

平成29－33年度 新学術領域研究(研究領域提案型)
2017年9月14日 キックオフシンポジウム

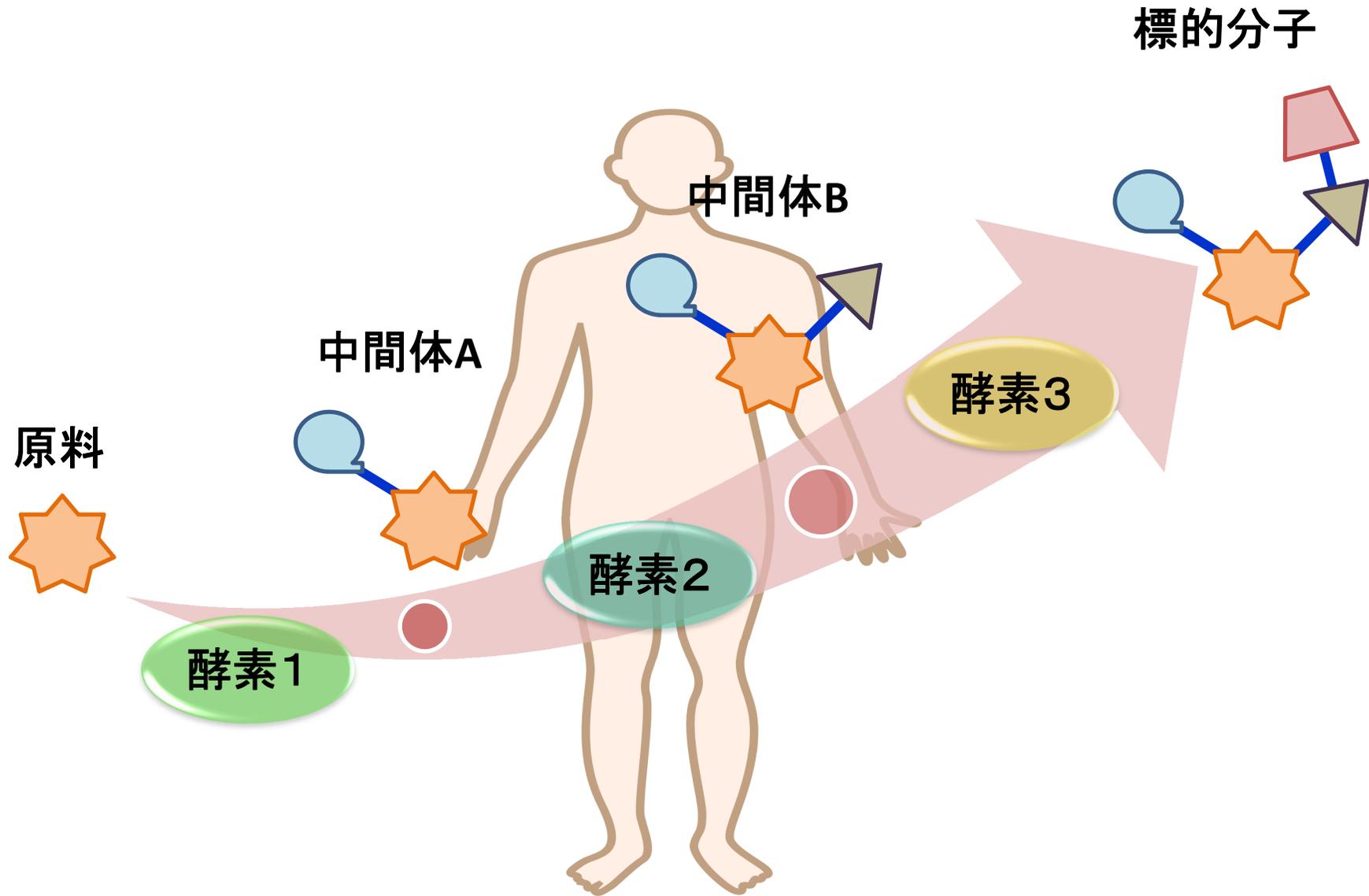
分子合成オンデマンドを実現する ハイブリッド触媒系の創製 (ハイブリッド触媒)

