしてきた。中でも、29年度に明らかにした光照射条件下での単純エマルジョン重合は、本領域に新しい可能性を開く成果であり、基礎的な視点のみならず、実用の可能性からも興味深い重合系である。さらに、実用性の観点からは、これまで開発してきた条件では、水溶液中におけるモノマー含量が10%程度と低い点が問題であった。</p> <p>上記を背景として、30年度は光重合系の一般化と高いモノマー含量条件における単純エマルジョン重合系の最適化により、実用的な重合条件の開発を行う。さらに、本重合系をブロック共重合体合成へと展開し、機能性高分子材料創製法としての確立を図る。山子グループは単純エマルジョン重合に適した有機テルル重合制御剤の構造最適化を行うとともに、CRUDDEN・CUNNINGHAM グループの持つ豊富なエマルジョン重合のノウハウを取り入れ、共同で研究の推進を行う。適宜テレビ会議を開く等、進捗状況を共有し、研究の展開の方針を議論する。</p>				
30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>単純エマルジョン重合は産業界で汎用的に用いられている高分子合成法である。一方、有機テルル化合物を用いるリビングラジカル重合は、山子と民間企業との共同研究により、すでに均一重合系を用いて実用化が達成されており、分子量と分布の制御に基づく、高い機能・性能が特徴の製品群が既に開発されている。本研究成果は、実用化にも直接つながっていく可能性があり、従来均一系での問題点を克服することから、従来材料を凌駕する新しいポリマー材料を実用的に合成する方法の開発が期待される。</p>				

整理番号	R-6	研究開始年度	平成 26 年度	研究終了年度	平成 30 年度
共同研究課題名	(和文) 高選択的反応を用いた有機エレクトロニクス材料開発 (英文) Development of Organic Electronics Materials based on Highly Selective Reaction				
日本側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	(和文) 若宮淳志・京都大学・准教授・1-8 (英文) Atsushi WAKAMIYA・Kyoto University・Associate Professor・1-8				
相手国側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	(英文) Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor・3-1 Suning WANG・Queen's University・Professor・3-2				
30年度の 研究交流活動 計画	<p>有機薄膜太陽電池およびペロブスカイト太陽電池の高効率化には、優れた特性を示す有機半導体材料の開発が求められている。今年度は、ペロブスカイト太陽電池の光取り込み側に用いる p 型半導体材料の開発に焦点を当て、光透過性（透明性）と高い正孔輸送特性をもつ透明性 p 型半導体材料の設計と開発に取り組む。当グループでは、これまでに酸素架橋型トリフェニルアミン骨格など、HOMO 準位が高い独自の <math>\pi</math> 共役骨格の開発に成功している。可視光領域の光透過性を保持しながら高い正孔輸送特性と非晶質膜安定性をもつ材料を開発するためには、<math>\pi</math> 共役の拡張を抑制しながら非対称型に本骨格を連結する必要があることが明らかになってきた。最近、カナダの CRUDDEN グループは、Ni を触媒とする三級スルホンを用いた効率的な鈴木-宮浦クロスカップリング反応を開発している (<i>J. Am. Chem. Soc.</i> <b>2018</b>, <i>140</i>, 78.)。本反応を用いることで、一連の標的化合物の迅速合成が可能になるものと期待し、すでに CRUDDEN 教授に共同研究の提案を行っている。7 月には CRUDDEN 教授が京大を 10 日間訪問・滞在し、本反応を用いた合成条件の最適化を行う予定である。また、国内では、中村グループおよび山口グループとも連携を進め、有機系太陽電池のための半導体材料の開発とその評価を行う。</p>				
30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>当グループが開発した独自骨格を用いた材料開発に、CRUDDEN 教授の合成法を組み入れることで、これまで合成が困難であった <math>sp^3</math> 炭素骨格で連結した一連の有機半導体材料の迅速合成が可能になると期待できる。クロスカップリングによる非対称性骨格の組み合わせが簡便に行えれば、材料の非晶質膜安定性の向上も視野に入れた材料開発が展開できる。これにより有機系太陽電池材料としてだけでなく、有機発光素子の半導体材料および青色発光性材料の開発にもつながると期待できる。</p>				

