	研究代表者	京都大学・高等研究院・特別教授 北川 進 (きたがわ すずむ)	研究者番号: 20140303
	研究課題 情報	課題番号: 22H05005 キーワード: 多孔性配位高分子、ハイブリッド材料、相乗的機能、微量検出・分離・変換	研究期間: 2022年度～2026年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

私たちの身の回りには、自然及び人工による健康を害するもしくは危険な物質に溢れている。そのような物質を微量でも高感度に検出したり、選択的に分離したり、無害な物質へと変換することは極めて重要である。異質なものを組み合わせるハイブリッド化は、それぞれの構造や機能を「補完」して、優れた特性を生み出す材料創製法として知られている。生物のハイブリッド系である細胞膜は、脂質分子の2次元の構造体にタンパク質などの多様な成分を取り込んで物質の選択輸送などの機能を協同的、相乗的に発現している。本課題では、物質捕捉、濃縮、貯蔵、輸送の空間機能を持つ多孔性配位高分子(Porous Coordination Polymer: PCP)と、電荷や電子の輸送能を持つ基盤無機材料とを接合し、その界面領域であるヘテロインターフェース空間を理解、制御することで外部物質の検出、分離・変換機能を持った高機能な空間システムを創出する「相乗的インターフェースの空間化学」の学理を立ち上げ、社会的要請に応える成果を生み出すことを目指す(図1)。

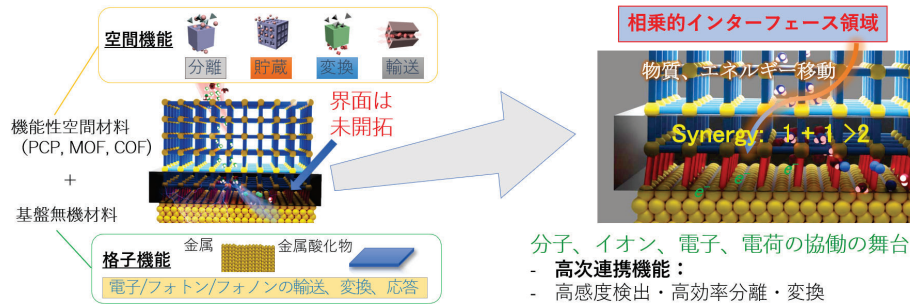


図1 本課題で取り組む「相乗的インターフェースの空間化学」のイメージ図

●研究の背景・目的

申請者らは、異なる機能を有するPCP同士を融合させる界面の化学を深化させ、外部刺激・環境変化といったシグナルを増幅・伝搬する流れを生み出し、高次に応答する空間システム「適応性空間の化学」の学理構築を企図して2018年から基盤S研究に取り組んできた(課題番号18H05262;図2)。4年間における基盤Sの研究成果を踏まえて、更なる展開に向けたGoalの設定が見えてきた。

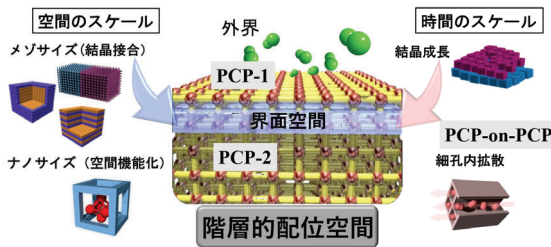


図2 前身の基盤S課題: 「適応性空間の化学」

PCP結晶の集積は同族的集積であり、PCPの優れた機能性空間(分子認識、捕捉、貯蔵、輸送)の強化は可能であるが、電荷や電子および光子、フォンの自在制御も加えた変換機能の付与には不足している。この機能を有する材料は金属酸化物半導体や伝導体、グラフェン等のヘテロ材料であり、PCPとの融合が不可欠である。特に原子の規則性格子構造を持つ金属酸化物表面とPCP規則性多孔性結晶面とが接する界面の相乗的機能創成を行うインターフェース化学の開拓は極めて重要であり、今後の機能材料・デバイス開発に大きなパラダイムシフトをもたらすことは間違いない。

●研究の方法

本研究が掲げる相乗的インターフェースの空間の創出にあたり重要な課題は、機能性空間を有するPCPやその結晶表面の設計と、PCPとヘテロ材料間の有機的な融合法の開拓である。すなわち、界面にフォーカスするナノ空間の化学、結晶界面の自在操作(構造構築・表面修飾、および複合化)手法の開発といった、サイズスケール、電荷、分子運動などの総合的な視点をふまえた物質科学が不可欠である。本研究は、これまで申請者が開拓してきた空間の化学を集大成させ、以下の3つの柱を設置、開拓し、最終的に有害物質や爆発性危険物質を高感度に検出・分離・分解する高次機能ハイブリッド材料の創成に挑む。

- ① 動的ナノ空間およびインターフェース空間の有機的複合・融合化
- ② 動的ナノ空間およびインターフェース空間によるその場観察を用いた動的な現象理解
- ③ 計算化学による連携機能の統括的理解とデータサイエンスを駆使した設計

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

私たちの身の回りには生命や健康に関わる危険物質にあふれている。それらを効率よく検出し、ひいては選択分離・除去もしくは無害化に向けた変換をする材料を開発し、安全に資する科学技術を確立する必要がある。本課題研究では、空間機能を持つ多孔性配位高分子(Porous Coordination Polymer: PCP)と、電荷や電子の輸送能を持つ基盤無機材料を接合して、相乗的インターフェースを創出することによって、以下のような課題に取り組む。

●高感度検出

嗅覚とは、魅力、安全、危険などのサインに関連するガス状物質(匂いまたは臭い)を感じる感覚である。嗅覚は、匂い分子が鼻腔内にある受容体の特定の部位に化学的に結合することで発生し、他の器官と統合して匂いの感覚を形成する。現在、よく訓練された嗅覚犬の検出限界(LOD)は、数百兆分の1(ppb)程度である。これに匹敵するためには、化学的相互作用を利用した非接触・リアルタイムの検出技術が必要である。こうした技術は、これまでに大きな進歩を遂げてきたが、最良の化学ガス検知技術の感度は、動物のそれと同様にppbレベルである。しかし動物の嗅覚システムの感度、選択性、感知速度を顕著に上回る人工システムを作ることができるかどうか、という疑問はまだ残っている。本課題では、分析対象物に高度な親和性、選択性を持つPCP結晶を金属酸化物(MO)上に成長させそのインターフェースの相乗的機能化により、標的分子を選択的に吸着し、局所的に濃縮することができ、検出能力を飛躍的に向上させることを目指す。

●有害物質の高効率分解・変換

生活空間における空気中にはしばしば、防腐剤や塗料等の揮発性有機化合物や工場や車の排気ガス等を原因として、人や生態系に対して有害な化学物質を含んでいる。こうした有害物質を効率的に分解するデバイスの開発が望まれている。そこでは、まずターゲットとなる物質の分子を選択的に取り込むプロセスが重要である。申請者らが開発してきたPCPは、合理的にその空間機能を作れることから大いに優位性がある。PCPの高度の捕捉、濃縮機能を利用し、上記の非接触センサー同様、MOとのインターフェースの変換機能(光などによる触媒機能)を設計し付与して、有害物質の高効率分解・変換デバイスを創成する。

有害・危険性物質の微量検出・分離・変換：
環境、社会生活、健康への応用技術



図3 本課題で得られる成果から見込まれる社会への波及効果