領域代表者
東京大学・大学院薬学系研究科
金井 求

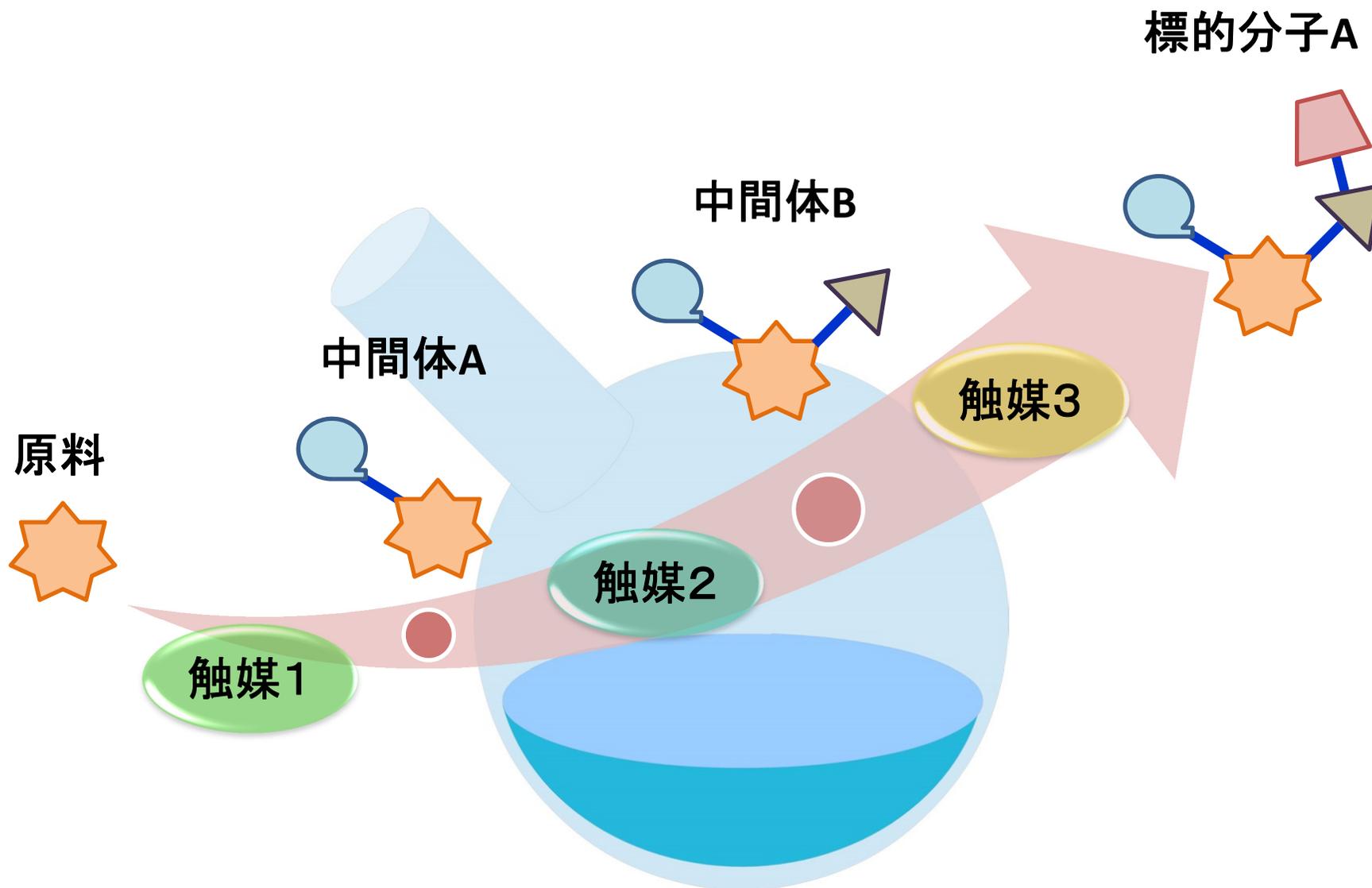
本領域提案の主旨



本領域提案の主旨

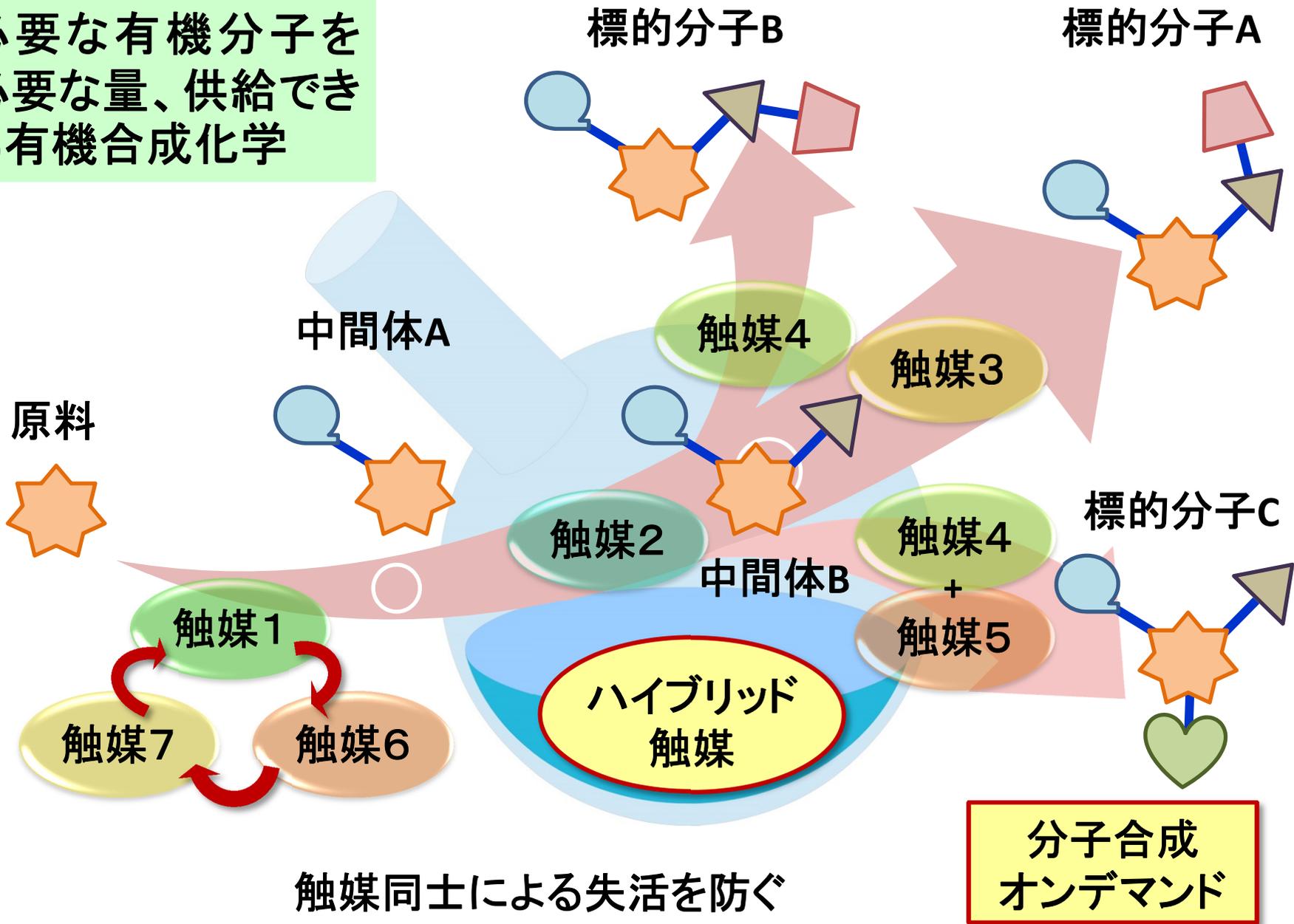


本領域提案の主旨



本領域提案の主旨

必要な有機分子を
必要な量、供給でき
る有機合成化学



