

【研究領域名】 「配位プログラミング—分子超構造体の科学と化学素子の創製」

【研究期間】 平成21年度～平成25年度

【領域代表者】 ^{にしはら}西原 ^{ひろし}寛（東京大学・大学院理学系研究科・教授）

【領域代表者からの報告】

（1）研究領域の目的及び意義

本領域研究では第1段階で、配位化学を武器として、多機能を集約したヘテロ分子組織体を構築する界面ボトムアップ合成法、金属間電子・磁気相互作用などを操作できる分子集積・階層構造をつくり出すクラスターゼーション法、規則的な化学ポテンシャル制御構造をつくる精密超分子合成法、高次の分子集合体間の機能応答・連動・連鎖系をつくるバイオインスパイアード分子組織化法によって、特異な物理・化学特性を持つ、機能階層的な超構造体を設計通り精密に組み上げる方法＝「配位プログラミング」にまで到達させる事を目論んでいる。第2段階で、「配位プログラミング」を駆使して創製した精密超構造体から革新的な化学素子を創製するステージへ展開する。以上のアプローチにより、分子機能を組織化した高性能のナノサイズ化学素子の開発を視野に入れ、配位プログラミングを基盤とする精密超構造分子システム構築の科学技術を創発し、そこで生まれる新現象や新機能を探求する新しい学問分野を創出することを目的とする。

本領域では、次世代ナノテクとして期待されている「単電子デバイス」の世界の潮流の先をさらに先取りした「超構造体素子」の開発を目指し、日本発の新科学技術として確立する。これらの成果は、新しい高次構造＝機能物質の基礎科学を深化させるだけでなく、電子工学、光科学、材料科学、情報科学および生命科学へ幅広く波及し、次世代の電子・情報、エネルギー、環境、および生活、医療の基盤となる新しい科学技術分野を創出するものと期待される。

（2）研究成果の概要

超構造体の創製と機能発現について多くの成果が得られ、強力な領域内連携体制の研究成果として化学素子に係る成果も出始めている。各班の進捗状況は以下の通りである。

A01 班「界面プログラミングによる分子回路システムの構築」では、表面でのレドックス・光機能分子ワイヤの構築や、界面構造体についての精密構造解析、分子回転などの動的挙動の可視化、電位パルス分子メモリ効果などの新現象発現を見出し、生体光合成部品と人工分子からなる高感度光センサーなどの化学素子に関わる成果が現れた。A02 班「クラスタープログラミングによる電子・磁気機能システムの構築」では、有機ラジカルと金属錯体からなる新規多重双安定性分子の合成と熱や光による電子移動の制御、双安定性多孔性配位高分子におけるガス吸脱着による磁性変換などに成功し、化学素子へ展開を図る段階に至っている。A03 班「超分子プログラミングによるエネルギー・化学変換システムの構築」では、ポテンシャル勾配型デンドリマー、メタロポリマーなど多岐の超構造体を創製し、光電変換、エレクトロクロミズム、プロトン伝導などの機能を示す事を明らかにした。既に、太陽電池、フルカラー表示デバイスなど化学素子を実証した成果も現れた。A04 班「生体化学プログラミングによる化学空間機能システムの構築」では、多重ロタキサン、ナノポーラスタンパク質結晶、生体標識蛍光分子、MRIプローブ分子などの物質群が構築され、触媒、発光、生体プローブなどが達成された。人工金属酵素による物質変換や、生体物質の蛍光ラベル化剤などの化学素子に関わる成果が現れた。

【審査部会における評価結果及び所見】

A+（研究領域の設定目的に照らして、期待以上の進展が認められる）

（1）総合所見

本研究領域では、配位化学分野のこれまでの研究によって培われた知識と技術を基盤として、機能性を持つ化合物群である「機能性化学素子」を開発することを主たる目的としている。計画班、公募班を合わせると、本領域に

参画している研究者数は 100 名を超えているが、どの研究者も、配位化学の分野で活躍する優秀な研究者である。無機塩などの基本的な無機化合物にはじまり、無機化合物をその一部として含む生体関連化合物に至るまで、幅広い分子群を研究対象としており、無機化学分野の研究者だけでなく、物性化学分野や計算科学分野の研究者が協力して物質開発に取り組む体制を構築してきたことは特記すべき点である。領域運営においては、領域代表者が強いリーダーシップを発揮しており、班内・班間において有機的な連携体制の下、質の高い成果を数多くあげていることは高く評価できる。また、領域研究によって得られた研究成果は、国際シンポジウムを開催することによって、また、インターネットを利用した広報活動によって、積極的に広く発信されている。以上のように、本研究領域における研究の進捗は極めて順調であり、積極的な広報活動は、今後、本領域の成果を化学分野だけでなく工学分野に広めるために役立つものと期待できる。本領域の進展は期待を超えるものである。

(2) 評価に当たっての着目点ごとの所見

(a) 研究の進展状況

「異なる学問分野の研究者が連携して行う共同研究等の進展により当該研究領域の発展を目指すもの」とする本研究領域において、総括班は、班内・班間において連携研究を積極的に推進する施策をとっており、配位化学分野を中心として、実験および理論の研究者が協力して研究を遂行している。その結果、領域内の共同研究から多くの学術的成果があげられていることは評価できる。

また、「当該領域の研究の進展が他の研究領域の研究の発展に大きな波及効果をもたらすもの」として、すでに具体的な研究成果があがってきており、他の実用的な工業的な分野への波及効果が大きいと期待できる。また、得られた研究成果については国際学術雑誌だけでなく、ホームページや国内外でのシンポジウムなどを通じても発信されており、広い視点から広報活動が行われている。二国間シンポジウム、4 か国語のホームページあるいは主要な学会でのセッション企画などを通して積極的に社会へ成果の発信を行っている。

(b) 研究成果

「異なる学問分野の研究者が連携して行う共同研究等の進展により当該研究領域の発展を目指すもの」とする本研究領域において、参画研究者間の有機的な協力により、いくつかの新現象が発見されるとともに、化学素子構築への展開が進められている。その成果が格の高い一流国際誌に多数の論文に掲載されていること、そして、極めて順調に共同研究が推進されていることは特記すべき点である。

また、「当該領域の研究の進展が他の研究領域の研究の発展に大きな波及効果をもたらすもの」として、すでに、本領域から発信される学術基盤を基に、化学素子としてセンサー開発や光電変換、蛍光ラベルなどの実用的な応用研究への可能性が示されている。

(c) 研究組織

本領域は、配位化学分野のフロンティアにおいて活発な研究活動をしている研究者によって構成されている。総括班のリーダーシップのもとで、班内・班間において活発な共同研究が行われている。

(d) 研究費の使用

経費の使途は特に問題となる指摘はなかった。

(e) 今後の研究領域の推進方策

本領域で遂行された個々の研究によって、すでに評価すべき成果が多く得られている。これからの2年間においても、引き続き学術レベルの高い研究が遂行されるものと期待される。