

**研究拠点形成事業
平成26年度 実施報告書
A. 先端拠点形成型**

1. 拠点機関

日本側拠点機関：	名古屋大学
(ドイツ)拠点機関：	ミュンスター大学
(カナダ)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
(交流分野： 有機化学)

(英文)： Elements Function for Transformative Catalysis and Materials
(交流分野： Organic Chemistry)

研究交流課題に係るホームページ：<http://core.rcms.nagoya-u.ac.jp>

3. 採用期間

平成26年 4月 1日～平成31年 3月31日
(1 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・氏名)：総長・濱口道成

コーディネーター(所属部局・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

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・氏名）：

（英文） Organic Chemistry Institute・Professor・Frank GLORIUS

協力機関：（英文） Technical University of Berlin

（和文） ベルリン工科大学

経費負担区分（A型）：パターン1

（2） 国名：カナダ

拠点機関：（英文） Queen's University

（和文） キーンズ大学

コーディネーター（所属部局・職・氏名）：

（英文） Department of Chemistry・Professor・Cathleen CRUDDEN

経費負担区分（A型）：パターン1

5. 研究交流目標

5-1. 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。それらの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求することにより、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。

5-2. 平成26年度研究交流目標

<研究協力体制の構築>

名古屋大学とミュンスター大学（ドイツ）とはこれまで「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」を共同で実施し、大きな成功を収めてきた。強固な共同研究体制がすでにできあがっており、この研究資源を最大限に活用して更なる発展を目指す。これまでの研究の単なる延長を図るのではなく、元素機能の攻究という新たな切り口を導入し、用いる元素の多様性の確保と応用展開研究の充実化を意図し、京都大学、クィーンズ大学（カナダ）の第一線の化学者も参画してより多角的な研究展開により触媒・機能分子創製の新たな地平の開拓に挑む。新たな体制でのスタート1年目であるので、より密な交流の基盤を築くために、6月の名古屋でのキックオフセミナーと、11月下旬のミュンスターでの第2回会議の年2回のミーティングを予定しており、参画研究者全員が顔を突き合わせてディスカッションすることにより強力に共同研究を推進する。

<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つを柱に取り組み。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。本年度は、これらの取り組みの中でも特に、今後5年間の研究活動の基盤となるシーズの探索に力を入れる。

<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。この研究者交流を通して、リーダー人材養成と共同研究の推進に努める。また、若手研究者間の自立的共同研究プロポーザル制度を確立し、その募集、推進を行い、将来のリーダー人材の育成に努める。

<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にまず力を入れたい。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全力を尽くす。

6. 平成26年度研究交流成果

(交流を通じての相手国からの貢献及び相手国への貢献を含めてください。)

6-1 研究協力体制の構築状況

名古屋大学-京都大学-ミュンスター大-ベルリン工科大-クイーンズ大の5拠点の連携を進めている本プロジェクトでは、初年度は、これまでのフレームワークに新たに京大-クイーンズ大の2拠点が加わったことから、その連携の強化・拡大を強力に推進することを目的に、2回の合同シンポジウムを名古屋、ドイツで開催し、円滑なスタートを切ることができた。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のシーズを議論することができた。

6-2 学術面の成果

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。これまで名古屋大学-ミュンスター大-ベルリン工科大の間で培ってきた共同研究基盤をもとにさらに発展させ、高機能性触媒の開発や、生理活性物質の探索、機能性ソフトマテリアルや機能性典型元素化合物の創製、ラジカル重合法の機構解明といったテーマに取り組んだ。これらの26年度の主な成果、実施状況は以下の通りである。

山口グループとミュンスター大 Erker グループ、さらにクイーンズ大 Wang グループでは、共通の関心であるフォトクロミック挙動を示すホウ素化合物の開発研究に取り組んだ。山口グループで発見したホウ素化合物の bora-Nazarov 環化反応の一般性の検証を Erker グループより大学院生 Raul Adler Yanez を6ヶ月受け入れて実施した。また、Wang 教授と密なディスカッションをおこない、27年度には相互に学生を交換し強力に共同研究を実施することとなった。