本領域提案の主旨

必要な有機分子を
必要な量、供給できる
有機合成化学

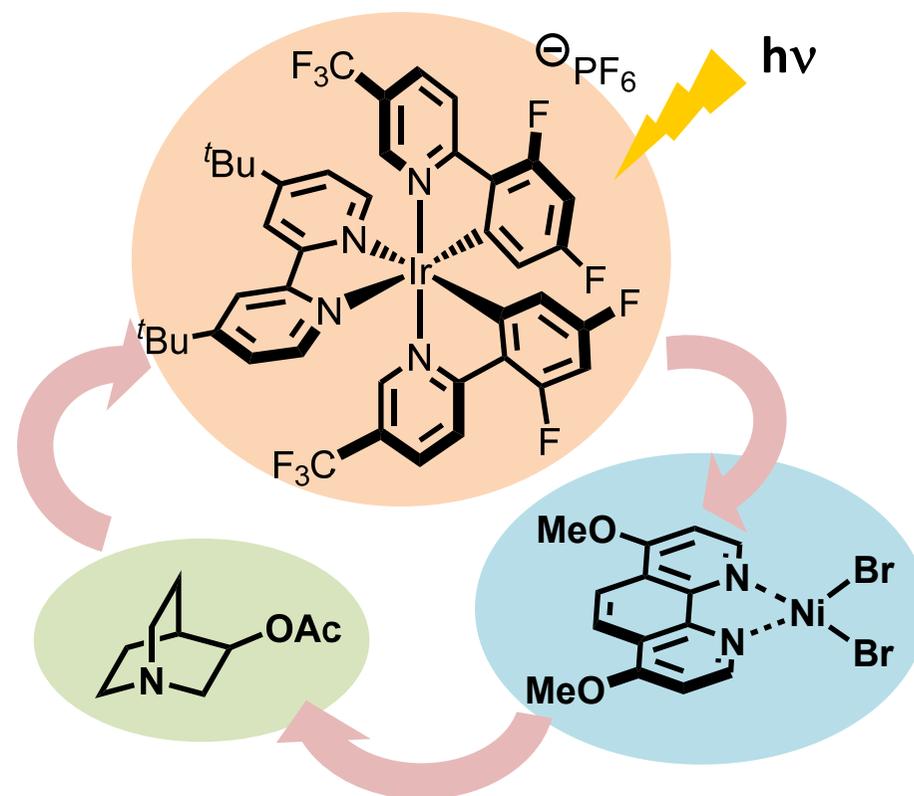
標的分子B

標的分子A

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、極めて効率の高い有機合成反応を開発する。

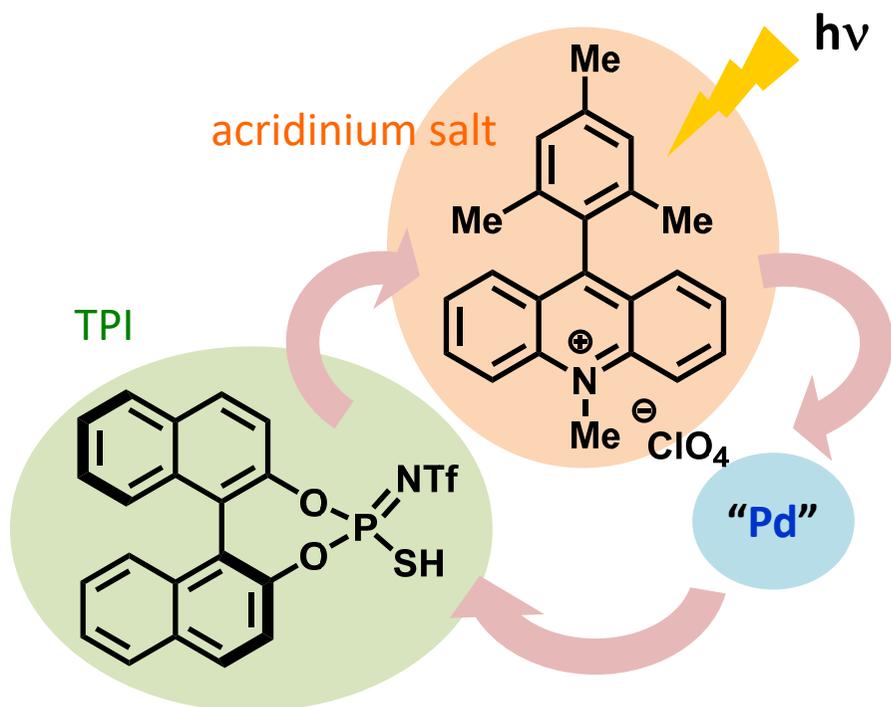
