

## 令和3年度学術研究動向等に関する調査研究 報告概要(化学専門調査班)

### 化学分野に関する学術研究動向及び学術振興方策— 有機合成化学の新たな潮流と展開—

秋山 隆彦 (学習院大学理学部・教授)

有機合成化学は、医薬品、農薬等の生理活性化合物や、様々な機能性材料などの有用な化合物を合成する際に、極めて重要な役割を果たしている。その中でも、優れた触媒の開発、効率の良い有機合成反応の開発は、SDGsの観点からも重要である。2021年のノーベル化学賞はDavid MacMillan博士(Princeton University, USA)およびBenjamin List(Max-Planck Institute, Germany)の不斉有機触媒の業績に対して授与された。キラルな化合物を合成するために、2000年頃までは、一般にキラル金属錯体あるいは、生体触媒(酵素)が用いられて来た。不斉触媒反応の開発に対して2001年の野依らにノーベル化学賞が授与された。今回の受賞は、不斉触媒能を有する有機小分子が優れた不斉触媒能を有することを見出した、2人に研究者に贈られた。有機小分子が触媒能を示すことは古くから知られていたが、2000年のListらによる(S)-プロリンを用いた分子間アルドール反応、同じく2000年のMacMillanによるMacMillan触媒を用いた不斉Diels-Alder反応の2つの若手研究者の報告により、「有機触媒」という言葉が汎用されるようになり、活発な研究が行われている。新学術領域研究においても、2011年に「有機分子触媒による未来型分子変換」という有機分子触媒を中心課題とする領域が発足し、国内でも活発な研究が行われるようになった。現在は、List博士は、キラル酸触媒の分野で顕著な業績を上げており、極めて活性が高く、低触媒量で進行する、触媒を開発して、数多くの不斉触媒反応を開発している。一方のMacMillan博士は、有機触媒に加えて、光酸還元触媒(Photoredox catalysis)を用いた反応を2008年ごろより開始し、有機触媒との協働作用により、これまでに不可能であった、新たな触媒反応を次々と開発している。MacMillanらの研究に触発されて、光酸化還元触媒を用いた研究は、現在の一大潮流となっており、世界中の非常に多くの研究者が取り組んでおり、活発に研究が行われている分野の一つである。

毎年新たな雑誌が新たに刊行され、論文の数が飛躍的に

増大しているが、近年、SNSを用いた情報発信も増大している。SNSで繋がった研究者間で、それぞれの論文を紹介しあうことによる情報発信もますます重要になってくると考えられる。

### 化学分野に関する学術研究動向及び学術振興方策— 錯体化学分野における新たな潮流と展開—

北川 宏 (京都大学大学院理学研究科・教授)

本研究担当者は、京都大学理事補(研究担当)として、京都大学学術研究支援室(KURA)の協力の下、多岐にわたる学術分野の動向分析を行って来た実績がある。また、現在、科学技術振興機構(JST)プログラムオフィサー(さきがけ「革新的触媒」、CREST「未踏物質探索」及び創発的研究支援事業「材料分野」)として、国内外の科学技術政策及び研究開発の動向等についての調査・分析等に関する定点観測業務を行っている。さらに、錯体化学会の会長の立場から、錯体化学の動向を常にウオッチしている。この実績を元に、特に、以下の点に着目して調査を行った。

- ・聴衆の反応が良いセッション(または講演)
- ・近年盛り上がった/重点化されたセッション
- ・上記を通じて得た研究動向(新興領域/上昇領域/最盛期の領域)

対象の国際会議は、大規模な年次総会(例:ACS National Meeting)や、各分野が2~3年に1回開催するようなものを対象とした。特に本課題申請者がこれまで継続的に参加してきた会議をベースに、新たに参加する会議も対象とした。ただし、「国際会議」という名称でも、対象トピックスが狭すぎる会議もあるため、参加・調査する国際会議は慎重に判断した。

重点的に対象とする分野は「錯体化学」として、申請者がこれまで継続的に参加している「触媒化学」と「ナノ化学」も含めて、動向調査を行った。以下、概要を記す。

1) ミュンヘン工科大(TUM)の触媒化学研究センター(CRC)とのオンライン会議により、錯体化学分野の動向調査を行った。旧知の仲であるセンター長のRoland Fischer教授は、ドイツ研究振興協会(DFG)の理事(化学・材料分野)

