



研究領域名 高難度物質変換反応の開発を指向した  
精密制御反応場の創出

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授 ましま かずし  
真島 和志

研究課題番号：15H05795 研究者番号：70159143

【本領域の目的】

有機合成化学は、創薬科学、材料科学、高分子科学などの物質科学を支える基盤科学技術であり、経済的にも見合うレベルで有用化合物を安定供給すること、そして新しい機能・生理活性を有する新規化合物を創製することが求められています。本領域が対象とする触媒反応の開発は、国際的に高い競争力を持っており、その成果はノーベル化学賞（2001年、野依教授：Ru 錯体触媒による不斉水素化反応；2010年、鈴木教授・根岸教授：Pd 触媒による炭素-炭素カップリング反応）として高く評価されています。本研究領域は、可能な限り入手容易で安価な原料利用（例：炭化水素を直接利用する合成反応）、枯渇性資源非依存型の物質変換反応（例：CO<sub>2</sub>、O<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>を利用する反応）、環境負荷軽減（例：廃棄物ゼロの高原子効率反応や省エネルギー反応）等の高難度有機合成反応の開発を目指します。そのためには、図1に示すように「反応活性点のみならず、反応活性点と反応に密接に関わるその周辺領域を合わせた『反応場』の検討が極めて重要であり、遷移金属錯体反応場、生体反応場、固体表面反応場等を駆使した革新的な触媒開発が鍵を握っています。本研究領域では特に反応活性点周辺領域に新たに設計した反応性制御部位、基質活性化部位、選択性制御部位等を精密かつ自在に構築することにより、独創的な反応場（高機能・高活性・高選択性触媒）の創出を目指します。

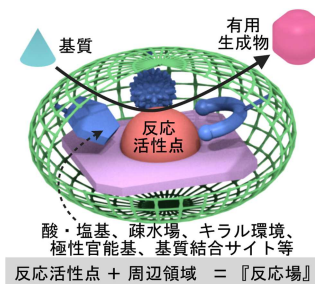


図1. 反応場の概念図

【本領域の内容】

精密制御反応場を創出するための基本戦略として、今まで二次的役割として軽視されがちであった反応活性点近傍の立体構造・電子状態を自在に制御し、新反応の発見や従来達成が困難とされてきた高難度かつ有用な物質変換反応の達成を目指して、次の四つの研究項目を構成します。

- 研究項目 A01：高難度有用物質変換反応の開発
- 研究項目 A02：精密制御金属錯体反応場の創出
- 研究項目 A03：精密制御生体分子反応場の創出
- 研究項目 A04：精密制御巨大分子反応場の創出

本領域では、図2に示すように、研究項目 A01 が新反応開発の中心に位置し、高分子化学、有機

金属化学、生体関連化学、固体触媒化学に立脚した反応場を用いて高難度物質変換反応の開発に挑戦します。A02、A03、A04 では、金属錯体反応場、生体分子反応場、巨大分子反応場の種類ごとに研究項目を設定し、研究項目に応じて独創的な反応場の開発を行うとともに、共同研究を通じて、新しい反応場による新反応の開発に取り組みます。

【期待される成果と意義】

従来不可能と考えられていた分子変換の実現や、予想もされなかった新反応を開発することは、新しい「有機化学」を切り開くチャンスであり、それ自体が研究上の大きなブレークスルーです。新反応の開発により、ものづくりが刷新され、医薬、農薬、機能性化成品、高分子材料などの合成ルートが一変する大きな発展が期待されます。本領域の意義は、「精密制御反応場」を創出することにより斬新な物質変換手法の発展に大きく寄与することであり、これらの取り組みを通じて、持続可能な社会へ貢献することを目標としています。

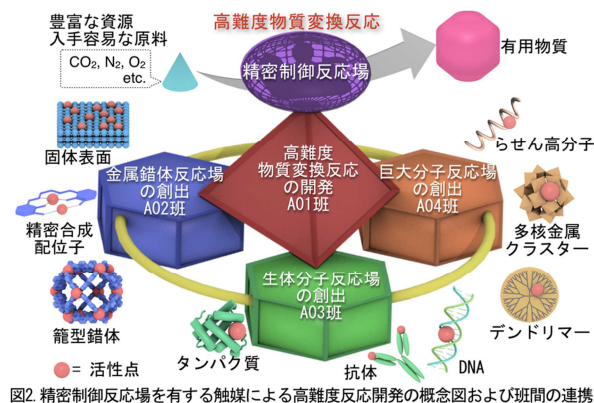


図2. 精密制御反応場を有する触媒による高難度反応開発の概念図および班間の連携

【キーワード】

反応場：反応活性点と反応に関わるその周辺領域  
高難度物質変換反応：従来難しいとされてきた有機合成反応（炭化水素の官能基化、CO<sub>2</sub>、O<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>を利用する反応、廃棄物ゼロの高原子効率反応や省エネルギー反応など）