伊丹グループでは、ミュンスター大 Wünsch グループの大学院生 Artur Kokornaczyk を6ヶ月受け入れ、HIV-1 感染の主要な受容体である CCR5 を標的とした活性阻害分子を開発し、その一部の成果を論文発表した (*Org. Biomol. Chem.* **2015**, *13*, 2407-2422)。また、前年度に受け入れていたミュンスター大 Studer グループの大学院生 Eva Koch は、ニッケル触媒を用いたエステルやアミドのアリール化反応を開発し、その成果を論文発表した (*Chem. Commun.* **2015**, *51*, 855-857)。なお本論文は2014年下半期でもっとも多くダウンロードされた論文の一つとなった。

斎藤グループとミュンスター大 Wünsch グループとの共同研究では、光学活性ジエチレンイミン骨格合成に必要な基質候補のひとつである、オキサゾリンをアミノ酸由来の *N*-カルボキシルβ-アミノアルコールから脱水的に合成するリン系有機分子触媒（非金属系分子触媒）を発見した。また、光学活性ジエチレンイミン骨格合成に必要な基質候補のひとつである、アミドの窒素原子を、ベンジルアルコール誘導体の OH 基を脱離基とする脱水的 S_N 反応を通じて *N*-アルキル化する特異な分子触媒を見出しつつある。さらに、斎藤グループで合成した数種類の光学活性ジエチレンイミン誘導体について Wünsch グループで生理活

性評価を進めている。また 26 年度に Wunsch らとの共著論文 2 編を発表し (*Eur. J. Org. Chem.* と *Chirality*)、2 編投稿中である。

田中研究室とミュンスター大 Ravoo 研究室の共同研究では、ホスト-ゲスト相互作用を利用して液晶分子の会合構造制御を行う、新しいソフトマテリアルシステムを構築した。本研究成果は、Strasbourg で開催される The International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry 2015 (ISMSC2015)において、田中健太郎 (Invited lecture) と Ravoo 研究室の Till Boeckermann がそれぞれ発表する予定になっている。

山子グループは、リビングラジカル重合の開発で世界をリードしている。従来、ラジカル重合の停止機構のモデル反応としてアゾ化合物から生成するラジカルがよく利用されているが、その実験結果が他の方法を用いて得られる結果と大きく異なることが多く、大きな疑問点として残されていた。この解決についてドイツ側の研究者との議論に基づき、ラジカルの溶媒ケージの効果について定量的に検討を行い、ケージの内外でラジカルラジカル反応の選択性が大きく異なることを見出した。

若宮グループでは、クィーンズ大学のメンバーとのディスカッションにより、Wang 研究室に博士課程学生 (下河) を派遣し共同研究を新たに開始することとなった。Wang グループが独自に見出した光反応を基盤に、分子内に二つのホウ素-窒素配位結合をもつ化合物を合成することに成功した。さらに、帰国後は、本光反応と若宮グループがもつ真空脱気技術を組み合わせることで、本反応の収率を向上させることにも成功した。

6-3 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、今年度は、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) がクィーンズ大学の 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。また本年度開催した 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 3 名 (名大 2 名、京大 1 名) の博士学生をミュンスター大学やクィーンズ大学に派遣予定である。また相手方からも、ベルリン工科大学の Oesterich グループやクィーンズ大学の Wang グループから山口グループへ若手研究者を受け入れ予定である。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るはずである。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より多く社会に送り出した。

6-4 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どうかは課題である。まず国内での連携を深めるために、名古屋大学と京都大学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」と連動させ、より密な研究基盤の構築に取り組んだ。山口-若宮や伊丹-若宮などの間で共同研究が進みはじめている。また、クィーンズ大学からのメンバーの Wang や Crudden も本年度、名古屋、ドイツで開催した2回のジョイントシンポジウムに参加し、交流を深めるとともに日本のグループと共同研究を開始している。順調な滑り出しができたものと考えている。

6-5 今後の課題・問題点

これまで名古屋大学とミュンスター大学、ベルリン工科大学（ドイツ）との間で進めてきた「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」での実績により、我々の研究基盤は当該分野の中では広く知られ、高い評価を国際的にも受けていると自負している。本事業の課題は、これまでの活動を、クィーンズ大、京大を加えさらに発展させた形で国際的にビジブルなものにできるかどうかである。そのためには、新たに加わったメンバーとの共同研究のより多くの優れた成果を世界に発信していくのはもちろんのこと、研究ネットワークとしてのビジビリティを挙げるために、名古屋大学で推進している WPI 事業との連携などにより工夫していきたい。