## 令和3年度学術研究動向等に関する調査研究 報告概要(化学専門調査班)

も務めた経験が有り、化学・材料分野の学術動向について広く意見交換を行った。データ科学の活用が進んでいるとのことである。

2) 分子科学会が協賛している「分子性固体オンラインセミナー」に参加して、国内錯体化学や分子科学のトレンドを調査した。電池やイオン伝導体などのエネルギー材料分野の研究が注目されている。

3) 錯体化学会第71回討論会に参加し、「これからの研究のあり方-研究インテグリティと若手研究者-」のシンポジウムにパネラーとして出席し、特に若手研究者の意識動向調査を行った。研究公正に関しては意識が高まってきている。その一方で、選択と集中が進んだ結果、若手研究者の外部資金獲得の採否への不安が高まり、挑戦的な研究提案が出来なくなっており、学生へのテーマ出しも小ぶりになっているようである。

4) 錯体化学会主催の「第一回錯体化学会フロンティアセミナー」に参加し、講演を行った。企業人向けのセミナーである。水素貯蔵や燃料電池、プロトン交換膜、新型電池等、エネルギー分野における錯体化学に対する期待は高まっているようである。

5) 錯体化学の新分野に関する動向調査に関して化学専門調査班にて報告し、意見交換を行った。目前の顕在化している課題やニーズを解決することも重要だが、たとえ遠回りだとしても日本の明るい将来への投資として、潜在的な問題の発掘や新しい現象・物質の発見が日本独自のサイエンスに貢献するという趣旨の報告を行った。

### 生体関連化学分野に係る学術研究動向に関する調査研究 ～配列・構造情報のさらなる活用に向けて～ 跡見 晴幸(京都大学大学院工学研究科・教授)

近年目覚ましい発展を遂げているゲノム科学・生物情報学・構造生物学などの学問領域において、蓄積が進んでいる膨大な生物情報(塩基配列・アミノ酸配列・タンパク質構造)が多様なバイオ関連化学分野に対してどのような変化をもたらしているのか、どのように利用されているのかについて、昨年度に引き続き調査した。ゲノム解析プロジ

ェクトの数はバクテリア・真核生物・アーキア・ウイルスを問わず昨年・一昨年と同程度であった。またメタゲノム解析の件数がそれら以上に大きく増加を続け、環境中の生態学的研究や腸内細菌叢を対象とした研究などの発展に大きく寄与している。タンパク質の構造解析においては、X線結晶解析により得られている構造の数はいままでと同程度であったが、核磁気共鳴(nuclear magnetic resonance、NMR)による構造の数の増加比はやや減少傾向にあった。一方、クライオ電子顕微鏡によるタンパク質の構造解析(electron microscopy、EM)を用いた構造の報告数は引き続き顕著に増加している。

2021年度内で関連分野において最もインパクトのあった成果はAlphaFold2の発表であった(Nature, 596, 583-589, 2021)。以前よりボトルネックである実験的解析(wet研究)を回避し、in silico解析(dry研究)によりタンパク質構造を精度よく予測する手法の開発が望まれていた。AlphaFold2においては、タンパク質の折り畳みシミュレーションに従来の分子動力学法(Molecular Dynamics、MD法)を用いず、機械学習法(Machine Learning、ML法)を利用してシミュレーションを行う。計算の負荷が大幅に縮小されることから、活性中心付近など局所的に領域を限定する必要はなくなり、タンパク質分子全体の構造シミュレーションが比較的短時間で可能となった。2021年末より、alphafold2を用いた構造予測に基づいて、タンパク質の構造機能相関の解明を目指した研究やタンパク質の機能改良を目指した工学的研究に関する成果が報告されている。膨大な配列情報とalphafold2を利用した構造予測を組み合わせることにより、いままで一次構造にとどまっていた相同性検索が3次構造の比較まで可能となり、機能未知遺伝子の機能解明に多くの手がかりを提供してくれることは間違いない。またタンパク質工学の分野では、一次構造のみの解析ではいままで見いだせなかった変異導入のホットスポットが明らかとなり、酵素の機能改良の効率も大幅に改善することが期待される。以上のことより、今後バイオ関連分野におけるalphafold2の利用は急速に拡大することが予想される。

## 令和3年度学術研究動向等に関する調査研究 報告概要(化学専門調査班)

### 有機機能材料、無機・錯体化学分野に関する学術研究動向 –有機機能材料化学と無機・錯体化学の境界領域における新たな潮流と展開–

長谷川 靖哉 (北海道大学大学院工学研究院・教授)