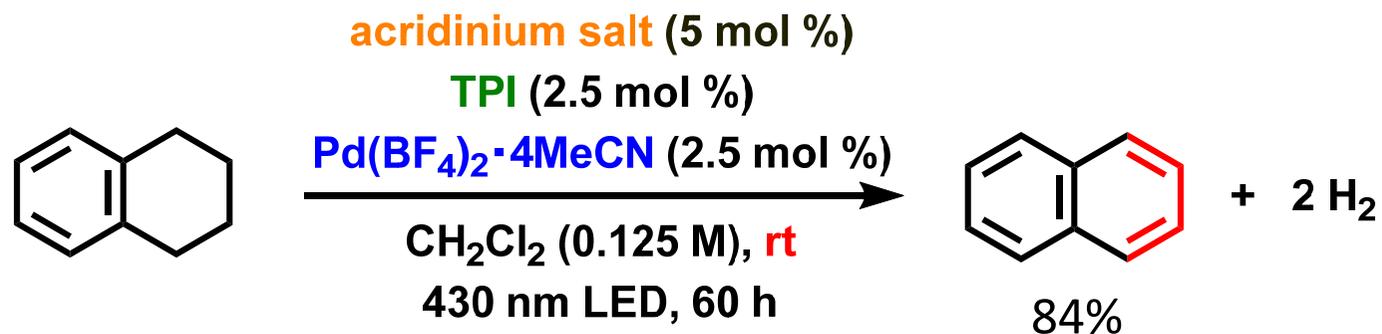


例1 : MacMillanのTriple Catalysis



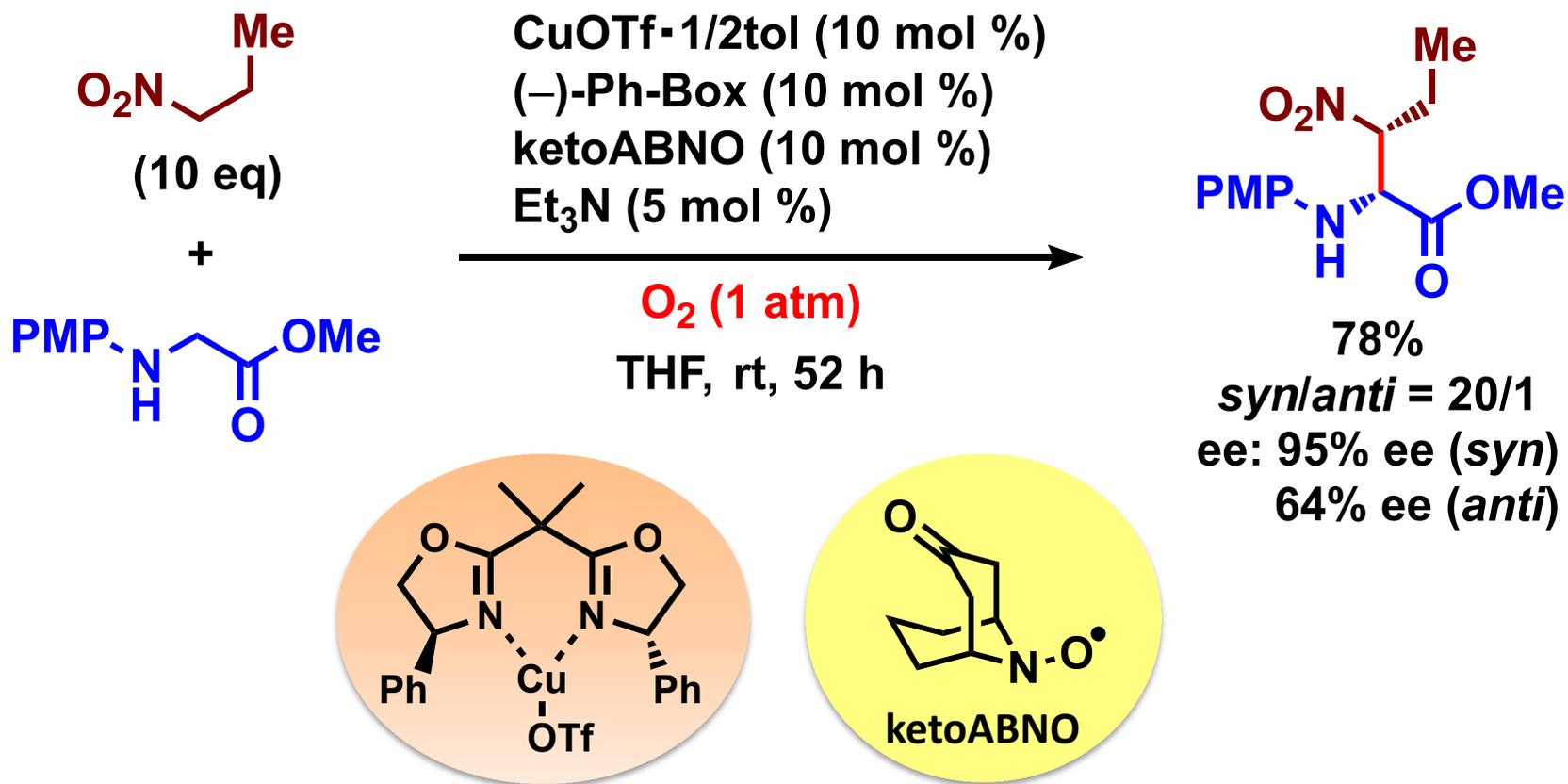
MacMillan & coworkers, *Science* **2016**, 352, 1304.

