

**研究拠点形成事業**  
**平成 29 年度 実施報告書**

A. (平成 26～29 年度採択課題用) 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

( 4 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・松尾清一

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) Berlin University of Technology

(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。

### 5-2. 平成29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、ベルリン工科大学にて実施することを計画している。この機会の議論を起爆剤として、元素機能の攻究という切り口の下、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。また、この際には、これまで築き上げてきた強固な国際共同研究基盤の継続の形を集中的に議論し、今後の展開を模索する予定でいる。

#### <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、前年度に開始した研究を継続的に拡大・発展させるとともに、バイオマスの活用などのキーワードをもとに研究活動の新たな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。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行っているが、この制度を確立し、若手研究者により有効活用してもらうように努める。

#### <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。

## 6. 平成29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 昨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何名かの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て開催した。当初、ベルリン工科大学にて10月に実施することを計画していたが、諸般の状況を鑑み、より多くの参加者が無理なく参加できる2月にミュンスター大にて開催した。この機会に、元素機能の攻究という切り口の下、多角的な研究展開による触媒・機能分子の創製研究の進展について議論した。また、この際には、これまで築き上げてきた強固な国際共同研究基盤の継続の形を集中的に議論し、今後の新たなプログラムへの発展の可能性について議論した。

### 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。本年度も引き続き、高機能性触媒の開発や、生理活性物質の探索、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28年度の主な成果、実施状況は以下の通りである。

山口グループは、GLORIUS グループに大崎（博士学生）を派遣して開始した研究を、同君の帰国後も密に連絡を取り合いながら進め、蛍光性脂肪酸プローブの開発へと展開し、有用な蛍光プローブの開発に成功した。この研究を梶原（修士学生）が引き続き、必要なすべての生物学実験を終え、論文作成段階にある。また、小笠原（博士学生）を派遣し着

手した OESTREICH グループとの共同研究では、超耐光性蛍光プローブとして潜在性のあるラダー $\pi$ 電子系の合成法を新たに開発し、その光物性を評価し、国際誌にその成果を報告した。

また、斉藤グループでは、CRUDDEN・JESSOP グループから直鎖型および分岐型のポリ(エチレンイミン)を受け取り、これらポリアミン類の多 N-メチル化を、金属担持半導体光触媒と MeOH を用いて行った。また、WUENSCH らとの共同研究では、H28 年度にジエチレンイミン骨格の立体選択的合成に関わる三編の共著論文を国際学術雑誌で発表した。これらの結果をもとに、オキサゾリン骨格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構築を推進した。

田中グループは引き続きミュンスター大 RAVOO グループと 1) ホスト-ゲスト化学をもとにした液晶性分子組織構築と、2) 金属錯体超分子構造の構築の 2 つについて継続的に共同して進めている。ジョイントシンポジウムの機会に、田中がミュンスター大学を訪問し、RAVOO 研究室メンバーとの議論を行い、論文発表に向けて議論を進めた。

山子グループは、クィーンズ大 CRUDDEN・CUNNINGHAM グループと引き続き有機テラルル化合物を用いたリビングラジカル重合の水溶液重合系への適応の拡大について検討した。本年度は、重要モノマーであるメタクリル酸メチルの重合に焦点を絞り、その最適化を行い、単純なエマルジョン重合がリビング的に進行する可能性を明らかにした。

若宮グループでは、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を目的に、優れた特性を示す有機半導体材料の開発を進めている。本年度は、従来のフラーレン誘導体に代わる優れた n 型半導体材料の開発に取り組み、中村(博士学生)をクィーンズ大学の WANG 研に 2 ヶ月間派遣し、拡張 $\pi$ 共役系分子の合成実験を行った。また、ホウ素を含む電子受容性の高い $\pi$ 共役系化合物の設計と合成に関して、7月に香港で開催された国際学会(IMEBORON)で若宮と WANG 教授はその後の進捗と今後の展開方針について打ち合わせを行った。さらに、1月にミュンスターで開催された Core-to-Core のシンポジウムでの発表と意見交換会にて CRUDDEN 教授と次年度の研究打ち合わせを行った。

