

【新学術領域研究（研究領域提案型）】 理工系



研究領域名 分子合成オンデマンドを実現するハイブリッド触媒系の創製

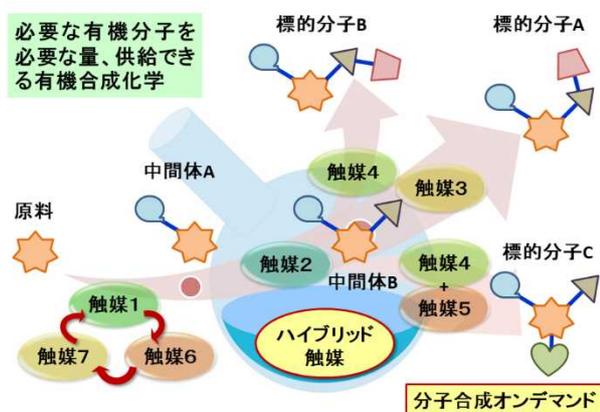
東京大学・大学院薬学系研究科・教授

かない もとむ
金井 求

研究課題番号：17H06441 研究者番号：20243264

【本領域の目的】

有機合成化学は、これまで永続的な発展を遂げてきているものの、未解決な重要問題も幾つか存在する。その最たるものは、フラスコ内では一つ二つの反応を行うことはできても、生体内のような複数の酵素（生体触媒）が関与する多触媒反応による有機分子の活性化や複雑な化合物の挙合成になると、既存の触媒化学では全く歯が立たないということであろう。本研究領域では、独立した機能を持つ複数の触媒（あるいは触媒部位）の働きを重奏的に活かしたハイブリッド触媒系を創製し、実現すれば大きなインパクトを持つものの従来は不可能であった、極めて効率の高い有機合成反応を開発する。ハイブリッド触媒系の創製により、構造が単純で入手容易な原料から優れた機能を持つ付加価値の高い有機分子を、要求に応じて迅速に組み上げる分子合成オンデマンドを実現する（図）。



図．複数の触媒の重奏により、必要な有機分子を必要な量、供給できる有機合成化学を創る

【本領域の内容】

物理から化学に至る広い領域から我が国のトップレベルの研究者を結集して、新たな触媒化学を創り、分子合成に革新をもたらすべく、独創的で挑戦的な研究を行う。分野融合、国際化、若手育成を鍵となる施策としながら計画班と公募班が一体となって、本領域があることで初めて可能となる本質的な貢献を成し遂げたい。そのために、以下の三つの項目を設置する。

研究項目 A01（分子活性種発生）：構造が単純で入手容易な有機分子（例えば炭化水素）を活性化し、分子活性種を発生するハイブリッド触媒系の創製を行う。

研究項目 A02（高次反応制御）：反応位置、官能基

選択性、立体化学など、有機分子を効率的・実用的にオンデマンド合成するために必須となる多種類の因子の精密制御を、ハイブリッド触媒系を用いて実現する。

研究項目 A03（超効率分子合成）：原料から目的とする有機分子に向けて、構造の複雑性を迅速に向上させるドミノ触媒反応の創出と応用展開を狙う。

【期待される成果と意義】

ハイブリッド触媒系の創製により、有機合成化学における以下の本質的な転換を世界に先駆けて現実のものとする。すなわち、1) 炭化水素等の安定で入手容易な炭素資源の効率的な変換（効率性）、2) 多様な分子構造を狙った通りに、かつ正確に組み上げる分子合成オンデマンド（多様性）、3) 構造が複雑で高付加価値な有機分子の簡便で迅速な大量供給（実践性）、である。本領域から期待される成果は、有機合成化学の常識を書き換えるものであり、ハイブリッド触媒系という新概念とその可能性を明確な形で世界に発信し、学術研究の新たな流れを生み出すものである。同時に、構造の定まった有機分子を必要とする様々な分野の物質合成の在り方を一変させ、これまで至難とされていた物質供給への扉をひらく。

地球上のすべての人々が、様々な場面で有機分子の恩恵を受けている。一方で、有機分子が持つ無限の構造多様性に比較すると、現状の有機合成化学の力量で社会に供給できる有機分子の構造は、極めて限定的である。ハイブリッド触媒系という新概念から有機合成化学の革新的進歩を引き起こすことで、人類が入手できる有機分子の多様性と複雑性を大きく拡張し、医薬、農薬、食品、機能性材料、環境といった広い分野に波及効果を及ぼすとともに、最終的には人類の健康や福祉の増進、豊かな文明社会の進歩に貢献することが期待できる。

