

中長期テーマ「次世代錯体化学のイノベーション」

山下正廣

東北大学材料科学高等研究所 WPI-AIMR)・教授

企画趣旨

ケミカルアブストラクトによると現在までに、化合物は1億4400万個以上が登録されている。そのうちの約20%が金属錯体と思われ、大変重要な位置を占めている。金属錯体は電子状態の多様な金属イオンと構造の多様な有機配位子から構成されていることから、それらの組み合わせを考えると非常に多彩な基礎物性から機能性までが考えられる。そのために自然界の鉱物や生体内の金属蛋白から、色素やITのデバイスなどまで非常に幅広く見出すことが出来ることから、非常に重要な役割を果たしていることは明白である。

本中長期テーマにおいては、上に述べたような金属錯体の重要性を再検証すると同時に、今後の将来展望などについて各回、様々なテーマを設定して講演と議論を通じて、明確にすることを目的に企画を行った。

各中長期テーマ企画のシンポジウム概要要約

・第89春季年会：革新的ハイブリッド物性を実現するナノ物質科学

太陽電池、有機エレクトロルミネッセンス素子など、現在の先端機能デバイス開発では金属錯体が重要な役割を演じている。更なる高機能デバイスの創出とそれを支える基礎科学の展開には、金属錯体の科学の飛躍的発展が不可欠である。本シンポジウムでは、錯体化学を基盤とする有機無機複合材料の創製と機能探索を「革新的ハイブリッド物性を実現するナノ物質科学」という新しい学問分野と位置づける。分子レベルでの異種物質の複合化により、従来にない量子効果や非線形応答、あるいは磁性、伝導性、光物性、誘電性、触媒作用などの物性・機能の競合・協奏が期待できる。本シンポジウムでは、形成されつつあるこの分野のフロント・ランナーによる講演を通じて、研究展開の現状と将来展望をベテランおよび若い研究者とともに活発に議論した。

・第90春季年会：超分子金属錯体—超分子構造から機能への展開—

自然界に存在する物質（生体分子や鉱物など）や我々化学者が創出する化学物質の中で、近年「超分子」が極めて大きな役割を果たしていることは万人の認めるところである。超分子研究の歴史は古いが最近、特に生体分子をモチーフとして革新的な機能創出を目指す試みや、ナノサイエンス・ナノテクノロジーの次世代技術のシーズとなる新規ボトムアップ型創製法の確立など、合成研究での進展が著しい。超分子の中でも、特に金属イオンを含む「超分子金属錯体」は、配位結合を始めとする結合様式の多様性のために構造的自由度が高く、

より高度な超構造を構築できる最も有望な超分子材料である。この超分子材料では、金属イオンに由来する多彩な電子状態のために荷電状態やスピン状態、構造変化を自由に制御でき、電場、光、電気伝導、化学刺激などによる外的因子を駆使した新たな分子機能創出と自在制御が期待される。現在我が国の創造性豊かな研究グループが世界的に注目を集める新規超分子金属錯体を次々と開発していることから、本シンポジウムではこの最もホットな「超分子金属錯体」研究で世界をリードする研究者を招聘し、最新の研究成果とその意義を講演していただいた。

・第91回春季大会：生物無機化学の最前線—生態関連化学の新たな挑戦に向けて—

生体金属イオンは、それらを取りまく生体高分子が構築する配位環境によって多様な機能を発現する。呼吸、代謝、光合成、神経・生体信号伝達・遺伝情報伝達、窒素固定等の生物界において決定的に重要なプロセスが、金属イオンとタンパク質や核酸との複合体によってはじめて可能になることはよく知られている。生物無機化学は、その黎明期には J. P. Collman のヘモグロビンモデルに代表されるような、比較的単純なタンパク機能を模倣する金属錯体小分子の設計や合成研究を主流としてスタートし、金属タンパクや生体金属の構造と反応性の解明を中心課題として、著しい進展を成し遂げた。近年では酸素添加酵素をはじめとする金属酵素が関与する複雑な反応機構が解明され、またそれらの機能モデル錯体の創成が行なわれ、更には生体金属の多様な機能発現機構解明さえ可能となり、生物無機化学は「成熟期」を迎えている。最近では、生体信号伝達機構・遺伝情報伝達機構解明などの複雑な生命現象理解に不可欠なツールの創製、光合成・メタンの酸化等を可能にする複合系金属タンパク集合体の解析や、それらのモデル作成などの新展開が見られている。これらの領域で、独創的研究を展開している我が国の研究グループは世界的に注目を集めている。本シンポジウムでは現在、ホットな生物無機化学研究で世界をリードする研究者を招聘し、最新の研究成果、その意義と将来への展望を講演し、議論をした。