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、N-ヘテロサイクリックカルベンを担持固体触媒表面に配位させ、触媒的に不活性な固体表面を電子的に活性化させ、有用触媒反応に展開する研究を行った。また、同じくミュンスター大の 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。

### 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、若宮グループからクィーンズ大の WANG グループに派遣し、機能性ホウ素材料の開発に取り組んだ。また、一昨年度より継続している、山口グループとミュンスター大 GLORIUS グル

ープとの蛍光性脂肪酸プローブの開発研究では、漸く成果をまとめる段階にまでこぎつけることができた。元々、当時博士学生であった大崎を派遣し始まった共同研究であったが、帰国後持ち帰り、分子構造の最適化と細胞実験を行い、大崎が学位取得後には、新たに梶原（修士学生）が本研究を引き継ぎ、詳細を詰めてきた。今年度はこの研究を仕上げる目的で、指導教員の多喜とともに梶原を派遣し、さらに研究を進展させた。まさに、学生が中心となった国際共同研究であり、この経験をもとに梶原も博士進学を決意した。引き続き若手研究者の派遣を、5拠点の中でより強固にしていくことにより、世界で活躍する力をもった若手研究者の育成に努めたい。

#### 6-4 その他（社会貢献や独自の目的等）

本事業で力を入れて推進してきたのは、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基盤をうまく京大、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である。これまでに、京大の山子グループや若宮グループとクィーンズ大との交流も順調にスタートし、本年度のジョイントシンポジウムの際でもそれらの成果が報告され、さらに京大、クィーンズ大との連携も進みつつある。また、名古屋大学と京都大学が参画して発足した「統合物質創製化学研究推進機構」も順調にスタートした。この機構のシンポジウム等の機会も、本事業のメンバーが介して共同研究の議論を進めるよい機会となっている。実際、山口-若宮や伊丹-若宮などの間で共同研究が進み、反応性ホウ素 $\pi$ 電子系の開発など、いくつか論文発表にも至っている。本プロジェクトと周辺の関連するプロジェクトが有機的に連携し、順調に進んでいるものと考えている。

#### 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」の活動はすでに国際的にも高い認知度を得ていると考えている。本事業の課題は、この基盤をクィーンズ大、京大を加えさらに発展させた形でいかにビジブルなものにできるかであると考えている。昨年度には、クィーンズ大で開催したジョイントシンポジウムを北アメリカホウ素化学国際会議と同時開催するなどの工夫をして、成果の発信に努めた。今後も多方向的な共同研究を推進し、より多くの優れた成果を世界に発信することにより、研究ネットワークのビジビリティの向上に努めたい。例えば、来年度開催する本プログラムのジョイントシンポジウムを、「統合物質創製化学研究推進機構」の活動とリンクさせることにより、名大が中心となり構築してきた研究ネットワークを、本プログラムに参画する京大のメンバーだけでなく、他大学に拡大し、我が国の研究推進に寄与することも考えたい。このような取り組みを通して、本プログラム終了後の発展の形について具現化していきたい。

#### 6-6 本研究交流事業により発表された論文等

- (1) 平成29年度に学術雑誌等に発表した論文・著書 8本  
うち、相手国参加研究者との共著 4本
- (2) 平成29年度の国際会議における発表 5件  
うち、相手国参加研究者との共同発表 1件
- (3) 平成29年度の国内学会・シンポジウム等における発表 12件  
うち、相手国参加研究者との共同発表 1件
- (※ 「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29年度研究交流実績状況

### 7-1 共同研究

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29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				
29年度の 研究交流活動	田中グループはこれまでに RAVOO グループとともに、1)ホスト-ゲスト化学をもとにした液晶性分子組織構築と、2)金属錯体超分子構造の構築の2つについて継続的に研究を行ってきた。本プログラムのジョイントシンポジウムのために、田中がミュンスター大学を訪問し、RAVOO 研究室メンバーとの議論を行った。またインターネットを介した定常的な情報共有の場を用いて研究推進の協議を行った上で、新規ホスト型液晶分子を構築した。				