例2: 炭化水素からの室温での脱水素



- 不飽和化(合成的有用性)
- 水素貯蔵(エネルギー)

例3: 酸素を駆動源とする触媒的不斉アミノ酸変換

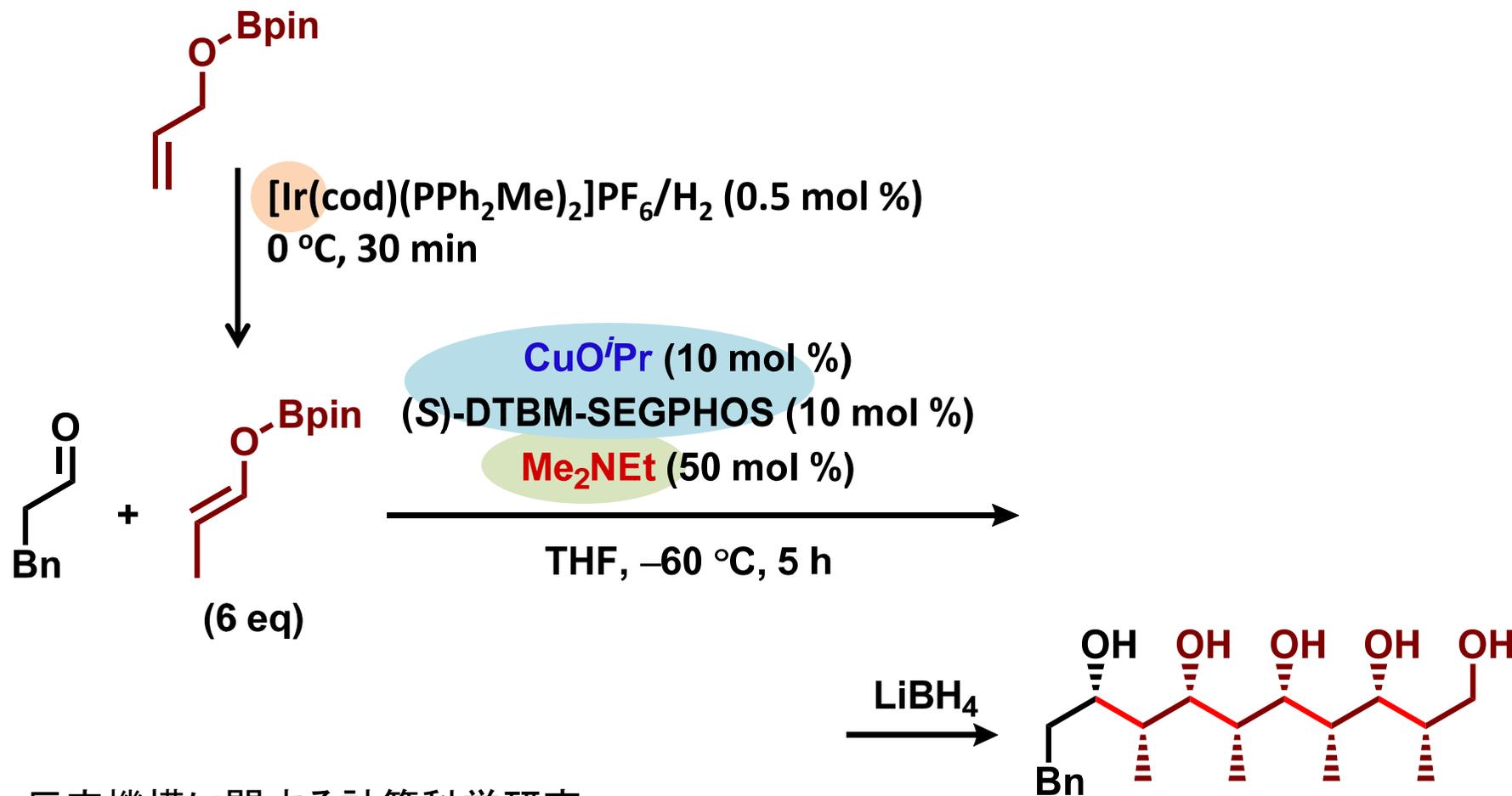


Sonobe, Oisaki, Kanai, *Chem. Sci.* **2012**, 3, 3249.

Ref. Coincidental report on the same topic: Wang, R. *JACS* **2012**, 134, 12334.

