

最先端・次世代研究開発支援プログラム
事後評価書

研究課題名	芳香環連結化学のブレークスルー
研究機関・部局・職名	名古屋大学・トランスフォーメティブ生命分子研究所・教授
氏名	伊丹 健一郎

【研究目的】

持続可能な高度文明社会の実現は、人類が直面する最も困難で挑戦的な課題である。現在社会が緊急に必要としているのは、科学研究が、地球規模の負の環境変化を軽減するための論理的方法を提案する母体となり、環境変化に順応しつつ持続可能な未来社会を実現するための新物質、新プロセスを創出することである。この点において物質創製の要である合成化学の重要性は明白である。合成化学における真に有用な基本的方法論の開拓は、有機物質を扱うあらゆる分野の飛躍的進展ひいては持続的社会的実現につながる。

このような取り組みの中で重要なのは、何を持続的社會に繋がる物質群に選定し、それらの物質群を持続的社會に貢献する如何なる方法で提供するかである。本研究では、医農薬、生物活性物質、有機エレクトロニクス材料、有機太陽電池、太陽熱変換材料などの多彩な機能が約束された「芳香環連結化合物」を持続的社會に繋がり得る物質群を選び、これらを無駄のない理想的合成法で提供することを目的とする。

機能ある芳香環連結化合物は枚挙に暇がないが、アルツハイマー病などの重要疾病の潜在治療薬や純正カーボンナノチューブなどの次世代有機マテリアルを本研究での中核的な標的物質に選定し、これらを圧倒的なスピードで世に送り出すことを目指す。では、如何に芳香環連結化合物を合成するのか。長きに渡り合成化学の中心に居座り続けてきた課題であるが、最先端合成法も環境負荷の観点からは未だ不十分である。現在、芳香族金属化合物を化学量論量用いるクロスカップリング法（日本発、2010年ノーベル化学賞）が主流の芳香環連結法だが、不要な副生物や共生物を生成・廃棄するばかりか合成全体として多段階である。本研究では、これに代わる理想的な芳香環連結法として、有機化合物に最も豊富に存在する炭素-水素（C-H）結合の触媒的直接変換を追求する。究極の原料を直接的に有用物質へと変換できる C-H 結合変換法は、サイエンスとテクノロジーの両面から合成化学の水準と可能性を飛躍的に高め、グリーンケミストリーの実現に必要な鍵技術として広く認識されている。