【研究期間と研究経費】

平成 27 年度～31 年度  
1,221,200 千円

【ホームページ等】

<http://precisely-designed-catalyst.jp/>



**Title of Project : Precise Formation of a Catalyst Having a Specified Field for Use in Extremely Difficult Substrate Conversion Reactions**

Kazushi Mashima  
(Osaka University, Graduate School of Engineering Science,  
Professor)

Research Project Number : 15H05795 Researcher Number : 70159143

**【Purpose of the Research Project】**

Synthetic organic chemistry is a fundamental science and technology that supports material sciences, such as drug development, polymer science, etc., by providing practical and efficient synthetic methods for the preparation of useful organic compounds. Organic chemists are expected to contribute not only to innovating and developing more practical and environmentally benign synthetic protocols but also to creating new compounds with higher functionalities or biological activities. For this purpose, development of new catalysts should play a key role, and the ultimate object of this program is to realize the precise formation of a catalyst with a specific scaffold to bring about innovation in this research field. Accordingly, this project is directed toward generating new catalysts with specific reactive fields that effectively enable extremely difficult substrate conversions. Examples of target reactions are direct functionalization of easily available hydrocarbons; direct conversion of CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, and N<sub>2</sub> into useful organic molecules; clean reactions without waste; and so on. As shown in Figure 1, a new research area – “Precisely Designed Catalysts with Customized Scaffolding” – will be developed by designing a catalytically active site surrounded by carefully designed scaffolds that enable control of reactivity and selectivity, activation of substrates, etc.

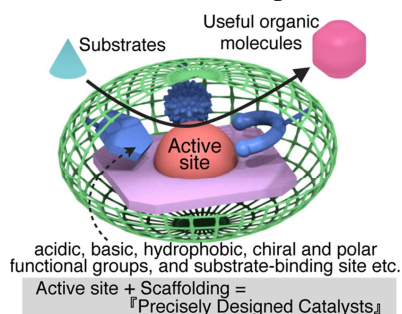


Fig 1. Strategy for Precisely Designed Catalysts.

**【Content of the Research Project】**

In this research area, as shown in Figure 2, the following four research items cooperatively collaborate with each other to introduce innovation in the field of catalytic synthetic organic chemistry. Intensive studies will be performed to install the appropriate functions of suitable steric and electronic properties into a specific field around a catalytically active site.

Research Item A01: Development of Extremely Difficult Substrate Conversion; Research Item A02: Precise Formation of Transition Metal Catalysts with Molecular Scaffolding; Research Item A03: Precise Formation of Catalysts with Biomolecular Scaffolding; Research Item A04: Precise Formation of Catalysts with Large Scale Molecular Scaffolding.

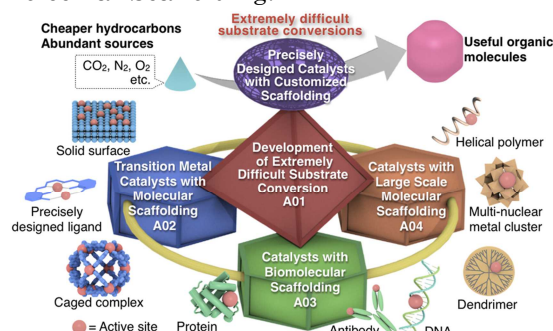


Fig 2. Concepts of Precisely Designed Catalysts with Customized Scaffolding and the Four Cooperatively-collaborating Research Items.

**【Expected Research Achievements and Scientific Significance】**

The creation of new catalysts with a specific field will open up new "synthetic organic chemistry", leading to the renovation of synthetic methodologies in industry and contributing to the realization of a sustainable society.

**【Key Words】**

**Catalyst Having a Specified Field:** A catalyst with a highly active site surrounded by various reactivity-controlling groups.

**Extremely Difficult Substrate Conversion Reactions:** Typical examples are direct functionalization of hydrocarbons; direct conversion of CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, and N<sub>2</sub> into useful organic molecules; and clean reactions without waste.

**【Term of Project】** FY2015-2019

**【Budget Allocation】** 1,221,200 Thousand Yen

**【Homepage Address and Other Contact Information】**

<http://precisely-designed-catalyst.jp/>  
mashima@chem.es.osaka-u.ac.jp