整理番号	R-8	研究開始年度	平成 29 年度	研究終了年度	平成 30 年度
共同研究課題名	<p>(和文) 天然アミノ酸誘導体合成に基づく不斉分子ライブラリーの構築, およびその生理活性評価と CO<sub>2</sub> 資源化への応用</p> <p>(英文) Directed Construction of Molecular Library of Chiral Oligoamines and Non-standard Oligopeptides derived from Natural Amino Acids for Producing Bioactive Compounds and CO<sub>2</sub> Immobilization as Carbon Resource</p>				
日本側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	<p>(和文) 斎藤進・名古屋大学・教授・1-5</p> <p>(英文) Susumu SAITO・Nagoya University・Professor・1-5</p>				
相手国側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	<p>(英文)</p> <p>Bernhard WUENSCH・University of Muenster・Professor・2-3</p> <p>Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor・3-1</p> <p>Philip JESSOP・Queen's University・Professor・3-21</p>				
30年度の 研究交流活動 計画	<p>本共同研究チームでは、opioid 受容体 (<math>\mu, \delta, \kappa</math>) や、<math>\sigma_1</math> および <math>\sigma_2</math> 受容体のアゴニストもしくはアンタゴニストの候補となる不斉分子群ライブラリーの迅速合成と、各受容体群のバイオアッセイ系を利用した生理活性評価（競合阻害試験）（ドイツ側）、および CO<sub>2</sub> の資源化（カナダ側）への応用をさらに進める。30 年度も引き続き、斎藤グループが天然アミノ酸とその誘導体（光学活性<math>\beta</math>-アミノアルコール）を原料とし、光学活性ジ（エチレンイミン）およびオキサゾリン含有非天然オリゴペプチドを触媒的に構築する手法を発展させ、多彩な合成化合物群を WUENSCH グループに引き続き送付し生理活性評価を依頼する。また、斎藤-JESSOP・CRRUDEN らの共同研究チームでは、CO<sub>2</sub> 資源化の一環として、カルボン酸の水素化に基づく実用的な選択的アルコール合成を可能とする触媒反応の開発を引き続き行う。担当学生を WUENSCH グループもしくは JESSOP・CRRUDEN グループに派遣することも考えたい。Skype 会議を年に 3 回程度行い派遣の有無等を決定する。名古屋でのシンポジウムで打ち合わせと総括を行う。</p>				
30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>上記非天然オリゴペプチドの多様化をもたらす有用な触媒的手法を発展（斎藤グループ）させることで、合成した多彩なライブラリー分子の中から、各受容体に高選択的に結合する分子を発見できる（WUENSCH グループ）。30 年度中にこれら光学活性化化合物群を先方に送付し、その生理活性評価の結果をからより有効な化合物群の設計合成へとフィードバックできる（斎藤グループ）。また、クィーンズ大の大学院生 1 名が共同研究を推進することで、実用的なカルボン酸の水素化に有効な錯体固定化触媒（斎藤グループ）や卑金属系触媒（JESSOP・CRRUDEN グループ）を開発し、CO<sub>2</sub> の水素化に基づく資源化へと繋げる（斎藤グループ）。</p>				



整理番号	R-9	研究開始年度	平成 29 年度	研究終了年度	平成 30 年度
研究課題名	(和文) 負の溶媒効果を示す蛍光団をもちいた生体プローブの開発 (英文) Fluorescent probes with negative solvatochromic fluorophores				
日本側代表者 氏名・所属・ 職	(和文) 山口茂弘・名古屋大学・教授・1-1 (英文) Shigehiro YAMAGUCHI・Nagoya University・Professor・1-1				
相手国側代表 者 氏名・所属・ 職	(英文) Frank GLORIUS・University of Muenster・Professor・2-1				
30年度の 研究交流活動 計画	<p>これまでにミュンスター大 GLORIUS グループと山口グループとの間で「強発光エキシマーの開発と蛍光寿命エンジニアリング」と題した共同研究を実施してきた。博士学生を派遣し、共同研究を進めた。その過程で、GLORIUS グループによりフェニルピリジン類のC-H活性化反応により合成が達成された含窒素ピレン誘導体が負の溶媒効果を示し、かつ溶媒の極性に関係なく強い蛍光を示すことができる特異な蛍光団であることがわかった。そこで、この骨格に長鎖脂肪酸を導入することに着想し、脂質の生成過程を追跡する蛍光プローブの開発に成功した。この研究を開始した大崎が博士号を取得し卒業したため、梶原（修士学生、博士進学予定）が引き継ぎ、細部を詰める研究を昨年度展開した。本年度は、この共同研究成果を纏め上げるとともに、この骨格をさらに造り込み、より有用なプローブへと発展させる。テレビ会議や e-mail を基に議論を進める。</p>				
30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>本研究の脂質プローブは、拡散により油滴を染色する脂肪滴染色プローブとは異なり、それ自体の脂肪酸部位が変換を受け、その過程での媒体の極性の変化を敏感に励起波長の変化で識別できる画期的なプローブである。その有用性を、具体的実験例をもって示すことにより、ケミカルバイオロジー分野のみならず、生物学研究分野、創薬、医療分野において広く使われる可能性をもつ。世界中の研究者に供給できる体制を整えることにより、これらの当該分野の進歩に貢献できると期待できる。</p>				