本研究では、C-H 結合変換、生物活性物質、ナノチューブを中核的課題（注）とし、これらの密接な連携と相乗効果によって芳香環連結化学のブレークスルーを生み出す。

（注）研究が当初の構想の枠を超えて発展したため、上記の3課題から以下の4課題とした。

(1) C-Hカップリング、(2) シンセティック生命分子、(3) π マテリアル、(4) ナノカーボン

【総合評価】	
○	特に優れた成果が得られている
	優れた成果が得られている
	一定の成果が得られている
	十分な成果が得られていない

【所見】
<p>① 総合所見</p> <p>当初の研究計画として掲げられた3つの課題(C-Hカップリング、生物活性物質の合成、ナノカーボン)のそれぞれについて、大きな研究成果を得た。所期の目的は全て達成された。さらに得られた成果を発展させる形で、当初計画にはなかったπマテリアル分子の創製という新たな課題にも取り組んだ。</p> <p>1次元ナノカーボンであるカーボンナノチューブに加えてグラフェン(2次元ナノカーボン)やワープド・グラフェン(3次元湾曲ナノカーボン)の精密ボトムアップ合成にも研究の幅が広がり、研究開始当初の予想をはるかに超える研究成果が得られた。新しい反応や物質を次々に発見し、新たな出発点とした新しい科学の可能性についても模索している。</p> <p>研究代表者が開発したC-Hカップリング反応は、様々な芳香環の連結に応用することができ、しかも1段階で合成が可能であることから、合成化学分野における基礎反応となるだけでなく、その応用として生物活性物質の迅速合成や新たなπマテリアルの創製にもつながるものであり、これらの研究分野の進展に大きく貢献するであろう。また、カーボンナノリングからボトムアップ式に構造制御されたカーボンナノチューブの合成に成功したこと、新規なナノカーボン物質の創製に至ったことは、燃料電池やディスプレイなどの材料科学の分野においても、大きな貢献が見込まれる。社会的、経済的な課題の解決にも貢献するであろう。</p> <p>本研究で焦点を当てている芳香環連結化合物は、持続可能な高度文明社会の実現に必要な不可欠な物質群である。現代社会を支える芳香環連結化合物群は多く、特にエネルギー・医療関連分野におけるかけがえのない物質群と言っても過言ではない。未来社会においても芳香環連結化合物群の地位は揺るぎようがない。</p> <p>従来法でアクセスできなかった芳香環連結化合物の創製は、グリーンケミストリーとは別の次元で物質科学研究に非線形の大展開をもたらす。例えば、本研究の目標である「純正カーボンナノチューブ」は、世界中の科学者がその出現を待ちこがれている物質である。これまでカーボンナノチューブの合成には物理的手法が用いられてきたが、これらの手法によって合成されるカーボンナノチューブは、様々な直径、長さ、分子量をもつ混合物である。直径と長さが明確に定まった「分子式として表せる」カーボンナノチューブは科学者がまだ手にしていないものである。本研究で合成しつつある「純正カーボンナノチューブ」は、カーボンナノチューブの分子科学的な研究の発展・深化に不可欠なものであり、分野全体に大きなブレークスルーをもたらす。持続的社會に繋がり得る多彩な機能が約束された「芳香環連結化学」のブレークスルーは、物質科学研究と社会全体に多大な波及効果をもたらす。</p> <p>ビフェニル誘導体、ヘテロビアリール、オリゴチオフェンなどの芳香環連結化合物</p>

は、液晶、有機トランジスタ、有機 EL デバイスの基盤物質として揺るぎない地位を築いているが、デバイスの高効率（省エネ）化には、新たな芳香環連結化合物の開発が必要であり、現在世界中で精力的に研究が行われている。芳香環連結化合物の究極の一形態であるカーボンナノチューブは燃料電池、ディスプレイ、半導体、超高度材料など無限の可能性を秘めた次世代マテリアルとして極めて大きな期待が注がれている。グリーン・イノベーションになくてはならない物質群である。

環境低負荷型の理想的方法によって、芳香環連結化合物群の従来型多段階合成が一新されるだろう。また、本研究を通じて C-H 結合直接変換（C-H カップリング）のもつ本質的意義が合成化学全体に浸透し、グリーンケミストリーの進展にも貢献すると期待される。

全体的に見て、極めて適切なマネジメントの下で、研究目的は達成された。本研究課題の遂行には、合成化学、触媒化学、材料科学を統合させなければならないが、研究室のスタッフに加え、分野の異なる研究者を参加させることで、バランスの良い研究体制が敷かれた。助成金の多くは研究遂行のための物品費に充てられており、有効に利活用された。指摘事項に関する対応も十分であった。

超一流の学会誌に多数の論文を発表した。その卓越した結果は研究代表者に最近与えられた多くの賞に反映している。特許出願に関して言えば、一連の「分子ナノカーボン」に関する研究成果は、逐次の特許出願による適切な知的財産権確保が成されている。ナノカーボン技術関連の一連の特許出願は（独）科学技術振興機構「特許群支援」平成 24 年度採択課題となっており、材料合成から応用展開に至る一連の研究は、これまでの成果および今後の展開を含めて、極めて高く評価されている。また、名古屋大学の研究支援組織から知的財産の保護・活用に対しても絶大なサポートを受けている。

学内のオープンキャンパスやホームカミングディなどに加え、日本学術会議のサイエンスカフェ、学会支部講演会、高校、予備校でも講演会等を行って、国民との対話に努め、かつ効果的に実施した。

