

**平成28年度 研究拠点形成事業（A. 先端拠点形成型）
中間評価資料（進捗状況報告書）**

1. 概要

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		
日本側拠点機関名	名古屋大学		
コーディネーター 所属・職・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		
相手国側	国名	拠点機関名	コーディネーター所属・職・氏名
	ドイツ	ミュンスター大学	Organic Chemistry Institute・Professor・Frank GLORIUS
相手国側	国名	拠点機関名	コーディネーター所属・職・氏名
	カナダ	クィーンズ大学	Department of Chemistry・Professor・Cathleen CRUDDEN

2. 研究交流目標

申請時に計画した目標と現時点における達成度について記入してください。

○申請時の研究交流目標

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。

○目標に対する達成度とその理由

上記目標に対する2カ年分の計画について、

十分に達成された

概ね達成された

ある程度達成された

ほとんど達成されなかった

【理由】

名大とミュンスター大、ベルリン工科大とが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築き上げてきた強固な共同研究体制を、クィーンズ大、京大を加えた5拠点のネットワークへといかに拡張するかが課題であった。これに対し、計3回のジョイントシンポジウムの開催と、活発な研究者交流をもとに、新たなメンバーも加えて、選択的変換反応を可能にする触媒開発、有機機能性材料の開発、生理活性物質の合成などの共同研究を精力的に実施することにより、当該分野での拠点形成を着実に進めることができた。

3. これまでの研究交流活動の進捗状況

(1) これまで(平成28年3月末まで)の研究交流活動について、「共同研究」、「セミナー」及び「研究者交流」の交流の形態ごとに、派遣及び受入の概要を記入してください。※各年度における派遣及び受入実績については、「中間評価資料(経費関係調書)」に記入してください。

○共同研究

【概要】

本事業における研究活動は以下の3項目に分類される。

- (1) 元素の特性を活かした触媒機能の攻究：遷移金属錯体の配位環境や、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。
- (2) 元素の特性を活かした光・電子機能の攻究：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。
- (3) 材料科学・生命科学への応用展開：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、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。

本事業では、(1)、(2)の基礎研究と(3)の応用研究との双方向的共同研究を縦系とし、また、日本-ドイツ-カナダの三国間の強力な国際共同研究を横系に統括的に研究を推進し、革新的触媒および機能性分子の創製に挑んでいる。これまでの2年間の取り組みにより順調に共同研究を推進し、特に、(1)では、high-throughput screening法の開発を基にした触媒開発や、C-H活性化触媒の開発を基にした生理活性物質の開発において、また(2)では、ホウ素やリンを鍵元素とした機能性分子の開発、そして(3)では、光反応性ホウ素化合物を用いたデバイス応用や、リビングラジカル重合のエマルジョン重合への展開、液晶分子の会合構造制御を行うソフトマテリアルの開発などにおいて、共同研究ならではの成果を得つつある。

○セミナー

	平成26年度	平成27年度
国内開催	1回	0回
海外開催	1回	1回
合計	2回	1回

【概要】

名大、京大、ミュンスター大、ベルリン工科大、クィーンズ大よりメンバーが参加して、直接顔を合わせながら研究の進捗状況やディスカッションを行なうことができるジョイントシンポジウムの開催は本事業の鍵である。初年度(平成26年度)には、ミュンスター大と名大の双方で一回ずつジョイントシンポジウムを開催した。それぞれ参加者は80名および90名であった。京大、クィーンズ大学のメンバーを加え新たに共同研究体制を築くのに十分なディスカッションができた。また2年目(平成27年度)には、ミュンスター側がカナダ・トロント大と新たに開始したIRTGプログラムとの合同シンポジウムを行うために再度ミュンスターで開催した。80名が出席し、本事業で重要な分子触媒、有機合成、典型元素化学、材料化学の分野で主要な研究者が一同に会する機会となり、極めて有用な情報交換の場となるとともに、日本、ドイツ、カナダの3カ国間でのより強力な共同研究体制の構築に重要な機会となった。