整理番号	R-11	研究開始年度	平成28年度	研究終了年度	平成30年度
共同研究課題名	<p>(和文) N-ヘテロサイクリックカルベンを用いた固体触媒表面の反応性チューニング</p> <p>(英文) Tuning of Catalysis on Heterogeneous Catalyst Surface by N-Heterocyclic Carbenes</p>				
日本側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	<p>(和文) 唯美津木・名古屋大学・教授・1-3</p> <p>(英文) Mizuki TADA・Nagoya University・Professor・1-3</p>				
相手国側代表者 氏名・所属・職 名・研究者番号	<p>(英文) Frank GLORIUS・University of Münster・Professor・2-1</p> <p>Bart Jan RAVOO・University of Münster・Professor・2-2</p>				
30年度の 研究交流活動 計画	<p>これまでにミュンスター大 GLORIUS グループと名古屋大学唯グループとの間で、GLORIUS グループが開発した N-ヘテロサイクリックカルベンを利用した不均一系固体触媒の反応性制御の研究を行ってきた。N-ヘテロサイクリックカルベンの修飾によりアルミナ担持 Pd 触媒表面が電子供与を受け、プロモベンゼンの脱ハロゲン化が促進されることを実験的、理論的に見出すとともに、Buchwald-Hartwig アミノ化反応への応用が可能であることを見出した。現在、ミュンスター大の RAVOO グループも加わった共同研究を開始し、金属種をバイメタリック系へと拡張し、N-ヘテロサイクリックカルベン修飾バイメタリックナノ粒子触媒の構造解析を進め、バイメタリック系への N-ヘテロサイクリックカルベン配位効果による触媒活性制御、有用反応展開の研究を推進している。</p>				
30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>不活性な固体触媒表面の反応性を有機分子の配位によって自在に制御し、新たな活性を付与できる触媒表面を生み出す手法をバイメタリック系へと拡張することで、N-ヘテロサイクリックカルベンのバイメタリック触媒への配位により生み出される触媒特性制御、及びそれを支配する電子的、構造的な要因を解明し、バイメタリック系触媒の新たな活性制御法の提示につながるとともに、工業的にも重要な高難度触媒反応の実現が期待される。</p>				

