

## 中長期テーマ「次世代錯体化学のイノベーション」

熊本大学大学院先端科学研究部 速水真也

### 企画趣旨

錯体化学は、金属イオンや金属原子あるいは金属ナノ粒子と有機配位子を巧みに組み合わせることにより、無限の可能性を秘めていると言われており、単核錯体から多核錯体さらには配位高分子まで様々な物質群が見出されている中で、基礎物性から応用的機能性まで考えると、今でもなおその役割を引き出せているのはごく一部である。金属錯体は、金属イオンや有機配位子の特性から、自然界の模倣や量子物性、色調や吸着などに至るまで広範囲にわたり機能性を引き出すことができるため重要な物質群の一つであり、次世代錯体化学の時代に突入しようとしている。すなわち融合分野の始まりであり、今後の錯体化学の発展やビジョンを考える時代に突入した。本中長期テーマにおいては、異分野融合を視野に入れ、錯体化学分野のこれまでの潮流を見直し、新たに次世代錯体化学の潮流を創造するために、異分野からの講演も積極的に引き入れて学術的討論を行ってきた。

### 第 99 春期年会（2019 年）分子エレクトロニクスと分子スピントロニクスの最前線

20 世紀の終盤から、有機分子を用いた分子エレクトロニクスの研究として有機トランジスターや有機 EL などの研究が行われ、21 世紀に入り、電子の電荷とスピンの自由度に基づいて、分子スピントロニクスに関する研究が盛んに行われるようになった。本企画では分子エレクトロニクスと分子スピントロニクスの最前線の講演を行った。

有機半導体分子の現在・過去・未来 瀧宮 和男（理研 CEMS・東北大院理）

有機半導体の電荷とスピン 竹谷 純一（東大院新領域）

一次元・二次元錯体と分子エレクトロニクス 西原 寛（東大院理）

単分子接合のキャリア・スピン・熱輸送 多田 博一（阪大院基礎工）

単分子磁石を用いた量子分子スピントロニクス：近藤効果・単分子メモリー・スピンキュービット・Rabi Nutation 山下 正廣（東北大 WPI-AIMR）

### 第 100、101 春期年会（2020 年、2021 年）ナノシート：2 次元構造を有する金属錯体の科学、トランス次元材料が織りなす未来

ナノシートは、ナノサイズの厚みで高い異方性を持つ 2 次元物質であり、その構造的特性に加えて、溶液中では分散すること、量子サイズ効果を示すという特性がある。本企画では有機物から金属酸化物など幅広いナノシートの物質群にける特異的物性の知見を得て、金属錯体ナノシート特有の物性に関する議論を行った。

酸化グラフェンハイブリッドの機能創発 速水 真也（熊本大院先端科学）

原子層ヘテロ構造の光電子デバイス 江田 剛輝（シンガポール国立大）

二次元ヘテロ構造の創出と物性探索 北浦 良 (名大院理)

2次元酸化物が拓くポストグラフェン技術 長田 実 (名大 IMaSS・物材機構 MANA)

多孔性金属錯体ナノシートの気液界面合成：モルフォロジー制御と機能創出 牧浦 理恵 (阪府大院工)

グラフェンナノリボンのボトムアップ合成：前駆体設計と構造制御 成田 明光 (マックス・プランク高分子研・沖縄科技大)

#### 第 102 春期年会 (2022 年) 分子から創る Spin Qubits の最前線

量子コンピューターの bits (=Qubits) は、飛躍的な超高速や巨大容量の計算が可能となると期待されている。これまでに Qubits の候補として超伝導、ダイヤモンド、光などが用いられていたが、近年、分子スピンを用いた Molecular Spin Qubits が世界的に盛んに研究をされるようになってきた。本シンポジウムでは、分子のスピンを用いた Molecular Spin Qubits 研究について議論を行った。

金属錯体磁性体を用いた分子スピンキュービットの新展開 山下 正廣 (東北大)

分子スピン量子ビットの状態制御とパルス ESR テクノロジー 佐藤 和信 (阪市大)

単分子磁石と超伝導電極の組み合わせによる分子スピンのキュービット応用 米田 忠弘 (東北大)

局在スピンを有するグラフェンナノリボンの精密合成 成田 明光 (沖縄科技大、マックス・プランク高分子研)

ダイヤモンド NV 中心の量子状態制御 水落 憲和 (京都大)

#### 第 103 春期年会 (2023 年) インフォマティクスが拓く化学の新天地

化学研究はインフォマティクスによってどのように変わっていくのか、世界中で盛んに議論されている中で、まだ手探りの状況である。本企画では、化学の研究において、インフォマティクスがどのような役割を果たしていくのかを示すことを目的とし議論を行った。

機械学習を活用した新規 MOF の合成研究 田中 大輔 (関西学院大)

計算化学と機械学習を駆使した機能性材料の理解と設計 畑中 美穂 (慶應大)

機械学習手法を活用した全固体リチウム電池材料開発の実際 鈴木 耕太 (東工大)

高速スクリーニングと機械学習による非鉛ペロブスカイト太陽電池材料の探索 佐伯 昭紀 (大阪大)

#### 将来の予測と可能性

錯体化学は、まさに次世代に突入する転換期を迎えている。異分野でも金属錯体を扱ったり、錯体分野も異分野へと裾野を広げている。現在でも錯体化学の可能性は未知数であり、今後の錯体化学としての存在意義は増すばかりである。従来までの金属錯体の学問体系に捉われることなく、異分野融合や新たなトレンドを引き起こし、現在社会が直面しているカーボ

ンニュートラル、SDGs さらには Well-Being に貢献していくと考えている。

#### まとめ

本企画において、次世代錯体化学のイノベーションを起こすべく、学問分野に捉われることなく、異分野融合、裾野の拡大を指向して幅広く議論を行ってきた。科学分野における物質群としての金属錯体は、それらの観点から無限の可能性を秘めており、錯体化学の重要性は増すばかりである。