錯体を用いた有機分子材料の潮流を探るため、様々な形態の金属錯体を基盤とした分子材料の論文報告件数を調査した。この形態に関する研究調査から、金属錯体を含む「glass or amorphous」や「supramolecular」のほかに、「grind」や「mechano」をキーワードとした学術論文が近年多く報告されていることがわかった。これは力学的な刺激によって固体の形態（構造転移、相転移、化学反応による分子構造変化）や機能変化（光機能、電子機能）を誘起する錯体が注目されていることを意味する。力学刺激などによって形態や機能が変化する Au 錯体や Pt 錯体がこれまで多く発表されていた。

力学的な刺激によって機能が発現する現象「トリボルミネッセンス」が古くから知られている。このトリボルミネッセンスとは結晶を砕いた時に光る現象のことであり、「メカノルミネッセンス」とも呼ばれる。1967年からトリボミネッセンス研究に関する論文発表が増え始めたが、2000年まで毎年数件の論文が発表されるに留まっていることがわかった。一方、メカノルミネッセンスに関する学術論文は1980年ごろから増え始め、2020年ごろにはメカノルミネッセンス論文はトリボルミネッセンス論文の約2倍となることがわかった。トリボミネッセンス論文の元素別統計では、Mn および Eu を含むトリボミネッセンスが多く報告されていることがわかった。この2つの元素のトリボミネッセンスに関する論文は圧倒的に多く、Ca や Al は無機系トリボミネッセンス発光体の結晶媒体として報告されていることがわかった。

学会およびシンポジウム調査では、金属錯体の光機能に関する研究が多く報告され、金属錯体を基盤とした有機分子材料の研究も大きく広がっていることがわかった。特に、発表された無機高分子の機能は発光に関するものが多く、光機能は有機機能材料分野の主流になりつつある。錯体光化学国際会議では金属錯体の形態変化と光機能に関する研究発表の顕著な増加が見られた。このことから、世界の

金属錯体研究の動向は従来の構造解析から構造相転移機能に移行しつつあることがわかった。

以上、「錯体の構造解析から構造転移」に関する研究が急速に増えていることが学会およびデータ解析から明らかになることができた。

### 無機物質および無機材料化学分野に係る学術研究動向に関する調査研究 –無機ナノ物質およびその周辺分野における新たな潮流と展開–

長田 実 (名古屋大学未来材料・システム研究所・教授)

本調査研究では、無機ナノ物質およびその周辺分野における新たな潮流と展開についての調査を行った。特に、無機系2次元ナノ物質およびその周辺分野における国内外の最新の研究例や注目すべき研究例について調査を行い、当該分野のトレンド、新たな研究領域、新たに生まれつつある分野横断的・融合的な研究分野、今後重要性を増すとされる研究分野等の動向調査を行った。

原子数個の厚みを有する2次元ナノ物質（ナノシート）は、グラフェンの報告以降、材料科学の重要なターゲットとして注目されており、精力的な研究が世界中で行われている。中でも、無機ナノシートは究極の2次元性と共に、グラフェンにはない組成、構造、機能の多様性を具備しており、グラフェンを凌駕する機能の開拓を目指そうとする「ポストグラフェン」研究の重要なターゲットとなっている。これまで無機ナノシートの多くは、層状化合物の機械的剥離あるいは化学的剥離により合成されてきたが、近年、新しい合成アプローチとして、ボトムアップ手法によるナノシート合成の進展が目覚ましい。これまで報告されている合成法としては、化学気相堆積法、気液界面合成法、界面活性剤やグラファイトの層間をテンプレートとする方法、オストワルト熟成によりナノ粒子の異方的成長を促進する方法、パルスレーザー蒸着により作製したエピタキシャル膜を転写する方法などがあり、貴金属（Au, Pd, Rh など）、酸化物（TiO<sub>2</sub>, WO<sub>3</sub>, CeO<sub>2</sub>, In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SnO<sub>2</sub>, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> など）、金属カルコゲナイド（PbS, CuS, CuSe, SnSe, ZnSe, ZnS, CdSe など）への適用が検討されている。また、無機