6-6 本研究交流事業により発表された論文

平成26年度論文総数 0 本

相手国参加研究者との共著 0 本

(※ 「本事業名が明記されているもの」を計上・記入してください。)

(※ 詳細は別紙「論文リスト」に記入してください。)

7. 平成26年度研究交流実績状況

7-1 共同研究

整理番号	R-1	研究開始年度	平成26年度	研究終了年度	平成28年度
研究課題名	(和文) 有機ホウ素 π 電子系の光電子機能				
	(英文) Optoelectronic Functions of Organoboron π -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				
	(英文) Shigehiro YAMAGUCHI・Nagoya University・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Suning WANG・Queen's University・Professor Gerhard ERKER・University of Muenster・Professor				
参加者数	日本側参加者数	3名			
	カナダ側参加者数	2名			
	ドイツ側参加者数	3名			
26年度の研究 交流活動	<p>これまで山口グループと Erker グループでは、1) 高いルイス酸性をもつ $B(C_6F_5)_3$ の反応性を利用した新規 π 電子系骨格の創製反応の開発と、2) 新規なホウ素およびリン π 電子系の機能開拓の2つについて継続的に共同して進めてきた。本年度はこの化学をさらに発展させ、山口グループで見つかった bora-Nazarov 反応の詳細について検討した。これは古くから予測されていたものの、生成物の不安定性から実際に進行する例は知られていなかった反応である。その反応を光照射条件下で進行することを見出した。最近、Erker グループでも独自に類似の反応が進行することが発見されており、両グループの共通の関心といえる。この反応の本質の理解、一般性の検証を目的に、Erker グループより Raúl Adler Yañez を受け入れ検討を進めた。</p>				
26年度の研究 交流活動から得 られた成果	<p>まず、山口グループで見つかった bora-Nazarov 反応の基質一般性の検証について取り組んだ。これまでに本反応の進行には7員環骨格をもつジメシチルボリル体が重要であることがわかっている。5員環やベンゼンなどの6員環骨格を母体とする誘導体では、この反応様式とは別の新たな反応が進行することがわかっている。そこで、種々の7員環骨格をもつ基質について検討した。窒素を含む azepin 骨格では目的の反応は進行しないのに対し、硫黄を含む thiepine 骨格では反応が円滑に進行することがわかった。生成物のボラタアリアル骨格の不安定性から単離には至っておらず、引き続き検討を進める予定である。</p>				

整理番号	R-2	研究開始年度	平成 26 年度	研究終了年度	平成 27 年度
研究課題名	(和文) CCR5 阻害活性を有する新分子の探索				
	(英文) Development of Molecules with CCR5 Inhibiting Activity				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 伊丹 健一郎・名古屋大学・教授				
	(英文) Kenichiro ITAMI・Nagoya University・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Bernhard WUENSCH・University of Muenster・Professor				
参加者数	日本側参加者数	3 名			
	ドイツ側参加者数	2 名			
	() 側参加者数	名			
26 年度の研 究 交 流 活 動	<p>これまでミュンスター大学の Wunsch 研究室と名古屋大学伊丹研究室では「合成化学」、「触媒科学」、「創薬化学」のシナジーに基づく共同研究を多数行ってきており、またその全てを権威ある国際誌に発表してきた。今回、HIV-1 感染の主要なコレセプターのひとつである CCR5 を標的とした CCR5 阻害活性を有する新分子を探索することを目的とし、共同研究を行った。平成 26 年 4 月よりミュンスター大学 Wunsch 研究室の大学院生 Artur Kokornaczyk を 6 ヶ月、名古屋大学伊丹研究室に受け入れ、研究を行った。</p>				
26 年度の研 究 交 流 活 動 から 得 ら れ た 成 果	<p>これまで行ってきた共同研究によって浮かび上がってきた活性構造の修飾を伊丹研で開発したパラジウム触媒によるヘテロ環 C-H カップリング反応によって行った。得られた数十の新規化合物の生物活性評価を Wunsch 研究室で行ったところ、高い CCR5 阻害活性と選択性をもつ新しい分子を見出すことに成功した。</p>				