Cu-catalyzed asymmetric aza-Henry reaction: Jørgensen, K. A. *JACS* **2001**, 123, 5943.

例4: 触媒的不斉ドミノアルドール反応



反応機構に関する計算科学研究
Kanzaki, Hatanaka, Kanai, *ongoing*.

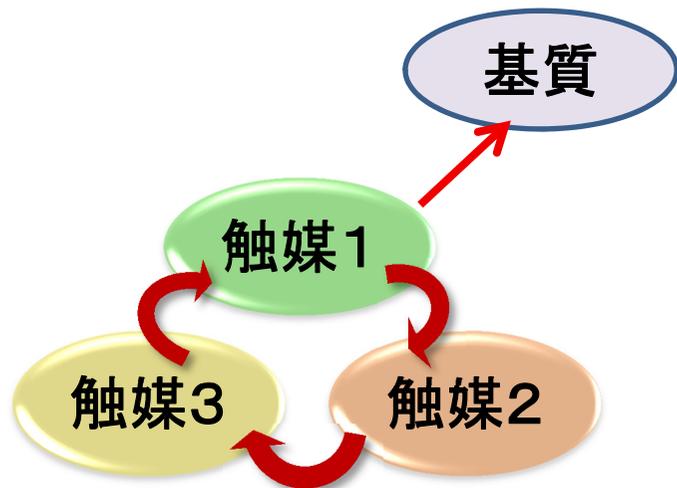
LiBH₄

54%
s:d:t:q:quin:6+7+8 = 4:2:18:54:10:10
dr = 95/5, >99% ee

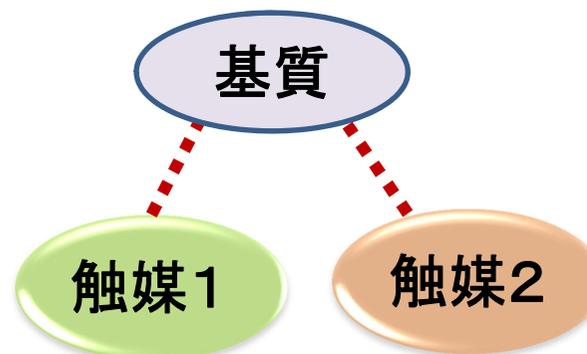
Lin, Yamamoto, Mitsunuma, Kanzaki, Matsunaga, Kanai, *JACS*, **2015**, *137*, 15418.