29年度の研究交流活動から得られた成果	28年度までに行ってきた共同研究による、シクロデキストリン型分子による液晶構築についての論文執筆を進めており、次年度には論文の投稿を行う予定である。
---------------------	--

整理番号	R-4	研究開始年度	平成 27 年度	研究終了年度	平成 29 年度
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) Organotellurium-mediated living radical polymerization in aqueous media				
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) Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor Michael CUNNINGHAM・Queen's University・Professor				
29年度の研究交流活動	<p>単純エマルジョン重合 (ab initio emulsion polymerization) はラジカル重合を産業界で利用する時に、最も利用されている方法である。しかし、この方法をリビングラジカル重合系に適応することはこれまで困難であった。山子グループはこれまで CRUDDEN・CUNNINGHAM グループとの共同研究を通じ、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がリビング的に進行する可能性を明らかにしてきた。29年度では、重要モノマーであるメタクリル酸メチルの重合に焦点を絞り、その最適化を行った。すでに、山子グループの大学院学生が CRUDDEN・CUNNINGHAM グループを訪問して単純エマルジョン重合の実験手法を学んできていることから、山子グループで実験条件を変えて得られた結果を、電子メールを中心に議論することで研究を進めた。</p>				

<p>29年度の研究 交流活動から得 られた成果</p>	<p>メタクリル酸メチルの単純エマルジョン重合が熱反応条件のみならず光照射条件でも制御されて進行し、生成したポリマーの分子量と分布と共に、生成したポリマー粒子の粒径サイズの制御も行えた。不透明な粒子が生じるエマルジョン重合系では光が透過しないために光活性化はうまくいかない、との常識を覆す結果である。用いる光源もLEDランプのような低エネルギー可視光で充分であることから、実用性も備えた条件である。さらに、機能性高分子材料の宝庫であるブロック共重合体の合成にも適していることを明らかにした。ブロック共重合体合成を均一系重合で行う場合、重合系の粘度が高くなるため、モノマー転化率を上げるのが困難であると共に、最初に合成したポリマーを次のモノマーに溶解することが難しい、等の実用的な問題が生じる。しかし、エマルジョン系では粘度は問題にならないことから、最初のモノマーが完全に消費された後、単に次のモノマーを加えるという簡便な操作で、ブロック共重合体が合成できた。この点も実用面で極めて重要である。</p>
--------------------------------------	--

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 29 年度
研究課題名	<p>(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</p> <p>(英文) Development of Organic Electronics Materials based on Highly Selective Reaction</p>				
日本側代表者 氏名・所属・職	<p>(和文) 若宮淳志・京都大学・准教授</p> <p>(英文) Atsushi WAKAMIYA・Kyoto University・Associate Professor</p>				
相手国側代表者 氏名・所属・職	<p>(英文) Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor</p> <p>Suning WANG・Queen's University・Professor</p>				
29年度の研究 交流活動	<p>有機薄膜太陽電池及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。本年度は、従来のフラーレン誘導体に代わる優れた n 型半導体材料の開発に取り組んだ。中村 (D2) をクイーンズ大学の WANG 研に 2 ヶ月間 (8 月-9 月) 派遣し、拡張 <math>\pi</math> 共役系分子の合成実験を行った。帰国後、中村は、WANG 研での経験に基づいて、ナフタレンジイミドを用いた透明 n 型材料の設計と合成を行った。また、ホウ素を含む電子受容性の高い <math>\pi</math> 共役系化合物の設計と合成に関して、7 月に香港で開催された国際学会 (IMEBORON) で若宮と WANG 教授はその後の進捗と今後の展開方針について打ち合わせを行った。さらに、1 月にミュンスターで開催された Core-to-Core のシンポジウムでの発表と意見交換会にて CRUDDEN 教授と次年度の研究打ち合わせを行った。</p> <p>国内では、中村教授のグループが開発した p 型半導体材料を用いたペロブスカイト太陽電池の作製と評価を進め、これまでに学生 2 名が述べ 30 日間当該研究室を訪問し、実験を行っている。</p>				
29年度の研究 交流活動から得 られた成果	<p>WANG 教授の研究室との共同研究で培った知見と経験を基に開発した n 型半導体材料については、ペロブスカイト太陽電池として 10%以上の光電変換効率を示すことを確認し、現在、論文発表の準備を進めている。また、本研究で得られた成果から、n 型だけでなく、p 型半導体材料についても、高い光透過性と電荷移動度およびアムルファス膜安定性をあわせもつ材料開発が必要であることが明らかになってきた。これまでに、ベンゼン環のメタ位で連結した一連の化合物を合成してきたが特性は未だ十分ではない。一方で、sp<sup>3</sup> 炭素で連結した化合物群も有望な候補材料であるが、これらについては、効率的合成法がなく、開発が遅れていた。そこで、CRUDDEN 教授らが最近見出した、Ni 触媒を用いた三級スルホンを用いたカップリング反応を利用することで、設計した一連の sp<sup>3</sup> 炭素架橋型の透明 p 型半導体化合物が迅速に合成可能であると考えた。次年度は、これらの合成とそれを用いた太陽電池特性の評価を中心に検討を進めていく予定である。</p>				

