



**研究領域名** 直截的物質変換をめざした分子活性化法の開発

**研究期間** 平成22年度～平成26年度（5年間）

大阪大学・大学院工学研究科・教授 **茶 谷 直 人**

**【本領域の目的】**

有機化合物は化学結合の集合体である。有機合成化学者は、これらの化学結合を活性化して組み替えることにより、新しい物質の創製に挑戦してきた。しかし、これまではごく一部の反応性の高く活性化しやすい化学結合だけを利用してきた。したがって、その合成に非効率的な多段階の変換反応が必要とされることが多かった。21世紀のものづくりを支える無駄のない、高効率な物質合成を実現するためには、今まで有効に利用されてこなかった化学結合の新たな活性化法を開発し、従来困難と考えられていたより直截的な触媒的分子変換反応を実現することが必須である。本新学術領域研究では、『新しい結合活性化法の開拓、新しい反応活性種の創出、新しい反応場の構築』の3つのキーワードを掲げ、有機合成化学、有機金属化学だけでなく、触媒化学、表面化学、無機化学、生化学、分析化学、高分子科学などの広い分野の研究者が連携することにより、画期的な触媒的分子変換反応の開発を推進する。既知反応の改良でもなく、既知反応の組み合わせによる新しい反応の開発でもない、真に新しい化学結合変換反応を開拓することにより『分子活性化の方法論』にブレークスルーをもたらし、物質変換手法をより直截的なものに刷新することを最終目標とする。

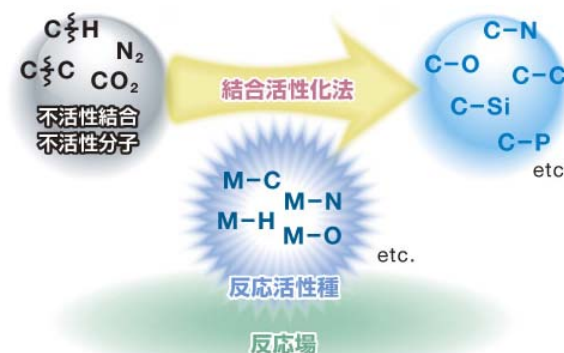
**【本領域の内容】**

**A01 班 新しい結合活性化法の開拓：**新たな結合活性化法の開拓に焦点を絞り触媒反応の開発を行う。例えば、有機化合物で普遍的な化学結合である炭素－水素結合および炭素－炭素結合の活性化を経る触媒反応の開発に代表される炭化水素類の効率的な変換反応の開発は、本新領域研究のめざしている直截的分子変換反応の最も重要な課題である。さらに、各種の不活性な結合の活性化を鍵過程とする触媒反応の開発、また、一酸化炭素や二酸化炭素、窒素、酸素、単純アルカン、アルケン等の小分子の活性化を利用する革新的な直截的変換反応の実現などを目標とする。

**A02 班 新しい反応活性種の創出：**不活性な結合や不活性な分子を効率よく活性化し直截的な分子変換反応を実現するための基盤として、新たな反応活性種の創出に焦点を絞り研究を推進する。革新的な分子変換を可能とする分子触媒活性種、小分子の効率的活性化を可能とする高反応性活性種、生体触媒のエッセンスを高度にモデル化した反応性活性種、固体表面を活用する高機能性活性種、高度に設計された固体触媒等、新たな概念に基づく独創的な反応活性種の創出をめざす。

**A03 班 新しい反応場の構築：**新しい分子変換反

応を可能とする反応場の設計と構築に焦点を絞り研究を推進する。特に反応活性種や中間体の安定化、高度な基質特異性の発現、不斉反応の制御などにおける反応場の役割を意識した研究を積極的に実施する。また環境に優しい水中などでの分子活性化と反応促進をめざした新反応場構築への挑戦や、反応場を分子フラスコと見なしたユニークな分子活性化法などを模索する。また、高度に設計された固体表面反応場やタンパク質マトリクスを駆使した酵素反応を凌駕する新しい触媒系の構築や、巨大有機分子を反応場とした活性種の生成への取り組み等をめざす。



**【期待される成果】**

従来不可能と考えられていた分子変換の実現や、従来予想もされなかった新反応が開発されると、そこに内在する「新しい化学」が契機となってブレークスルーがもたらされ、それによりものづくりが刷新される。新しい分子活性化法の創製は、有機合成化学の手法、ひいてはものづくりを大きく変革、刷新するポテンシャルを有している。医薬、農薬、材料科学、高分子科学などの、有機合成化学が支えている物質科学分野へ高い機能を持った新規化合物の供給を可能にし、これらの分野の進展と共に、研究手法そのものを変革することにつながると期待される。

**【キーワード】**

直截的分子変換：例えば、反応性の低い炭素－水素結合を活性化炭素－ハロゲン結合に変換することなく合成に利用する変換反応

**【ホームページ】**

<http://www.molecular-activation.jp>