② 目的の達成状況

・ 所期の目的が

（ 全て達成された ・ 一部達成された ・ 達成されなかった）

当初の研究計画として掲げられた 3 つの課題（C-H カップリング、生物活性物質の合成、ナノカーボン）のそれぞれについて、十分な研究成果を得た。所期の目的は全て達成された。

さらに得られた成果を発展させる形で、当初計画にはなかった π マテリアル分子の創製という新たな課題にも取り組んだ。

1 次元ナノカーボンであるカーボンナノチューブに加えてグラフェン（2 次元ナノカーボン）やワープド・グラフェン（3 次元湾曲ナノカーボン）の精密ボトムアップ合成にも研究の幅が広がり、研究開始当初の予想をはるかに超える研究成果が得られた。

新しい反応や物質を次々に発見し、新たな出発点とした新しい科学の可能性についても模索している。

③ 研究の成果

・これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が
(ある ・ ない)

・ブレークスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が
(創出された ・ 創出されなかった)

・当初の目的の他に得られた成果が (ある ・ ない)

・本研究で得られた研究成果の先進性・革新性・優位性がある。
開発した新触媒や新反応は、クロスカップリングに取って代わる分子連結法として、世界中の化学・製薬企業の研究開発現場で用いられるようになった。

・本研究で得られた研究成果で特筆すべきものがある。
本研究では、新概念触媒による芳香環連結分子の革新的な合成手法（特に C-H カップリング）を開発するのみならず、数々の医薬関連分子、生物活性天然物、光電子機能性材料、新規ナノカーボン類の創製に成功し、芳香環連結分子の合成化学と応用研究に大きなブレークスルーをもたらした。

・当初の目的の他に得られた成果がある
究極の芳香環連結分子といえるカーボンナノチューブの最短部分構造（カーボンナノリング）の精密合成やこれをテンプレートに用いたカーボンナノチューブの直径制御ボトムアップ合成に世界で初めて成功するなど、ナノカーボン科学の新潮流をつくった。

④ 研究成果の効果

・研究成果は、関連する研究分野への波及効果が
(見込まれる ・ 見込まれない)

・社会的・経済的な課題の解決への波及効果が
(見込まれる ・ 見込まれない)

・本研究の成果は、関連する研究分野の進展に寄与が見込まれる。
研究代表者が開発した C-H カップリング反応は、様々な芳香環の連結に応用することができ、しかも 1 段階で合成が可能であることから、合成化学分野における基礎反応となるだけでなく、その応用として生物活性物質の迅速合成や新たな π マテリアルの創製にもつながるものであり、これらの研究分野の進展に大きく貢献するであろう。また、カーボンナノリングからボトムアップ式に構造制御されたカーボンナノチューブの合成に成功したこと、新規なナノカーボン物質の創製に至ったことは、燃料電池やディスプレイなどの材料科学の分野においても、大きな貢献が見込まれる。社会的、経済的な課題の解決にも貢献するであろう。

本研究で焦点を当てている芳香環連結化合物は、持続可能な高度文明社会の実現に必要な不可欠な物質群である。現代社会を支える芳香環連結化合物群はあまりにも多く、特にエネルギー・医療関連分野におけるかけがえのない物質群と言っても過言ではない。未来社会においても芳香環連結化合物群の地位は揺るぎようがない。

従来法でアクセスできなかった芳香環連結化合物の創製は、グリーンケミストリーとは別の次元で物質科学研究に非線形の大展開をもたらす。例えば、本研究の目標である「純正カーボンナノチューブ」は、世界中の科学者がその出現を待ちこがれてい

る物質である。これまでカーボンナノチューブの合成には物理的手法が用いられてきたが、これらの手法によって合成されるカーボンナノチューブは、様々な直径、長さ、分子量をもつ混合物である。直径と長さが明確に定まった「分子式として表せる」カーボンナノチューブは科学者がまだ手にしていないものである。本研究で合成しつつある「純正カーボンナノチューブ」は、カーボンナノチューブの分子科学的な研究の発展・深化に不可欠なものであり、分野全体に大きなブレークスルーをもたらすのは間違いない。