## 令和3年度学術研究動向等に関する調査研究 報告概要(化学専門調査班)

ナノシートの研究はこれまで結晶材料が中心であったが、遷移金属カルコゲナイド、窒化ホウ素、シリカなど、様々なアモルファス2次元材料の合成が達成され、2次元性とアモルファスの特徴を融合させた新しいエレクトロニクス機能材料として注目されている。

ナノシート単体は、高キャリア移動度、低抵抗性、柔軟性、透明性、高耐熱等など、特異機能を示す新材料として興味深いところであるが、ナノシートを構築単位として自在に集積・複合化し、2次元～3次元へとナノ構造体のボトムアップ集積が可能となれば、現行の材料技術では到達困難な微小デバイスの開発や高次機能の設計・発現の道が開かれる。こうした目的のために、異種ナノシートのレイヤーバイレイヤー集積が注目されており、レゴブロックのようにナノシートを精密に積み上げていくことより、新しい材料の構築と機能開発が検討されている。中でも注目されているのが、「モアレ物質」を利用した電子機能の設計である。ねじれ2層グラフェンにおける超伝導の発見以降、世界中の多くのグループが検証実験とともに、他物質系への拡張実験に取り組み、超伝導だけでなく、モアレ系における励起子、ソリトン、高次トポロジカル絶縁体状態、強誘電性など、多くの電子相制御を実現している。また、遷移金属カルコゲナイドをベースとしたモアレ物質では、偏光・磁気秩序を電流制御、磁気相-超伝導相の転移、励起子物性の電場制御など、バレー自由度に起因した特異な物性を示すことも報告されている。以上のように、モアレ物質は、格子定数に制限されない新しい物質創製の手法を提供し、長距離秩序を有するモアレポテンシャル、フラットバンドなど新しい量子現象を誘起できるため、凝縮系物理学、量子デバイスの新しいプラットフォームとして、今後の発展が期待されている。

### 物理化学、機能物性化学分野に関する学術研究動向

#### -ナノ物質化学における新たな潮流と展開-

佃 達哉(東京大学大学院理学系研究科・教授)

金属原子の集合体である金属ナノクラスターは、対応するバルクの金属からは予想できないようなサイズ特異的

な性質を示すことから、機能性物質の構成単位として期待されている。特に最近では原子精度での精密合成や単結晶X線構造解析による構造決定が可能となり、諸物性(光学特性、触媒性能)との相関について分子科学的な視点で理解が進みつつある。例えば、金属ナノクラスターをナノスケールの人工原子(超原子)と捉えて、新しい周期表の構築が検討されている。この学術的な潮流は、“Atomically Precise Nanochemistry”という旗印のもとで推進されており、今後は概念の深化とともに、理論化学・表面化学・先端計測・触媒化学など周辺分野も巻き込みながら拡充するものと予想される。今年度の主な調査研究活動の内容は以下の通りである。

1. 国際学術誌 Journal of Chemical Physics 誌において特集号を企画し、化学および物理系の研究者コミュニティから幅広い投稿を募り、42報の優れた論文を集めて最近の潮流を示した。

2. ナノ粒子合成・触媒化学・表面化学・炭素材料・先端計測技術・ナノバイオ応用・理論計算など多岐にわたる分野のトップ研究者と若手研究者が、“Atomically Precise Nanochemistry”を共通土台として議論する場を提供する目的で Gordon Research Conference をカナダ Crudden 教授と co-chair として企画した。最終的には、コロナ禍のため次年度(2022年10月)に延期となった。

3. 下記の国際会議やセミナーにおいて、化学修飾した超原子の合成・構造・物性に関する招待講演を行い、アジアを中心とした国際的な研究者と情報交換や人的ネットワークを構築した。

・ pCOE on Molecular Materials and Functions Lecture Series

・ Aggregate Science in Metal Materials: From Clusters to Crystals and Supracrystals

・ The 5th EFCS and the third international conference in this series (EFCS 2021)

・ Indo-Japan virtual workshop on “Cluster science by interdisciplinary approach: Emerging materials and phenomena”

当初の予定・計画に変更が生じたものの、事業の目的は達成することができた。

## 令和3年度学術研究動向等に関する調査研究 報告概要(化学専門調査班)

### 有機合成化学関連分野に関する学術研究動向

#### —新反応と新分子の開発と応用の動向—

友岡 克彦 (九州大学先端物質化学研究所・教授)