整理番号	R-7	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	<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-natural 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	<p>(和文) 斎藤進・名古屋大学・教授</p> <p>(英文) Susumu SAITO・Nagoya University・Professor</p>				
相手国側代表者 氏名・所属・職	<p>(英文) Bernhard WUENSCH・University of Muenster・Professor</p> <p>Cathleen CRUDDEN・Queen's University・Professor</p> <p>Philip JESSOP・Queen's University・Professor</p>				
29年度の研究 交流活動	<p>・斎藤-WUENSCH らの共同研究チームでは, opioid 受容体 (<math>\mu</math>, <math>\delta</math>, <math>\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法を開発し (斎藤グループ), 各受容体群のバイオアッセイ系によるそれら不斉分子群の生理活性評価 (競合阻害試験) を行う (WUENSCH グループ) 計画である. 様々な立体構造と置換基をもつジ (エチレンイミン) を立体選択的に合成した (斎藤グループ). 斎藤グループが合成したまた別の生理活性候補化合物群を WUENSCH グループ送付しているが, まだバイオアッセイが済んでない. 現在, opioid 受容体に働く「鎖状」リード化合物を見つける目的で, 光学活性な非天然オリゴペプチドの触媒的合成法の開発も進めている (斎藤グループ).</p> <p>・斎藤- JESSOP/CRUDDEN らの共同研究チームでは, 当カナダ・グループから直鎖型および分岐型のポリ (エチレンイミン) を受け取りこれらポリアミン類の多 N-メチル化を, 金属担持半導体光触媒と MeOH を用いて行った (斎藤グループ). その複雑な高分子骨格の構造決定について名古屋と Kingston の間でスペクトル情報を交換しつつ Skype で年 2 回ほど議論した.</p>				

<p>29年度の研究 交流活動から得 られた成果</p>	<p>29年度は様々な生理活性物質の N-アルキル化法を開発した（斎藤グループ）段階である。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>・ Cu/TiO<sub>2</sub> と Au/TiO<sub>2</sub> の混合光触媒系が近紫外/可視光照射下、1級アミンの新しい N-モノアルキル化法、N,N-ジアルキル化法に成功した。環状のオリゴ（エチレンイミン）であるアザクラウンエーテルの全ての 2 級アミンの多 N-メチル化も Pd/TiO<sub>2</sub> 単独で可能となった</li> <li>・ 一級アミンと一級アミンとのカップリングによる二級アミン合成が近紫外/可視光照射下の Pd/TiO<sub>2</sub> で可能となった</li> <li>・ 天然アミノ酸由来のオリゴペプチドのセリン残基やスレオニン残基を足がかりとした分子内脱水環化に基づくオキサゾリン環やオキサゾリジン環が、環状ホスファゼン触媒有り無しでそれぞれ形成されることを見出した。</li> </ul>
--------------------------------------	---