ハイブリッド触媒の分類

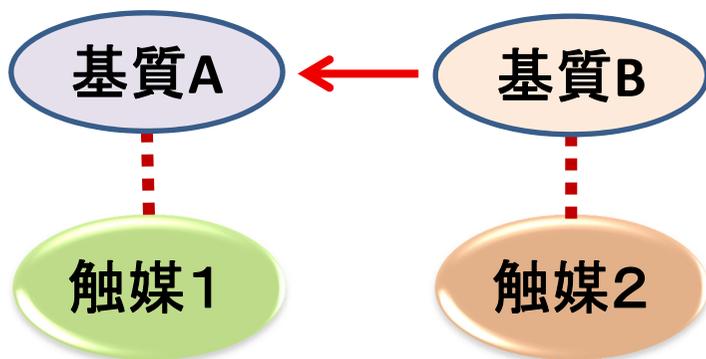
1. 触媒同士が互いを活性化



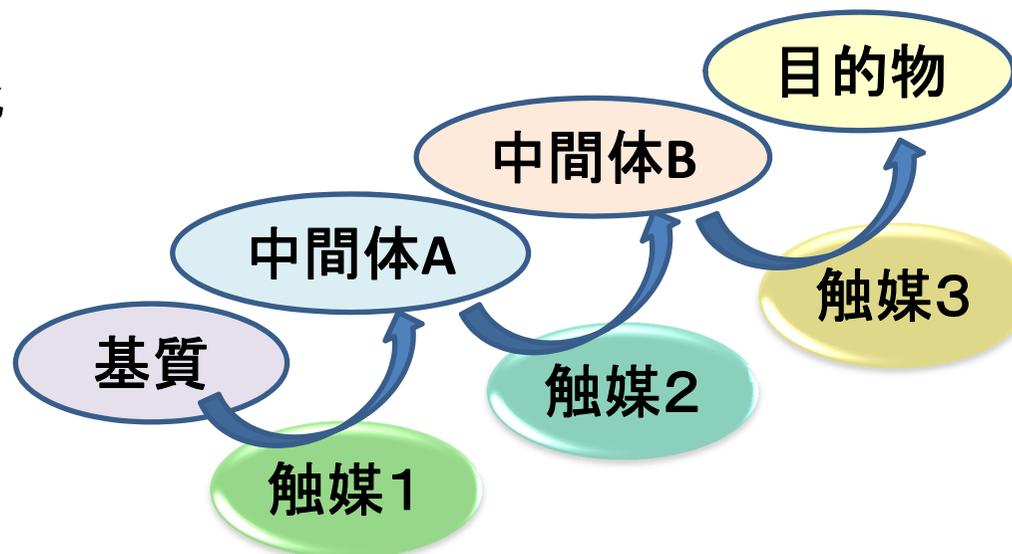
2. 複数の触媒で基質を活性化



3. それぞれの基質を独立に活性化

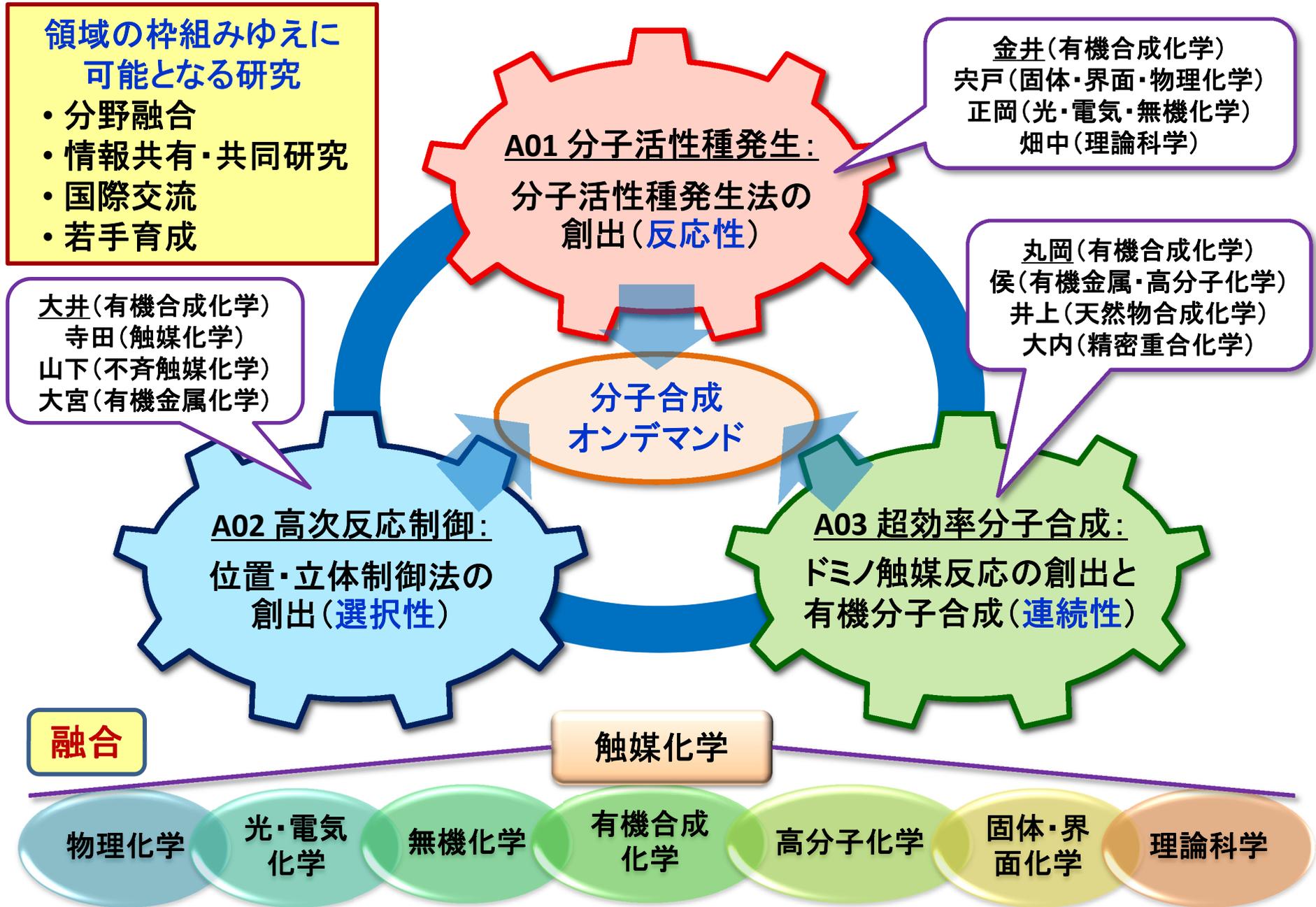


4. 中間体を介して連続反応を促進



これらに限られる必要は全くない。

「ハイブリッド触媒」の組織図



計画班員

A01

金井 求 (東京大学 大学院薬学系研究科・教授)「ラジカルー金属錯体ハイブリッド触媒系によるアルカンからの有機金属活性種発生」

宍戸 哲也(首都大学東京 都市環境科学研究科・教授)「合金クラスター無機固体ハイブリッド触媒系による高選択的分子変換」

正岡 重行(分子科学研究所 生命・錯体分子科学研究領域・准教授)「光化学的刺激／電気化学的刺激による金属錯体触媒のオンデマンド活性化」

畑中 美穂(奈良先端科学技術大学院大学 研究推進機構研究推進部門・特任准教授)「自動反応経路探索を用いるハイブリッド触媒系の機構解明と反応性決定因子の抽出」

A02

大井 貴史(名古屋大学 工学研究科(WPI-ITbM)・教授)「ハイブリッド触媒系による立体分岐型不斉合成」

寺田 眞浩(東北大学 理学研究科・教授)「金属錯体／キラルブレンステッド酸」ハイブリッド触媒による効率的物質変換系の開拓」

山下 恭弘(東京大学 大学院理学系研究科・准教授)「強塩基ハイブリッド触媒系の開発及び高立体選択的分子骨格構築反応への展開」

大宮 寛久(金沢大学 医薬保健研究域薬学系・教授)「有機触媒と金属触媒のハイブリッドに基づく高次反応制御法の開発」

A03

丸岡 啓二(京都大学 理学研究科・教授)「高性能ハイブリッド触媒系を活用する高選択的ドミノ反応の開発」

侯 召民 (理化学研究所 侯有機金属化学研究室・主任研究員)「精密有機合成と重合を融合したドミノ触媒系の開発」

井上 将行(東京大学 大学院薬学系研究科・教授)「ハイブリッド触媒系による多成分連結型連続反応の開発と全合成への展開」