整理番号	R-12	研究開始年度	平成 29 年度	研究終了年度	平成 30 年度
研究課題名	(和文) 木質分解分子触媒の開発 (英文) Development of Molecular Catalysts Resolving Xylem into Chemicals				
日本側代表者 氏名・所属・ 職	(和文) 中村正治・京都大学・教授・1-6 (英文) Masaharu NAKAMURA・Kyoto University・Professor・1-6				
相手国側代表者 氏名・所属・ 職	(英文) Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor・3-1 Philip JESSOP・Queen's University・Professor・3-21				
30年度の 研究交流活動 計画	<p>中村グループでは、木質の常温常圧中性条件下での選択的分解を可能とする分子触媒の開発を進めている。同触媒は遷移金属錯体部とペプチド部からなる分子量 3000 程度の人工酵素様分子である。これまでの検討から、過酸化水素を酸化剤とした単離リグニンおよび木粉の分解の可能であることが見出だされている。一方、上記反応においては、芳香族分子や糖類、その誘導体の混合物として得られてくるため、効率的な分析および生成手法の確立が必須である。そこで、中村グループが開発した木質分解反応と CRUDDEN・JESSOP グループが開発した分離精製技術を組み合わせることで、木質分解による有用有機化合物の生産に対する実証研究を進めたい。29年度に受講スケジュールから調整がつかなかった担当学生を H30 年度には CRUDDEN・JESSOP グループに2ヶ月間程度派遣し、研究を進めたい。触媒機能の向上については、名大斎藤グループによって開発された非天然オリゴペプチドの導入の検討を開始することを計画している。さらには固相担持遷移金属触媒と H<sub>2</sub>を用いる C-O σ結合の加水素分解反応の開発(斎藤グループ)とリグニン C-O 結合切断に基づくリグニンの小分子化(中村グループ)も視野にいれている。</p>				
30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	<p>29年度に予備的な検討を開始した木質分解分子触媒に、オキサゾリン含有非天然オリゴペプチド(斎藤グループ)を導入した触媒の合成と機能評価を30年度中に実施する。同触媒を用いた木質分解反応によって得られる生成物の分離、生成手法の確立を JESSOP グループの協力を得て確立したい。これらの新規触媒の開発と分離・精製手法を確立することによって、脱化石燃料・資源への第一歩となる、再生可能炭素資源である木質バイオマスの化学資源化の鍵技術フローを提示できると考えられる。</p>				

整理番号	R-13	研究開始年度	平成 30 年度	研究終了年度	平成 30 年度
研究課題名	(和文) 光反応性有機ホウ素 $\pi$ 電子系の開発 (英文) Development of Photo-reactive Organoboron $\pi$ -Electron Materials				
日本側代表者 氏名・所属・ 職	(和文) 山口茂弘・名古屋大学・教授・1-1 (英文) Shigehiro YAMAGUCHI・Nagoya University・Professor・1-1				
相手国側代表者 氏名・所属・ 職	(英文) Suning WANG・Queen's University・Professor・3-2				
30年度の 研究交流活動 計画	山口グループでは、これまで三配位ホウ素とカルボカチオンの相同性を巧く活用した反応性の探究を進め、アルケニルボラン類の bora-Nazarov 反応や、トリアリールボラン類の光 1,6-シグマトロピー転位反応の開発を達成して来た。一方で WANG グループは、B-N 分子内配位化合物の光反応を見だし、フォトクロミック機能分子系への展開や、新規多環式 $\pi$ 電子系の合成研究へと展開している。この 2 グループが共同して取り組むことにより、新たな光電子機能 $\pi$ 電子系の創出に取り組む。安藤 (博士学生) を 3 ヶ月 WANG グループへ派遣して共同研究を推進する。その成果について、テレビ会議や e-mail を通して議論する。また、山口と WANG 教授は、国際会議 (6 月 BORAM, 8 月 ACS meeting) で会う予定であり、この機会を利用して議論を進める。				
30年度の 研究交流活動 から得られる ことが期待さ れる成果	3 配位ホウ素化合物の光反応性の探究は、基礎的な観点のみならず、機能性材料としての応用の可能性をもつ。山口、WANG 両グループはこれまでこの可能性を追求し、世界を先導してきた。両者がこれまで蓄積してきた光反応の知見を巧く組み合わせることにより、新規な光機能性材料の開発が可能になると期待できる。また、WANG 教授は中国北京にも研究拠点を持ち、中国-ドイツ共同プログラムを推進している。そのドイツ側のメンバーと山口とも水溶性ホウ素材料の開発とバイオイメージングへの展開について共同研究を進めており (他研究費にて博士学生を受入予定)、これら 3 者間の共同研究へと発展させられれば、今後のホウ素材料開発の新たな国際共同基盤となるものと期待できる。				

8-2 セミナー

整理番号	S-1
セミナー名	(和文) 日本学術振興会研究拠点形成事業「革新的触媒・機能分子創製のための元素機能攻究」 (英文) JSPS Core-to-Core Program “Elements Functions for Transformative Catalysis and Materials”
開催期間	平成31年 2月 5日 ~ 平成31年 2月 6日 (2日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) 日本、名古屋、名古屋大学 (英文) Japan, Nagoya, Nagoya University
日本側開催責任者 氏名・所属・職名・研究者番号	(和文) 山口茂弘・名古屋大学・教授・1-1 (英文) Shigehiro Yamaguchi・Nagoya University・Professor・1-1
相手国側開催責任者 氏名・所属・職名・研究者番号 (※日本以外での開催の場合)	(英文) なし