・第92回春季年会：生物無機化学の新たな挑戦—生態関連化学の新展開に向けて—

呼吸、代謝、光合成、神経・生体信号伝達、遺伝情報伝達、窒素固定等の生物界において決定的に重要なプロセスは、生体金属イオンとタンパク質や核酸との複合体によってはじめて可能になることはよく知られている。比較的単純なタンパク機能を模倣する金属錯体小分子の設計や合成研究を主流としてスタートした生物無機化学は、金属タンパク質や生体金属イオンの構造と反応性の解明を中心課題として著しい進展を成し遂げた。近年ではX線結晶構造解析や分光法の進展に伴って、酸素添加酵素をはじめとする金属酵素が関与する複雑な反応機構が解明され、またそれらの機能モデル錯体の創成も進みつつある。更に長年の課題であった生体金属イオンの多様な機能発現機構解明さえ可能となり、生物無機化学は「成熟期」を迎えている。最近では生体信号伝達機構・遺伝情報伝達機構解明などの複雑な生命現象理解に不可欠なツールの創製、光合成・メタンの酸化等を可能にする複合系金属タンパク集合体の解析や、それらのモデル作成などの新展開が見られている。これらの領域で、独創的研究を展開している我が国の研究グループは世界的な注目を集めている。本シンポジウムでは、

ホットな生物無機化学研究で世界をリードする研究者を招聘し、最新の研究成果、その意義と将来への展望を講演し、議論した。

・第93回春季年会：配位プログラミングの化学—超構造体創製から化学素子への展開—

配位プログラミングは、化学結合を自由度高く可逆的に制御できる配位化学を利用して、金属原子や金属イオンを自在かつ精密に配置し、特異な物理・化学特性を有する機能階層的な超構造体を設計通りに組み上げる方法である。超構造体は単分子系からメゾスコピック系までも拡張可能であり、その内部で、酸化還元ポテンシャルやスピンなどの電子構造を分子／原子レベルで精密に配置・配列できるため、高精度の化学素子をデザインでき、ここ数年、様々な進歩をとげてきた。本シンポジウムでは、最先端の配位プログラミングの化学に焦点をあて、さらにその先に広がる新潮流の創成・展開に向けて討論をした。

・第94回春季年会：柔軟な構造・電子状態による高次機能創発

金属錯体は柔軟な構造や電子状態をとりやすい。本シンポジウムでは「金属錯体の自己組織化によるソフトマテリアルの構築と機能」、「配位シナジー骨格を利用した高分子材料創製」、「配位シナジーを生む高機能空間の創製」、「金属多核錯体における配位シナジー機能の探求」、「生体機能による協同的配位設計」、「ナノ金属-多孔性金属錯体複合物質の作製と相乗機能の探索」、「 π -金属カップリングによるシナジー機能の開拓」という講演を行い、議論した。

・第95回春季年会：小分子変換の最前線—金属錯体・半導体光触媒によるエネルギーイノベーション—

エネルギー貯蔵および小分子資源の有効活用の観点から、 CO_2 、 H_2O 、 H_2 などの無機小分子を低駆動力で活性化、変換できる新規触媒の開発が期待されている。本シンポジウムでは、金属錯体および半導体光触媒という2つの物質群に着目し、エネルギーイノベーションに向けオリジナルな視点で小分子変換反応に取り組んでいる気鋭の研究者に、触媒設計、反応設計に関するアイデアを中心に講演をし、議論した。

・第97回春季年会：動的表面・界面錯体化学の最前線—構造から機能への展開

表面や界面はバルク状態とは全く異なる構造や電子状態や機能性などを示すことが分かってきた。特に最近の測定手段の飛躍的な発展により、ナノレベルからメゾスコピックなレベルまでの構造や電子状態の解明が可能となり、新たな分野が形成されつつある。本シンポジウムでは、(1)表面に蒸着した単分子磁石を用いた量子分子スピントロニクス創製、(2)界面を利用したトポロジカル絶縁体の創製、(3)界面上に生成した錯体分子を用いたヘテロ接合の電子機能、(4)2次元液相界面に成長させたMOF、(5)有機-無機ハイブリッド型ペロブスカイト半導体を用いた薄膜太陽電池、(6)グラフェン上に吸着された金属錯体の物性、などについて、講演と議論を行った。

・第 98 回春季年会：融合領域の創製—単結晶金属錯体の構造と電子状態の転移ダイナミクス

ある種の金属錯体では単結晶状態を保ちながら、構造や電子状態などの転移が観測されるものがある。そのメカニズムや物性は基礎科学のみだけではなく材料科学の観点から大変興味を集めている。本シンポジウムでは、キラル超分子金属錯体の構造ダイナミクスや反応、擬一次元錯体における構造・電子状態相転移と価数揺動、超弾性を示す結晶、構造変化をスナップショット的に解明する測定法の開発、メカノクロミズムなどについて発表と議論を行った。

・第 99 回春季年会：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

エレクトロニクスは電子の電荷の自由度に基づいており、20 世紀はシリコン半導体全盛の時代であった。しかしシリコン半導体の限界も見え始めて 20 世紀の終盤からは有機分子を用いた分子エレクトロニクスの研究が盛んに行われてきており、有機トランジスターや有機 EL などの研究が行われている。一方、スピントロニクスは電子の電荷とスピンの自由度に基づいており、巨大磁気抵抗効果などの発見により磁気メモリーデバイスなどに実用化されている。しかし、加工性や多様性などの観点から分子スピントロニクスに関する研究が 21 世紀に入り、盛んに行われるようになってきている。本シンポ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。