整理番号	R-3	研究開始年度	平成 26 年度	研究終了年度	平成 28 年度
研究課題名	(和文) エチレンイミンを基本骨格とする不斉分子ライブラリーの構築と生理活性評価				
	(英文) Directed Construction of Molecular Library of Chiral oligoamines (oligo(ethyleneimine)s) for Producing Bioactive Compounds				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 斎藤進・名古屋大学・准教授				
	(英文) Susumu SAITO・Nagoya University・Associate Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Bernhard WUENSCH・University of Muenster・Professor				
参加者数	日本側参加者数	3 名			
	ドイツ側参加者数	3 名			
	() 側参加者数	名			
26 年度の研 究交流活動	<p>斎藤-Wünsch らの共同研究チームでは、opioid 受容体 (m, d, k) や σ_1 および σ_2 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それら不斉分子群の生理活性評価 (競合阻害試験) を開始した。H25-26 度に明らかとなった、配位子の受容体へのフィッティング in silico 計算結果をもとに 3 種類の光学活性ジ (エチレンイミン) を合成し (名古屋グループ)、Wünsch グループに H26 年度中には送付を済ませており、各種受容体に対する生理活性試験が順番待ちの段階にある。ジ (エチレンイミン) 骨格合成と初期的生理活性試験に関わる共著論文 2 編の出版 (<i>Eur. J. Org. Chem.</i> と <i>Chirality</i>) を H26 年度中にすませており、その他 2 編を現在投稿中である。</p>				
26 年度の研 究交流活動から得 られた成果	<p>Wünsch グループによる in silico 計算の結果、受容体に阻害活性を示す光学活性ジ (エチレンイミン) 構造の候補が明らかとなり、それをもとに H26 年度中に光学活性ジ (エチレンイミン) の多様性をもたしうる触媒的手法の一部 (2 種類の手法) を開発 (斎藤グループ) できた。現在その手法の様々な基質への適用範囲を検討中である。ジ (エチレンイミン) 骨格をもたらず合成した多彩な分子ライブラリーの中から、各受容体に選択的に結合する分子を初期的に発見することが H26 年度中に期待された (Wünsch グループ) が、現在、ドイツ側における生理活性試験の結果待ちであり、H27 年度に本試験をまずは達成し、それに基づく生理活性候補化合物の改変と合成 (名古屋グループ) へとつなげたい。</p>				

整理番号	R-4	研究開始年度	平成 26 年度	研究終了年度	平成 28 年度
研究課題名	(和文) ホスト-ゲスト相互作用を利用した超分子液晶の創製				
	(英文) Supramolecular Liquid Crystal Formation Induced by Host-Guest Chemistry				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 田中健太郎・名古屋大学・教授				
	(英文) Kentaro TANAKA・Nagoya University・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Bart Jan RAVOO・University of Muenster・Professor				
参加者数	日本側参加者数	3 名			
	ドイツ側参加者数	3 名			
	() 側参加者数	名			
26 年度の研 究交流活動	Ravoo 研究室の Till Beckermann (博士課程学生) が、田中研究室に 6 ヶ月間滞在し、共同研究を行った。25 年度、Ravoo 研究室から田中研究室に短期留学した Michael Kurlemann (博士課程学生) が行った研究結果を進展させ、Ravoo 研究室で開発した糖修飾反応により、長鎖を導入したシクロデキストリン分子を合成した。これらを用い、ホスト-ゲスト相互作用により超分子的な分子組織を構築し、ゲスト分子により誘起される新しい液晶系を構築した。				
26 年度の研 究交流活動から得 られた成果	ホスト-ゲスト相互作用を利用して液晶分子の会合構造制御を行う、新しいソフトマテリアルシステムを構築した。本研究成果は、Strasbourg で開催される The International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry 2015 (ISMSC2015)において、田中健太郎 (Invited lecture) と Ravoo 研究室の Till Boeckermann (Poster)がそれぞれ発表する。				