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
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 (英文) Shigehiro YAMAGUCHI・Nagoya University・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Frank GLORIUS・University of Muenster・Professor				
29年度の研 究交流活動	<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、共同研究を実質的かつ蜜に進めた。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。この研究の生物学的実験の検証を進め、脂肪酸代謝プローブとしての有用性を明らかにした。研究成果について詳細に議論するために、梶原（修士学生）と多喜特任准教授を派遣した。</p>				
29年度の研 究交流活動から得 られた成果	<p>これまでに開発に成功している脂質プローブは、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。脂肪酸代謝過程での蛍光プローブの局在を蛍光特性の変化により追跡するとともに、質量分析により代謝生成物の同定に成功した。現在、論文発表に向け、成果を取りまとめているところである。</p>				

整理番号	R-9	研究開始年度	平成 28 年度	研究終了年度	平成 30 年度
研究課題名	(和文) 超耐光性蛍光団の開発と生体イメージングへの応用 (英文) Development of super photostable fluorophores and applications to bioimaging				
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) Martin OESTREICH・University of Muenster・Professor				
29年度の研 究交流活動	<p>28年度のジョイントシンポジウムの際の議論をもとに、山口グループとOESTREICHグループとの間で共同研究を開始した。小笠原（博士学生）を派遣し、耐光性蛍光団の開発に、OESTREICHグループ独自の触媒系を用いたC-H活性化変換反応を応用することにより取り組み、その端緒となる結果を得ることができた。この結果をもとに、OESTREICHグループでさらに検討を進め、得られた化合物の光物性や電気化学的特性などの基本物性はもとより、脂肪滴染色プローブとしての応用について山口グループで検討を進めた。</p>				
29年度の研 究交流活動から得 られた成果	<p>山口グループでは、耐光性に優れた蛍光プローブの開発に精力的に取り組んでいるが、励起波長、発光波長、耐光性の点でバリエーションに富んだ蛍光団の開発が依然必要である。その一つとして本研究で生み出される基本骨格は高い潜在性をもっており、生物学研究にインパクトを与える化合物群へと発展する可能性を秘めている。ケイ素、硫黄架橋ラダー<math>\pi</math>電子系の新たに開発した汎用性の高い合成法の検証を行うとともに、光物性を評価し、その脂肪滴プローブとしての潜在性を検討した。得られた成果を論文として国際誌に発表した。</p>				

整理番号	R-10	研究開始年度	平成28年度	研究終了年度	平成30年度
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活性制御</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	<p>(和文) 唯美津木・名古屋大学・教授</p> <p>(英文) Mizuki TADA・Nagoya University・Professor</p>				
相手国側代表者 氏名・所属・職	<p>(英文) Frank GLORIUS・University of Münster・Professor</p>				
29年度の研究 交流活動	<p>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配位子として担持固体触媒表面に配位して、触媒的に不活性な固体表面を電子的に活性化させ、有用触媒反応に展開する研究を行った。GLORIUS グループで、カルベン配位子の合成と担持触媒への修飾、触媒反応実験を主に行い、唯グループにおいて担持触媒の調製、修飾した触媒の構造解析を実施した。また、同じくミュンスター大の 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ている。</p>				
29年度の研究 交流活動から得 られた成果	<p>平成28年度の研究成果を更に発展させ、両グループの有機的な共同研究を推進した。今年度は、Ru 触媒に加えて、N-ヘテロサイクリックカルベンの修飾を担持 Pd 触媒に修飾したところ、N-ヘテロサイクリックカルベンの修飾によって、触媒表面が電子供与を受け、ブ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、理論的に見出した。また、Buchwald-Hartwig アミノ化反応への応用が可能であることも明らかにした。これらの研究成果は、両グループの共同研究の成果として、<i>J. Am. Chem. Soc.</i> 誌に掲載された。</p>				