○研究者交流

【概要】

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いる。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項目を通じ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ととした。例えば、 π 電子系分子のバイオイメージングへの展開を検討するグループから触媒的効率的な変換反応の開発に主眼をおく研究室への学生派遣や、有機デバイス評価を実施する研究室から、光反応性分子の開発研究を展開する研究室への派遣など、分野間での人材交流を意図的に行った。これらの派遣の際には、派遣研究者による自立的共同研究プロポーザルも実施した。これらの取り組みは、本事業で目指す元素機能の攻究を押し進める上で重要であるだけでなく、世界で活躍できるリーダー人材の養成という観点からも有用なはずである。これまでの2年間で、名大から4名の博士学生をミュンスター大学、クィーンズ大学へ、また京大からは2名の博士学生をクィーンズ大学へと中長期派遣し、共同研究を強力に推進した。

(2)(1)の研究交流活動を通じて、申請時の計画がどの程度進展したか、「学術的側面」、「若手研究者の育成」、及び「研究教育拠点の構築」の観点から記入してください。

○学術的側面

本事業のこれまでの2年間の具体的な成果・進展は次のようにまとめられる。(1)触媒機能の追究として、斎藤グループとクィーンズ大の Crudden・Jessop グループとの共同研究により、触媒性能を色で可視化する high-throughput screening 法の開発を行った。また、触媒ではないが、山口グループとクィーンズ大 Wang グループとの共同により、従来とは全く異なる立体選択性で反応が進行するヒドロホウ素化反応を見いだした。山子グループとクィーンズ大 Crudden・Cunningham グループとの共同研究では、山子がこれまで開発してきた水溶性の有機テルルリビングラジカル重合制御剤を用いてエマルジョン重合に応用することにも挑戦した。何れも元素の特長を生かした反応開発と位置づけられる。(2)元素の特性を活かした光・電子機能の攻究としては、山口グループとミュンスター大の Studer グループとの共同研究により push-pull 型リン架橋 π 電子材料の創出を達成した。この成果は国内外から高く評価され、*Synfacts* にもハイライトされた。そして、(3)材料科学・生命科学への応用展開を目指した研究としては、伊丹グループとミュンスター大 Wuensch グループとの共同研究による、アルツハイマー病などとの関連が深い $\sigma 1$ 受容体タンパク質に選択的に結合する分子の開発や、田中グループとミュンスター大 Ravoo グループとの共同研究による、ホスト-ゲスト相互作用を利用した液晶分子の会合構造制御を行う分子系の構築、そして、若宮グループとクィーンズ大 Wang グループとの共同研究によるホウ素を含む光反応性 π 共役系化合物の開発を行った。特に、後者の光反応では、有機エレクトロニクスデバイスの薄膜中においても進行することを見出し、塗布型の有機材料開発の新技术としての有用性を実証した。この他にも、Glorius 研での素反応開発により初めて合成が可能になった発光性 π 電子系を、山口グループでバイオイメージングへ応用する研究にも着手した。以上のように3つの視点から、精力的に共同研究を展開できているといえる。

○若手研究者の育成

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いる。これらの3項目を通して幅広い研究能力を養成するため、大学院生などの若手研究者を2,3ヶ月程度の相互派遣を項目間で行うことを進めている。例えば、初年度には、有機太陽電池研究に携わる若宮グループの下河(博士学生)がクィーンズ大の Wang グループに加わり、光反応性ホウ素化合物の基礎研究に加わり、成果を得るだけでなく、研究の新たな着眼点や手法を学んできた。また初年度に開催した2回のミーティングを有効に活用し、その中でのディスカッションにより、27年度には4名(名大3名、京大1名)の博士学生をミュンスター大やクィーンズ大に派遣した。また相手方からも、クィーンズ大の Wang グループやミュンスター大の Erker グループから山口グループへ若手研究者を受け入れた。活発な双方向的交流が進められており、この活動から作り出される国際的な環境は、まわりの若手研究者にとっても大きな刺激を与え、若手研究者育成を加速させている。引き続きこの関係をより5拠点の中で強固にし、広げていくことにより、世界に対して目が開かれた若手研究者を多く社会に送り出したい。