有機合成化学は有機分子を自在に創り出す学問・技術であり、現代文明社会に不可欠である。本調査研究では、有機合成化学の研究動向に関する知見を得るために、関連する複数の学会に参加して調査を行った。第31回万有福岡シンポジウム(2021年6月4日～5日、オンライン)では口頭発表5件、ポスター発表17件を通じて、反応の開発、糖タンパク質や生理活性小分子の合成などに関して活発な研究がなされている傾向が認められた。また、有機合成化学関連で最も中心的な国内学会である第118回有機合成化学シンポジウムに(2021年6月23日～24日、福岡)では口頭発表20件、ポスター発表29件を通じて、反応の開発、不斉合成を含む立体制御法の開発、天然物の全合成などに関して活発な研究がなされている傾向が認められた。また、シンポジウム モレキュラーキラリティー2021(2021年11月29日～30日、広島)では口頭発表20件、ポスター発表を通じて、不斉合成法やキラル構造有機化学的研究などに関して活発な研究がなされている傾向が認められた。さらに、日本化学会第102春季年会(2022年3月23日～26日、オンライン)では多くの口頭発表、ポスター発表を通じて、有機化学の研究に関して活発な研究がなされている傾向が認められた。一方、国内の複数の研究者を招聘もしくはオンライン会議を介して学術研究動向聴取を行い、有機化学の研究傾向を調査した。

### 基礎物理化学関連分野に関する学術研究動向—複雑系の理論・計算科学の新たな潮流と展開—

江原 正博 (自然科学研究機構・分子科学研究所・教授)

物理化学分野では、材料開発や生物化学との境界領域の研究が進展している。理論・計算科学分野では、研究対象が複雑・複合系になり、新しい理論や方法が開発されている。また、化学事象の物理化学的起源が複雑であるため、データ科学・機械学習の方法も活用されている。令和3年

度は、複雑系の理論とデータ科学・機械学習を中心に、研究の動向調査を実施した。

触媒と表面科学をテーマとした済南大-成均館大-分子研合同シンポジウムでは、均一系触媒・不均一系触媒・分子性触媒の最先端の理論・実験研究の講演があり、合成・計測・理論解析の緊密な連携とともに、データ科学を活用した研究も報告された。また、分子研・計算科学研究センターでは、生体分子の構造・機能・デザインの計算科学をテーマとしたワークショップを開催した。生物物理分野ではAlphaFoldプログラムが革新的であり、タンパク質の構造を予測する研究が実験・理論の両面から急速に進展している。近年、機械学習をテーマとする研究会が数多く開催されている。第一原理計算とニューラルネットワークを用いた原子間ポテンシャルは、物理化学や材料科学の分野の研究に利用されてきており、今後、シミュレーション技術が進展することが期待される。

金属ナノ粒子の光物性や触媒作用に関しても研究が進展しており、特に、合金ナノ粒子の研究が際立っている。ハイエントロピー合金は、様々な元素の合金が生成できる技術が確立しつつあり、その安定性に関する理論研究も行われている。遷移金属元素のみから成る合金三元触媒が開発され、反応機構の解析が行われている。光物性の解析では、数千原子から成る金属ナノ粒子の電子状態計算や光・電圧応答などの理論計算が可能になっている。

このように複雑系の理論・計算科学において、電子状態計算とデータ科学・機械学習を利用した材料開発の研究が急速に進展している。これらの研究開発では、「化学空間」をどの程度カバーできるかが重要な課題になっていると考えられる。その意味で、材料の機能を最適化する逆設計理論を活用した方法も有利であり、今後の展開が期待される。

### 生物分子化学分野に関する学術研究動向 —生体複合分子化学の新潮流—

藤本 ゆかり (慶應義塾大学理工学部・教授)

新型コロナウイルス関係

## 令和3年度学術研究動向等に関する調査研究 報告概要(化学専門調査班)

本調査研究では、生物分子化学分野に関する学術研究動向「一 生体複合分子化学の新潮流」について、特に、生物分子化学関連分野の中でも、糖質を中心にタンパク質・ペプチド、脂質などの生体分子についての有機化学およびその生体関連機能に関わる生物分子化学あるいはケミカルバイオロジー分野についての調査研究を行った。