参加者数

派遣先 派遣元		セミナー開催国 (日本)		備考
		A.	B.	
日本	A.	50	100	
	B.	50		
ドイツ	A.	10	50	
	B.	0		
カナダ	A.	5	25	
	B.	0		
合計 〈人／人日〉	A.	65	175	
	B.	50		

A. 本事業参加者 (参加研究者リストの研究者等)

B. 一般参加者 (参加研究者リスト以外の研究者等)

※人／人日は、2／14 (=2人を7日間ずつ計14日間派遣する) のように記載してください。

※日数は、出張期間 (渡航日、帰国日を含めた期間) としてください。これによりがたい場合は、備考欄にその内訳等を記入してください。

<p>セミナー開催の目的</p>	<p>本事業の最終年度にあたり、名古屋大学と京都大学、そしてドイツのミュンスター大学とベルリン工科大学、カナダのクィーンズ大学から参加研究者が拠点機関である名古屋大学に集まり、5年間のまとめの共同シンポジウムを行うことは、これまで進めてきた共同研究などのまとめの成果発信をする上で非常に重要であると考える。</p>	
<p>期待される成果</p>	<p>本事業では、早くから大学院生や若手研究者に海外での研鑽を積む機会を提供し、国際的に活躍する優秀な研究者の育成を目指してきた。本セミナーの発表もすべて英語で行われることから、参加者や発表者にとって国際的なシンポジウム参加と同じレベルの研究に関する情報収集やなどが可能であると期待される。</p>	
<p>セミナーの運営組織</p>	<p>山口茂弘コーディネーターを委員長とし、ドイツからの参加者とりまとめをミュンスター大学が担当、カナダからの参加者とりまとめをクィーンズ大学が担当して開催する。拠点機関である名古屋大学での最終開催ということからも、プログラムやシンポジウム全体の進行について名古屋大学側で調整を進めていく。</p>	
<p>開催経費 分担内容</p>	<p>日本側</p>	<p>内容 看板、及び告知ポスター作成費 国内旅費、会議費</p>
	<p>(ドイツ) 側</p>	<p>内容 外国旅費</p>
	<p>(カナダ) 側</p>	<p>内容 外国旅費</p>

### 8-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

共同研究、セミナー以外の交流（日本国内の交流を含む）計画を記入してください。

所属・職名 派遣者氏名・研究者番号	派遣時期 (●月・●日間)	訪問先・内容
名古屋大学トランスフ ォーマティブ生命分子 研究所・教授 山口茂弘・1-1	6月・6日間 7月・1日間	訪問先：ボストン（アメリカ） 内容：BORAM 2018に参加し研究に関する情 報収集をおこなう
名古屋大学トランスフ ォーマティブ生命分子 研究所・教授 山口茂弘・1-1	7月・7日間	訪問先：ブタペスト（ハンガリー） 内容：The 22 <sup>nd</sup> International Conference on Phosphorus Chemistryに参加し研究に関す る情報収集をおこなう
名古屋大学トランスフ ォーマティブ生命分子 研究所・教授 山口茂弘・1-1	8月・6日間	訪問先：ボストン（アメリカ） 内 容：The Fall ACS Meeting “Recent Advances in the Photochemistry and Photophysics of the P-Block Elements”に参 加し研究に関する情報収集をおこなう

※1名につき1行で記入してください。

### 8-4 中間評価の指摘事項等を踏まえた対応

①評価コメント（抜粋）：学術側面については、全体で8報の論文が本課題の成果として報告されている。これらの論文はいずれも国際共同研究の成果と認められ、本課題がなければ成し得ない成果であると考えられる。しかし、計画時点の各拠点の参加者の数を考慮すると、2年間の研究成果として論文数が少ないと言わざるを得ない。

対応：ジョイントシンポジウム等の機会を通して共同研究の可能性について議論し、新しい課題も含め、いくつかのプロジェクトを着実に進めており、高分子重合や固体触媒、蛍光プローブ開発など、多彩な分野で斬新かつ重要な結果がでつつある。これらの成果を着実に仕上げるとともに、最終年度も今後の共同研究の基盤となる可能性の探索に努める。