整理番号	R-11	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				
	(英文) Masaharu NAKAMURA・Kyoto University・Professor				
相手国側代表者 氏名・所属・職	(英文) Philip JESSOP・Queen's University・Professor				
29年度の研 究交流活動	<p>木質バイオマス資源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た。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、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を見出した。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を目指し 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するため、担当学生を JESSO グループに派遣することを試みたが、講義日程都合が合わず次年度へ延期することとした。また、触媒機能の向上については、名古屋大学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、予備的な検討を開始した。具体的には、分解対象となる杉およびヒノキを、京都府相良郡笠置町の吉備吉野森久銘木店所有の間伐展示林にて実際に伐採、サンプルを入手した。</p>				
29年度の研 究交流活動から得 られた成果	<ul style="list-style-type: none"> <li>・新規の木質バイオマス変換触媒反応の開発を行い、一部特許申請権利化を行い、さらに学会にて口頭発表を行った。</li> <li>・斎藤グループと木質分解分子触媒の合成と機能評価をのための木質バイオマス試料を入手、共有することが出来た。</li> </ul>				

## 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30年2月2日 (1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 派遣元	セミナー開催国 (ドイツ)	
	A.	B.
日本 〈人／人日〉	A.	14 / 87
	B.	0
ドイツ 〈人／人日〉	A.	16 / 16
	B.	40
カナダ 〈人／人日〉	A.	4 / 24
	B.	0
合計 〈人／人日〉	A.	34 / 127
	B.	40

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>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一同に会し、本事業を強力に推し進めていくべく直接的な研究ディスカッションをおこなった。それにより、新たな研究テーマの誕生や若手の自発的な研究シーズの提案を期待し、本プログラム後半に差し掛かってきた共同研究のスピードアップや拡大化をはかった。</p> <p>広くドイツ国内へシンポジウム開催をアナウンスし、外部からの参加希望者を受入れることによって活発な意見交換や新しい研究テーマのヒントなどを開拓していった。</p>	
セミナーの成果	<p>共同セミナー開催時に、各拠点大学、協力機関のメンバーが直接顔を合わせてダイレクトにディスカッションができるということは、これまでと同様に共同研究の進捗状況の確認や、今後の方向性を速やかに定めるという点で、大いにその成果を発揮したといえる。</p> <p>また、共同セミナーの参加者における発表者に対する質疑応答から、新たな研究課題のシーズが見出されたり、新たな着目点による研究領域の広がりが発見されることは、本セミナー開催において最も有意義な成果と考えられる。</p>	
セミナーの運営組織	<p>ドイツ・ミュンスター大学の Frank GLORIUS 教授を委員長とし、日本とカナダからの参加者とりまとめを名古屋大学が担当、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して開催した。ミュンスター大学と名古屋大学が中心となり、参加者やプログラム構成などをおこなった。</p>	
開催経費 分担内容 と金額	日本側	<p>内容 外国旅費 金額 7,600,000 円</p> <p>不課税・非課税取引に係る消費税</p> <p>608,000 円</p> <p>合計 8,208,000 円</p>
	(ドイツ)側	<p>内容 国内旅費、会議費</p>
	(カナダ)側	<p>内容 外国旅費</p>

### 7-3 研究者交流（共同研究、セミナー以外の交流）

共同研究、セミナー以外でどのような交流（日本国内の交流を含む）を行ったか記入してください。

日数	派遣研究者		訪問先・内容		派遣先
	氏名・所属・職名	氏名・所属・職名	氏名・所属・職名	内容	
3 日間	山口茂弘・名古屋大学・教授	Cathleen CRUDDEN・クイーンズ大学・教授		研究に関する情報収集	カナダ
5 日間	山口茂弘・名古屋大学・教授	Suning WANG・クイーンズ大学・教授		研究に関する情報収集	カナダ