【キーワード】

ハイブリッド触媒系、分子合成オンデマンド、分子活性化、炭素資源、反応制御、位置選択性、官能基選択性、立体選択性、ドミノ触媒反応、有機合成化学、金属錯体触媒、有機触媒、固体触媒、光触媒、重合触媒

【研究期間と研究経費】

平成 29 年度－33 年度
1,224,600 千円



Title of Project : Hybrid Catalysis for Enabling Molecular Synthesis on Demand

Motomu Kanai

(The University of Tokyo, Graduate School of Pharmaceutical Sciences, Professor)

Research Project Number : 17H06441

Researcher Number : 20243264

【Purpose of the Research Project】

Organic synthesis has been consistently developed and refined up to the present, but several important issues remain unresolved. One such issue is the practical synthesis of high-value-added complex molecules through streamlined multicatalytic reactions starting from readily-available, abundant molecules. Nature utilizes multicatalytic (i.e., multienzymatic) systems for the biosynthesis of natural products. The most effective artificial multicatalyst system in a flask so far, however, promotes only two or three reactions at most.

With this in mind, the purpose of our research project is to develop hybrid catalysis, a multicatalytic system involving catalysts with distinct individual functions. Integrating the functions of multiple catalysts, hybrid catalysis will enable molecular synthesis of high efficiency, flexibility, and adaptability on demand, starting from abundant organic molecules such as hydrocarbons and other carbon feedstocks (Figure).

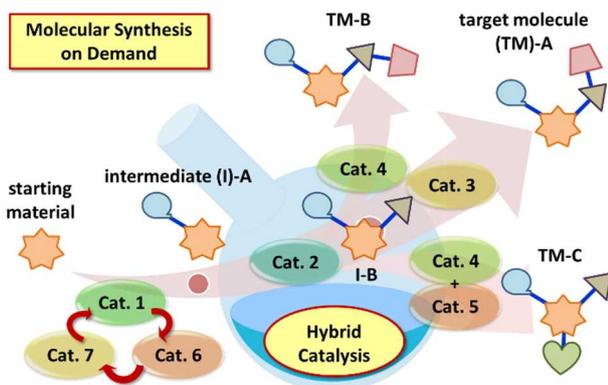


Figure. Molecular Synthesis on Demand Based on the Development of Hybrid Catalysis, Integrating Functions of Multiple Catalysts

【Content of the Research Project】

Based on the interdisciplinary research ranging from physics to chemistry, we intend to develop conceptually new catalyses leading to innovative organic synthesis. The following three research aspects, A01, A02, and A03, work together to cultivate the supremely high-level research only possible with this project framework.

A01 (Activation): Identification of hybrid catalyses activating stable and abundant organic molecules, including hydrocarbons and other

carbon feedstocks.

A02 (Control): Identification of selective hybrid catalyses that precisely control multiple reaction parameters, including regio-, functional-group, and stereoselectivity, with high flexibility and adaptability.

A03 (Continuity): Identification of domino catalyses rapidly increasing structural complexity, starting from simple molecules to produce multifunctional molecules.

【Expected Research Achievements and Scientific Significance】

The following ground-breaking achievements are expected: 1) efficient conversion of stable and abundant carbon feedstocks, such as hydrocarbons, to valuable organic molecules; 2) on-demand synthesis of a specific target molecule among structurally diverse molecules; 3) practical synthesis of target molecules without restriction due to structural complexity. Inducing innovation in molecular synthesis, this project will vastly expand the structural variety of organic molecules available to human beings. This project will markedly influence the various fields that require organic molecules, such as the pharmaceutical sciences, agriculture, and industry. This project will in the long term benefit human healthcare, well-being, and the advancement of civilization and society.

【Key Words】

Hybrid catalysis, molecular synthesis on demand, activation of organic molecules, carbon feedstock, reaction control, regioselectivity, functional-group selectivity, stereoselectivity, domino catalysis, organic synthesis, metal complex catalyst, organocatalyst, solid catalyst, photocatalyst, polymerization catalyst

【Term of Project】 FY2017-2021

【Budget Allocation】 1,224,600 Thousand Yen