持続的社會に繋がり得る多彩な機能が約束された「芳香環連結化学」のブレークスルーは、物質科学研究と社會全体に多大な波及効果をもたらすことは必定である。

- ・ 本研究の成果は、グリーン・イノベーションへの貢献が見込まれる。

ビフェニル誘導体、ヘテロビアール、オリゴチオフェンなどの芳香環連結化合物は、液晶、有機トランジスタ、有機 EL デバイスの基盤物質として揺るぎない地位を築いているが、デバイスの高効率（省エネ）化には、新たな芳香環連結化合物の開発が必要であり、現在世界中で精力的に研究が行われている。芳香環連結化合物の究極の一形態であるカーボンナノチューブは燃料電池、ディスプレイ、半導体、超高度材料など無限の可能性を秘めた次世代マテリアルとして極めて大きな期待が注がれている。グリーン・イノベーションになくてはならない物質群であるのは論をまたない。

環境低負荷型の理想的方法によって芳香環連結化合物群の従来型多段階合成が一新されるだろう。また、本研究を通じて C-H 結合直接変換（C-H カップリング）のもつ本質的意義が合成化学全体に浸透し、グリーンケミストリーの進展にも貢献すると期待される。

⑤ 研究実施マネジメントの状況

- ・ 適切なマネジメントが（行われた ・ 行われなかった）

- ・ 研究目的達成に向けての研究計画の適切性、研究実施体制の適切性、マネジメントの適切性は高い。助成金の有効な利活用、指摘事項への対応状況は適切であった。

全体的に見て、極めて適切なマネジメントの下で、研究目的は達成された。本研究課題の遂行には、合成化学、触媒化学、材料科学を統合させなければならないが、研究室のスタッフに加え、分野の異なる研究者を参加させることで、バランスの良い研究体制が敷かれた。助成金の多くは研究遂行のための物品費に充てられており、有効に利活用された。指摘事項に関する対応も十分であった。

- ・ 論文発表、会議発表、知的財産権の出願・取得状況、その他への研究成果の積極的な公表や発信が適切に行われた。

超一流の学会誌に多数の論文を発表した。その卓越した結果は研究代表者に最近与えられた多くの賞に反映している。特許出願に関して言えば、一連の「分子ナノカーボン」に関する研究成果は、逐次の特許出願による適切な知的財産権確保が成されている。ナノカーボン技術関連の一連の特許出願は（独）科学技術振興機構「特許群支援」平成 24 年度採択課題となっており、材料合成から応用展開に至る一連の研究は、これまでの成果および今後の展開を含めて、極めて高く評価されている。また、名古屋大学の研究支援組織から知的財産の保護・活用に対しても絶大なサポートを受けている。

- ・ 国民との科学技術対話が適切に実施された。

学内のオープンキャンパスやホームカミングディなどに加え、日本学術会議のサイエンスカフェ、学会支部講演会、高校、予備校でも講演会等を行って、国民との対話に努め、効果的に実施した。

以下に実施されたものを列挙する。

- (1) 「分子をつなげて価値を生む合成化学：ナノの世界の建築家」 日本化学会東海支部主催 “化学への招待 – すぐれもの有機材料 –”、名古屋大学野依記念物質科学研究館、名古屋、2011年11月5日。
- (2) 「分子をつなげて価値を生む合成化学」 名大の授業 IN 河合塾、河合塾千種校、2012年7月15日。
- (3) 「名古屋の化学」 オープンキャンパス、名古屋大学、2012年8月10日。
- (4) 「名古屋の化学」 ホームカミングディ、名古屋大学、2012年10月20日。
- (5) 「ますます発展・進化するメイダイリバケ」、第7回名古屋大学理学部化学教室同窓会、名古屋大学、2013年4月6日。
- (6) 「分子をつなげて価値を生む合成化学」、SSH 特別講演会、一宮高校、2013年7月4日。