整理番号	R-5	研究開始年度	平成 26 年度	研究終了年度	平成 28 年度
研究課題名	(和文) ラジカル重合の停止反応機構の解明				
	(英文) Elucidation of Termination Mechanism of Radical Polymerization				
日本側代表者 氏名・所属・職	(和文) 山子 茂・京都大学・教授				
	(英文) Shigeru YAMAGO・Kyoto University・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Armido STUDER・University of Muenster・Professor				
参加者数	日本側参加者数	3 名			
	ドイツ側参加者数	3 名			
	() 側参加者数	名			
26 年度の研 究 交流活動	山子研究室が行っている、有機テルル置換ポリマーの末端変換反応につ いて、ミュンスター大学 Studer グループがすでに開発していた試薬（以 下、ミュンスター試薬）を利用する方法を含め、詳細な討論を行った。 さらに、その議論に基づき、山子研究室で実験を行った。				
26 年度の研 究 交流活動から得 られた成果	ミュンスター試薬は複数ステップをかけて合成する必要があったため実 験を行うことができなかったが、興味深い反応性を示す可能性をもつ化 合物についてその利用について検討を行った。最初のスクリーニングで は反応性が乏しく、期待していた通りの結果は得られなかった。しかし、 その結果を基礎として討論を行い、反応に用いる候補の明確化を行った。 また、ラジカル重合の停止機構についても検討した。モデル反応として アゾ化合物から生成するラジカルがよく利用されているが、その実験結 果が他の方法を用いて得られる結果と大きく異なることが多く、大きな 疑問点として残されていた。この解決についてドイツ側の研究者との議 論に基づき、ラジカルの溶媒ケージの効果について定量的に検討を行い、 ケージの内外でラジカルーラジカル反応の選択性が大きく異なることを 見出した。				

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 28 年度
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	(和文) 若宮淳志・京都大学・准教授				
	(英文) Atsushi WAKAMIYA・Kyoto University・Associate Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor				
	Suning WANG・Queen's University・Professor				
参加者数	日本側参加者数	2 名			
	カナダ側参加者数	2 名			
	() 側参加者数	名			
26年度の研 究交流活動	クイーンズ大メンバーとのディスカッションの中で、Wang グループとの共同研究を開始することとなった。平成 26 年 8 月から 3 ヶ月間、博士学生の下河を Wang グループに派遣し、分子内に B-N 配位結合を二つもつホウ素修飾ピペリジン誘導体の合成に取り組んだ。クイーンズ大では、Wang グループが独自に見出している光反応によるホウ素上の脱アリアル化を伴った $N \rightarrow B=C$ 結合形成反応を習得した。実際に合成を行ったところ、生成する化合物はいずれも酸素に対して高い反応性を示すことが明らかとなった。そこで、帰国後、京大において、より厳密に脱気した条件を用いて本反応の再検討を行った。その結果、溶封した石英ガラス管で真空脱気した条件下で反応を行うことで、速やかに目的の反応が進行することを見出した。また、得られた目的化合物は鮮やかな赤色を呈することが確認された。				
26年度の研 究交流活動から得 られた成果	Wang グループが開発している光反応を用いたホウ素上の脱アリアル化による $N \rightarrow B=C$ 結合形成反応に、我々の開発した可溶性のホウ素置換基を組み合わせるにより、標的化合物の溶解性を向上させることができることが分かった。さらに、より厳密な脱気条件下で反応を行うことで、目的の B-N 置換型ピレン体を収率よく合成出来ることが明らかとなった。本成果は、Wang 教授らの光反応技術と我々の技術を組み合わせることで得られた成果であるといえる。理論計算の結果、得られた化合物は、ピレン体に比べて LUMO 準位の低下 (-0.63 V) に加えて HOMO 準位が上昇 (+0.73 V) することがわかった。今後は、本合成法により得られた化合物を用いて、ビニルカチオンの等電子構造であるメチレンボランの単離にも取り組んで行く予定である。				

7-2 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26年6月12日～平成26年6月13日(2日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) 日本、名古屋市、名古屋大学野依記念物質科学研究館 (英文) Japan, Nagoya, Noyori Materials Science Laboratory
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 山口茂弘・名古屋大学・教授 (英文) Shigehiro YAMAGUCHI・Nagoya University・Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文)