大内 誠 (京都大学 工学研究科・教授)「ハイブリッド触媒による高分子配列科学の新展開」

公募概要・採択方針

本領域があるからこそ可能となる、独創的で革新的な触媒系の創製、を目指す提案を歓迎

要素技術の提案であっても、領域内の共同研究によって革新的なハイブリッド触媒系に発展する可能性が明示されていれば、選考の対象

触媒化学分野からの提案に加えて、例えば、

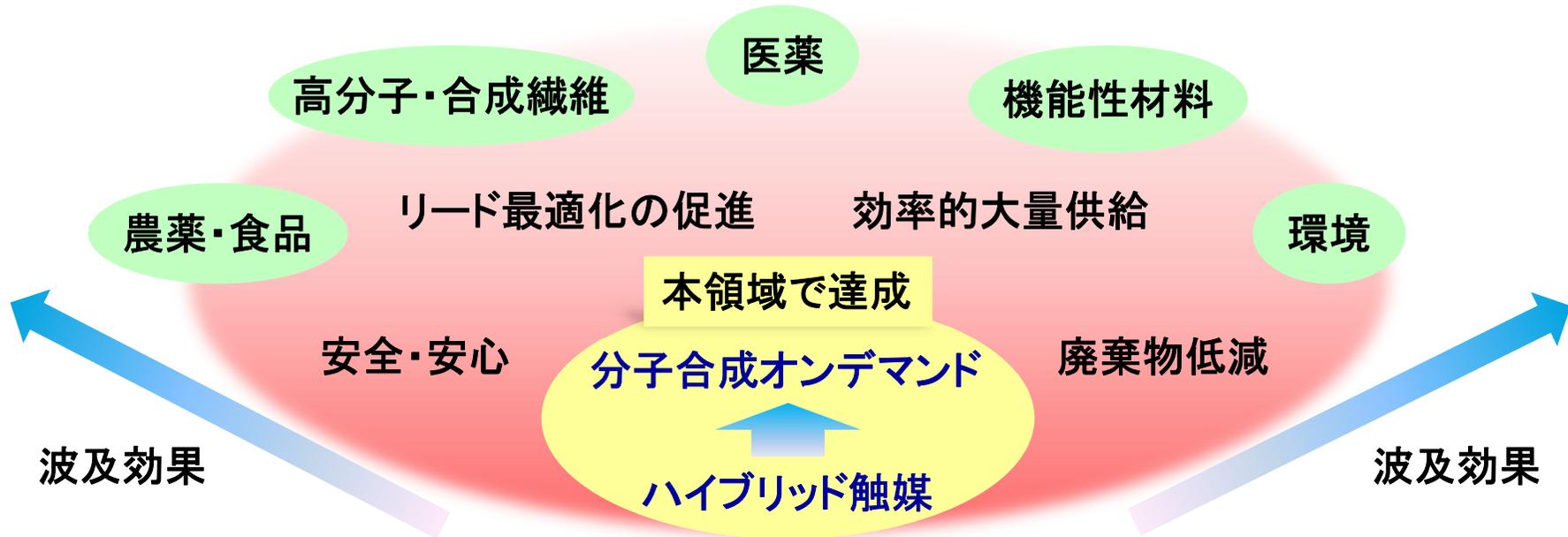
- 化学結合の活性化に関連する物理から化学に至る基礎分野、
- 反応機構の情報を与える分析化学や錯体化学の分野、
- 触媒反応開発を基盤として複雑な有機分子の合成を単純化する有機合成化学分野、

などからの本質的で挑戦的な提案を期待

期待される成果

応用

1. 利用できる有機分子の多様性と複雑性の限界を克服
2. 付加価値の高い有機分子を必要とする多分野に波及



基礎

1. ハイブリッド触媒の概念・学理
2. 実用性と多様性を兼ね備えた分子合成オンデマンド

触媒化学・有機合成化学を先導する新たな学術領域

領域代表者、A01班長からのメッセージ

分野を一步前に進めるべく、独創的、革新的、本質的、挑戦的な触媒化学を、領域を挙げて創って行きたいと考えています。

公募研究として、私には考えも及ばない新奇な切り口と世界をリードする気概に溢れた、分野融合提案を特に期待しています。

東大薬・金井 求

A02班長からのメッセージ

本領域の枠組みを活かして、狙った分子だけを思い通りに組み上げるための力強い触媒化学を生み出したいと考えています。

公募研究として、触媒化学における分野の境界を軽々と越えて、全く新しい反応制御概念の創出を目指す提案を期待しています。

名大ITbM・院工・大井 貴史

A03班長からのメッセージ

ハイブリッド触媒系を活用し、生体酵素反応を凌駕する新規ドミノ反応を創出し、超効率分子合成を実現したいと考えています。

公募研究として、分野横断型の斬新な発想に基づく新規ドミノ触媒系、ドミノ反応系の構築に関する提案を期待しています。

京大院理・丸岡 啓二