○研究教育拠点の構築

応用指向の研究に流れる近年の欧米、アジア諸国の動向の中で、我が国の強さの一つは、基礎研究に立脚した研究展開にある。特に、我が国の有機元素化学、有機金属化学は世界を先導してきた立場にある。その重要な役割を担ってきた名大、京大と、同じく当該分野で基礎的視点から強力に研究を展開しているドイツ、カナダの両国、その中でもアクティビティの高いミュンスター大、ベルリン工科大、ク

ィーンズ大とが強力にチームを組むことで、基礎科学に立脚した世界屈指の研究拠点の構築を目指すのが本事業である。これまで名大-ミュンスター大-ベルリン工科大で進めてきた共同研究活動はすでに世界的認知度も高い。この研究資源をもとに今回5拠点へ拡大したことで、ホウ素材料、金クラスター、クロスカップリング反応、高分子合成、有機エレクトロニクスなども研究対象となり、格段に研究の幅も広がった。より強力な研究教拠点の形成につながっていると考えている。

4. 事業の実施体制

本事業を実施する上での、「日本側拠点機関の実施体制」、「相手国拠点機関との協力体制」、及び「日本側拠点機関の事務支援体制」について記入してください。

○日本側拠点機関の実施体制（拠点機関としての役割・国内の協力機関との協力体制等）

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り、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円滑に拡張することができるかが課題であった。これまでの2年間の取り組みで、日本側の拠点機関間での協力体制もより強固なものへと発展させることができつつある。京大の山子グループ、若宮グループ、中村グループのいずれもジョイントシンポジウムに積極的に参加し、共同研究の機会を探っている。また、名大と京大が参画している文部科学省特別経費「統合物質創製化学推進事業」も発展させ、新たに「統合物質創製化学推進機構」が発足した。これにより、より密な共同研究基盤が構築できたといえる。実際、山口-若宮や伊丹-若宮などの間で共同研究が進んでいる。本プロジェクトと周辺に関連するプロジェクトが有機的に連携し、日本側拠点機関の実施体制の構築は、順調に進んでいるといえる。

○相手国拠点機関との協力体制（各国の役割分担・ネットワーク構築状況等）

名大とミュンスター大との共同研究体制の基盤となってきたドイツ側のこれまでの基幹プログラム「IRTGプログラム」が、26年度をもって終了したため、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、26年度、27年度とジョイントシンポジウムを2回続けてミュンスターで開催し、ドイツ側メンバーにも積極的に参加してもらい、有意義な議論を進めることができた。特に、27年度のシンポジウムではミュンスター側が新たにカナダ・トロント大と開始したIRTGプログラムのシンポジウムと合同で開催し、それにより日本-ドイツ-カナダの当該分野の主要な研究者が一同に会する機会となり、極めて有用な情報交換の場となった。また、これらの機会を利用した議論をもとに、順調に共同研究の開始、実施へとつなげることができた。一方、カナダ・クィーンズ大のメンバーの一人であるCrudden教授は本コーディネーターの山口が所属するトランスフォーマティブ生命分子研究所の海外PIでもあることから、頻度高く研究のディスカッションをできる環境にあり、また、もう一人に主要メンバーであるWang教授も、本プログラムの意義を十分に認識し積極的に参画してくれている。両教授の働きかけにより、クィーンズ大内でのネットワークも拡張できつつある。順調に三国間でのネットワーク構築ができつつあると考えている。

○日本側拠点機関の事務支援体制（拠点機関全体としての事務運営・支援体制等）

名大研究協力部研究支援課が拠点機関全体を見渡す中、名大理学部事務部と名大物質科学国際研究センター事務室が中心となり、派遣にかかる出張手続きやセミナー開催の準備、各方面への連絡調整、また本予算全体の執行の管理等を行なっている。

名大では、すでに先達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を通じて、プログラム全体をバックアップする事務支援体制ができている。相手国側においても、ドイツはミュンスター大、カナダはクィーンズ大学が中心となり、事業に関する事務支援のとりまとめを滞りなく行なえる状況がすでに確立されている。例えば、学生を当方から派遣した際にも、事前の宿舎の確保から到着時のセットアップのケアまで、実に丁寧に見てもらっており、到着後直ちに時間のロスなく研究を開始できる体制が整っている。これらの体制のもとで、本プログラムは順調に進められているといえる。