参加者数

派遣先 派遣	セミナー開催国 日本	
	A.	B.
日本 〈人/人日〉	90/ 180	5
ドイツ 〈人/人日〉	13/ 78	1
カナダ 〈人/人日〉	1/ 3	
合計 〈人/人日〉	104/ 261	6

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)

※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、備考欄を設け、注意書きを付してください。

セミナー開催の目的	名古屋大学と京都大学、そしてドイツ側のミュンスター大学、ベルリン工科大学、カナダのクィーンズ大学からの参画者が一同に会し、各々の分野での最先端研究を紹介し、シーズと課題を共有し、新たな研究展開を練り上げる場を持つことにより、本事業を強力に推進する基盤を築く。特に、若手自立的研究の趣旨と募集を募り、そのための準備のための格好の機会とする。		
セミナーの成果	本プログラムのキックオフミーティングとなった今回のセミナーでは、研究を実際に推進する若手研究者や大学院生を始め共同研究に携わるドイツ・カナダ・京都大学からのメンバーらが直接顔を合わせ、積極的な議論が行なわれて大変充実したものとなった。これらの議論は、進行中の共同研究の進捗を促進させ、さらに新たな研究の方向性も見出していくものとなった。		
セミナーの運営組織	山口茂弘コーディネーターを運営委員長とし、ドイツからの参加者とりまとめをミュンスター大学担当、カナダからの参加者とりまとめをクィーンズ大学担当として開催する。名古屋大学が中心となり、プログラム調整や座長などの進行を担当していく。		
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容	国内旅費 138,300 円 会場設営費 57,800 円 会議費 666,140 円
	ドイツ側	内容	外国旅費
	カナダ側	内容	外国旅費

整理番号	S-2
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 26 年 11 月 27 日 ～ 平成 26 年 11 月 28 日 (2 日間)
開催地(国名、都市名、会場名)	(和文) ドイツ、ミュンスター、ミュンスター大学 (英文) Germany, Muenster, University of Muenster
日本側開催責任者 氏名・所属・職	(和文) 山口茂弘・名古屋大学・教授 (英文) Shigehiro YAMAGUCHI・Nagoya University・Professor
相手国側開催責任者 氏名・所属・職 (※日本以外で開催の場合)	(英文) Frank GLORIUS・University of Muenster・Professor

参加者数

派遣先 派遣	セミナー開催国 ドイツ	
	A.	B.
日本 〈人／人日〉	16/ 119	
ドイツ 〈人／人日〉	30/ 90	60
カナダ 〈人／人日〉	4/ 16	
合計 〈人／人日〉	50/ 225	60

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）

※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、備考欄を設け、注意書きを付してください。

セミナー開催の目的	<p>本年度2回目の会合を若手研究者が主体となって実施することにより、さらに強固な共同研究実施体制の確立を狙う。また、これまで名古屋大学とミュンスター大学で実施してきたドイツ側のIRTG (International Research Training Group; DFG)プログラムの最終報告国際会議と併せて実施することで、我々の新たな取り組み、アクティビティを本事業参加大学以外の多くの聴衆の前で披露することにより、国際的認知度を上げ、世界的な研究ハブ拠点としてのプレゼンスを上げる。</p>		
セミナーの成果	<p>ミュンスター大学を初めて訪れるメンバーらが、共同研究相手の研究室や実験施設・大型機器などを実際に確認できたことは、その後の研究方針の再構成や方向修正、また研究方法の展開に大いに役にたったようである。特に、参加者のうち大学院生にとっては、海外の研究機関で現地の研究者や学生と多くの議論をおこなったことにより大変刺激を受けたようであり、帰国後の研究に対するモチベーションアップにつながった。現地でのすべて英語でのサイエンティフィックなやりとりは、若手研究者の国際的な化学者としての成長に大変重要なことと考えるが、これは日本では十分に経験できないことであるため、その点からも海外で開催するセミナーの目的の1つを達成したといえる。</p>		
セミナーの運営組織	<p>ドイツ・ミュンスター大学コーディネーターを委員長とし、日本からの参加者とりまとめを名古屋大学担当、カナダからの参加者とりまとめをクィーンズ大学担当として開催する。ミュンスター大学が中心となり、プログラムの決定や座長・進行全般を担当していく。</p>		
開催経費 分担内容 と金額	日本側	内容 外国旅費	5,094,412 円
		内容 外国旅費に係る消費税	405,757 円
	ドイツ側	内容 会議費	
	カナダ側	内容 外国旅費	