②評価コメント（抜粋）：現時点では一流誌への掲載はまだ限られているが、今後の論文数の増加とともに、対外的に成果を示すためにもトップジャーナルへの投稿が求められる。

対応：上述の通り、重要な結果を得つつあり、いくつかの成果については、トップジャーナルへの投稿を準備している。

③評価コメント（抜粋）：本課題での交流を介して異なる研究分野の日本側研究者が論文の

共著者になるなど、本課題を基軸とした波及効果が見られるが、現在のところは限定的である。

対応：上述の通り、重要な結果を得つつあり、各々において波及効果が期待できる。例えば、GLORIUS グループと山口グループとの共同研究で進めている脂質代謝蛍光プローブに関しては、試薬化の検討も始まっており、世界中の研究者への供給を実現することにより、生命科学分野への大きな波及効果が期待できる。

④評価コメント（抜粋）：これまで実施してきた様々なプログラムによって構築された支援組織を活用して、拠点形成を実現する適切な体制が整っている。今後は、国内セミナー等を通じて拠点としての研究目標と成果の共有が必要である。

対応：最終年度のジョイントシンポジウムは名古屋大学にて実施する予定でいる。また、名大、京大の参画メンバーは、大学連携事業である「統合物質創製化学研究推進機構」にも関わっており、重層的に議論を重ねる体制が整っている。これらの連携を基盤に、新学術領域研究などの新規研究課題の申請についても、中核メンバーとなり取り組む。

⑤評価コメント（抜粋）：一方、国際研究拠点として、対外的にはもちろんのこと、国内的にも認知され、波及効果をもたらさなければ、真の国際研究拠点とは言えないため、国内でのセミナー開催も期待される。

対応：上述の通り、最終年度のジョイントシンポジウムは名古屋大学にて実施する予定でいる。その際には、国内の当該分野の第一線の研究者も招待講演者として招聘する予定でいる。外部に開かれたジョイントシンポジウムの開催を通して、本活動の成果を共有することにより、我々の国際的活動の認知に努める。さらに、それらの機会を利用し今後どのように本研究基盤を維持していくかを明確に議論し、次の活動へと展開することにより、当該分野の我が国の研究活性化に貢献する。



## 9. 平成30年度研究交流計画総人数・人日数

### 9-1 相手国との交流計画

派遣先 派遣元	日本 〈人／人日〉	ドイツ 〈人／人日〉	カナダ 〈人／人日〉	アメリカ (第三国) 〈人／人日〉	ハンガリー (第三国) 〈人／人日〉	合計 〈人／人日〉
日本 〈人／人日〉		6/125 ( )	5/201 ( )	1/13 ( )	1/7 ( )	13/346 ( 0/0 )
ドイツ 〈人／人日〉	( 10/70 )		( )			0/0 ( 10/70 )
カナダ 〈人／人日〉	( 6/50 )	( )				0/0 ( 6/50 )
合計 〈人／人日〉	0/0 ( 16/120 )	6/125 ( 0/0 )	5/201 ( 0/0 )	1/13 ( 0/0 )	1/7 ( 0/0 )	13/346 ( 16/120 )

※各国別に、研究者交流・共同研究・セミナーにて交流する人数・人日数を記載してください。(なお、記入の仕方の詳細については「記入上の注意」を参考にしてください。)

※相手国側マッチングファンドなど、本事業経費によらない交流についても、カッコ書きで記入してください。

※相手国以外の国へ派遣する場合、国名に続けて(第三国)と記入してください。

### 9-2 国内での交流計画

	交流予定人数 〈人／人日〉
合計	0 / 0 ( 5 / 10 )

## 10. 平成30年度経費使用見込み額

(単位 円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	455,000	国内旅費、外国旅費の合計は、研究交流経費の50%以上であること。
	外国旅費	9,150,000	
	謝金	0	
	備品・消耗品 購入費	4,863,000	
	その他の経費	800,000	(会議費)
	不課税取引・ 非課税取引に 係る消費税	732,000	
	計	16,000,000	研究交流経費配分額以内であること。
業務委託手数料		1,600,000	研究交流経費の10%を上限とし、必要な額であること。また、消費税額は内額とする。
合 計		17,600,000	