### 7-4 中間評価の指摘事項等を踏まえた対応

（※B. アジア・アフリカ学術基盤形成型は記載不要）

中間評価では、想定以上の進展があると高く評価いただいた。これまでのドイツとの連携とともにカナダや京大との連携も加わり、共同研究が円滑に進み、当該分野の学術の進歩に貢献していることが高く評価された。一方で、個人間の交流ではなく、より多くの研究者間の国際共同研究の推進の必要性も指摘された。この点に関しては、国内で名大と京大が参画して実施している統合物質創製化学研究機構の活動と連動させながら、共同研究の推進の可能性を模索しており、実際、名大の斎藤グループと京大の中村グループとの連携の可能性の他、名大の山口グループと京大の若宮グループとの間の有機電子材料のデバイス応用への展開に関する研究についても引き続き検討した。特に後者に関しては、反芳香族性ホウ素 $\pi$ 電子系の合成と物性評価、反応性に関して、成果を論文として発表した。また、日本側の拠点教員間で目標と成果の共有を行い、これらの連携を基盤に、新学術領域研究の新規申請についても検討をおこなった。これについては引き続き検討を進める予定である。また、統合物質創製化学推進機構の活動と合わせて国内シンポジウムを開催するように準備を進めている。これにより本事業の国内での認知度を上げられると期待できる。若手研究者の養成についても、学生の単なる海外セミナーへの派遣に加え、学生派遣による共同研究の中長期の派遣を行った。

## 8. 平成29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		( )	2/ 8 ( )	2/ 8 ( 0/ 0 )
	2		( )	1/ 72 ( )	1/ 72 ( 0/ 0 )
	3		2/ 10 ( )	1/ 1 ( )	3/ 11 ( 0/ 0 )
	4		14/ 87 ( )	( )	14/ 87 ( 0/ 0 )
	計		16/ 97 ( 0/ 0 )	4/ 81 ( 0/ 0 )	20/ 178 ( 0/ 0 )
ドイツ	1	( )		( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )		( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )		( )	0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	1/ 25 ( )		( )	1/ 25 ( 0/ 0 )
	計	1/ 25 ( 0/ 0 )		0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 25 ( 0/ 0 )
カナダ	1	( )	( )		0/ 0 ( 0/ 0 )
	2	( )	( )		0/ 0 ( 0/ 0 )
	3	( )	( )		0/ 0 ( 0/ 0 )
	4	( )	4/ 24 ( )		4/ 24 ( 0/ 0 )
	計	0/ 0 ( 0/ 0 )	4/ 24 ( 0/ 0 )		4/ 24 ( 0/ 0 )
合計	1	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	2/ 8 ( 0/ 0 )	2/ 8 ( 0/ 0 )
	2	0/ 0 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	1/ 72 ( 0/ 0 )	1/ 72 ( 0/ 0 )
	3	0/ 0 ( 0/ 0 )	2/ 10 ( 0/ 0 )	1/ 1 ( 0/ 0 )	3/ 11 ( 0/ 0 )
	4	1/ 25 ( 0/ 0 )	18/ 111 ( 0/ 0 )	0/ 0 ( 0/ 0 )	19/ 136 ( 0/ 0 )
	計	1/ 25 ( 0/ 0 )	20/ 121 ( 0/ 0 )	4/ 81 ( 0/ 0 )	25/ 227 ( 0/ 0 )

※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
0/ 0 ( )	0/ 0 ( )	0/ 0 ( )	0/ 0 ( )	0/ 0 ( 0/ 0 )

## 9. 平成29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	486,720	
	外国旅費	9,992,123	
	謝金	0	
	備品・消耗品 購入費	5,699,108	
	その他の経費	22,680	
	不課税取引・ 非課税取引に 係る消費税	799,369	
	計	17,000,000	
業務委託手数料		1,700,000	消費税額は内額
合 計		18,700,000	

## 10. 平成29年度相手国マッチングファンド使用額

相手国名	平成29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	約 4,200 [ユーロ]	550,000 円相当
カナダ	約 12,380 [カナダドル]	1,040,000 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。