7-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

所属・職名 派遣者名	派遣・受入先 (国・都市・機関)	派遣期間	用務・目的等
名古屋大学理学 研究科物質理学 専攻・博士課程 後期2年・松井 克麿	ドイツ・ミュ ンスター・ミ ュンスター 大学	平成26年 5月1日～ 平成26年 8月1日	研究打合せ
京都大学大学院 工学研究科・博 士後期課程1回 生・下河広幸	カナダ・キン グストン・ク ィーンズ大 学	平成26年 8月11日 ～平成26 年11月7 日	研究打合せ
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	ドイツ・ビュ ルツブル グ・ビュルツ ブルグ大学	平成27年 3月10日 ～平成27 年3月15 日	研究打合せ

8. 平成26年度研究交流実績総人数・人日数

8-1 相手国との交流実績

派遣先 派遣元	四半期	日本	ドイツ	カナダ		合計
日本	1		1/ 93 ()	()	()	1/ 93 (0/ 0)
	2		()	1/ 89 ()	()	1/ 89 (0/ 0)
	3		16/ 119 ()	()	()	16/ 119 (0/ 0)
	4		1/ 6 ()	()	()	1/ 6 (0/ 0)
	計		18/ 218 (0/ 0)	1/ 89 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)
ドイツ	1	(19/ 1069)		()	()	0/ 0 (19/ 1069)
	2	()		()	()	0/ 0 (0/ 0)
	3	(2/ 16)		()	()	0/ 0 (2/ 16)
	4	(1/ 15)		()	()	0/ 0 (1/ 15)
	計	0/ 0 (22/ 1100)		0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)
カナダ	1	()	()		()	0/ 0 (0/ 0)
	2	()	()		()	0/ 0 (0/ 0)
	3	(1/ 14)	(1/ 6)		()	0/ 0 (2/ 20)
	4	(1/ 4)	()		()	0/ 0 (1/ 4)
	計	0/ 0 (2/ 18)	0/ 0 (1/ 6)		0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)
	1	()	()	()		0/ 0 (0/ 0)
	2	()	()	()		0/ 0 (0/ 0)
	3	()	()	()		0/ 0 (0/ 0)
	4	()	()	()		0/ 0 (0/ 0)
	計	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)		0/ 0 (0/ 0)
合計	1	0/ 0 (19/ 1069)	1/ 93 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	1/ 93 (19/ 1069)
	2	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	1/ 89 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	1/ 89 (0/ 0)
	3	0/ 0 (3/ 30)	16/ 119 (1/ 6)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	16/ 119 (4/ 36)
	4	0/ 0 (2/ 19)	1/ 6 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	1/ 6 (2/ 19)
	計	0/ 0 (24/ 1118)	18/ 218 (1/ 6)	1/ 89 (0/ 0)	0/ 0 (0/ 0)	19/ 307 (25/ 1124)

※各国別に、研究者交流・共同研究・セミナーにて交流した人数・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。

8-2 国内での交流実績

1	2	3	4	合計
6/ 11 ()	()	()	()	6/ 11 (0/ 0)

9. 平成26年度経費使用総額

(単位 円)

	経費内訳	金額	備考
研究交流経費	国内旅費	367,780	
	外国旅費	7,764,582	
	謝金	0	
	備品・消耗品 購入費	6,524,327	
	その他の経費	723,940	
	外国旅費・謝 金等に係る消 費税	619,371	
	計	16,000,000	
業務委託手数料		1,600,000	
合 計		17,600,000	

10. 平成26年度相手国マッチングファンド使用額

相手国名	平成26年度使用額	
	現地通貨額[現地通貨単位]	日本円換算額
ドイツ	35,000 [ユーロ]	4,550,000 円相当
カナダ	9,000 [カナダドル]	900,000 円相当

※交流実施期間中に、相手国が本事業のために使用したマッチングファンドの金額について、現地通貨での金額、及び日本円換算額を記入してください。