糖鎖やタンパク質などの種々の生体分子については、有機化学手法の発展とともにケミカルバイオロジー分野の手法開発、生物機能解析、創薬手法への展開が進んでいる。多様な研究の中で、世界的パンデミックとなった新型コロナウイルス感染症関連研究についても、感染に関わるタンパク質やその糖鎖構造、種々の解析手法、感染抑制のための手法などに関連し、生物分子化学関連分野においても多くの研究が行われた。生物分子化学関連分野における幾つかのトピックスについて、コロナ渦における世界的なロックダウン等の影響で、論文数の増加が2020年および2021年に頭打ちになる傾向があった一方で、COVID-19に関わる研究分野のトピックスの論文数が増加した。

また、人工知能(AI)を用いたタンパク質構造予測や有機合成ルート探索等の技術が発展しているが、最近こうした技術が、世界的に多くの研究者が容易に使用出来る形で提供されるようになっており、今後、関連科学分野に大きな影響を与えると考えられる。

国内においては、文部科学省において、大型プロジェクトの推進に関する基本構想ロードマップ2020に「ヒューマンゲノムプロジェクト」が策定され、ヒトの網羅的糖鎖情報解析が国家プロジェクトとして始動したほか、JST・AMEDでも糖鎖-タンパク質の細胞での基礎的機能に関わる分野のプロジェクトが進んでおり、今後、日本の科学分野の強みとして関連分野のさらなる発展が期待されている。

### 高分子分野に関する学術研究動向

三浦 佳子(九州大学大学院工学研究院・教授)

現在の高度な文明社会を下支えしているのは各種の材料である。材料科学は、無機、有機材料、および金属など

からなる。有機材料の多くを占める高分子材料は、合成化学の手法によって材料を設計、合成し、性質を自由に変えられることから、多様な機能性材料としての可能性がある。近年、特に環境にやさしい技術が強く求められているが、軽量で強い高分子材料の開発が必須である。一方で、環境問題の一つとして、海洋に放出されるマイクロプラスチックが指摘されている。以上の利点と問題点の双方を踏まえて、高分子材料に関する報告は年々増加している。

高分子合成の分野では、精密なラジカル重合の技術が発展してきている。精密ラジカル重合の手法は、高分子の合成、高分子の脱重合、バイオ系高分子、材料の表面修飾などの多くの分野に及んでいる。また、精密な合成手法に基づいて、種々の機能性材料の開発が行われている。二酸化炭素、水、塩といった物質の精密な分離材料の開発の報告が増加している。同時に、光、電子材料や、バイオ系の高分子材料といった高い機能を有する高分子材料の報告も増加している。

環境問題に対応する材料としては、分離材料、生分解性高分子などに関する報告が増加している。例えば、地球温暖化の元とされている二酸化炭素を分離する高分子素材が注目されている。工場、加えて大気から二酸化炭素を分離する高分子膜の開発が盛んに報告されている。また、環境汚染物質、塩、水と油を分離する高分子膜の研究も報告されている。マイクロプラスチック問題を解決する手法としては、生分解性高分子の開発が注目されている。これまではポリ乳酸を中心とした幾つかのポリエステルが中心になると考えられていた。近年では多様なポリエステルの合成が可能になってきており、種々の物性を発揮する生分解性高分子が調製できるようになっている。また、天然高分子である、多糖類(セルロース、アミロース、キチンキトサンなど)の利用、合成高分子との複合化についても報告が増えている。加えて、細菌類を用いて、機能性の生分解性高分子を調製する手法についても検討が進められている。

以上のように近年、高分子材料は強くSDGsを志向しながら、一層研究が進展している。

## 令和3年度学術研究動向等に関する調査研究 報告概要(化学専門調査班)

### 有機機能材料化学分野に関する学術研究動向 一 $\pi$ 共役系有機材料の開発と応用分野における新潮流一 瀧宮 和男 (東北大学大学院理学研究科・教授)

有機機能材料化学分野では、従来より、低分子から高分子化合物に至る様々な分子量領域において、芳香族をはじめとする  $\pi$  電子系を組みこんだ分子群を創出し、それらを電荷輸送、光吸収、発光などの様々な半導体機能へと展開する、いわゆる有機半導体研究が活発に行われている。本分野において、新規分子の開発と材料の光・電子デバイスへの応用が研究開発における両輪となりその発展を推し進めてきた経緯から、この二つの観点に基づき、萌芽的な材料開発研究と有機半導体の新規な光電子デバイスへの研究に関し調査を行った。

従来の有機半導体材料の開発では、分子そのものの開発に主眼が置かれる一方で、機能発現のプラットフォームとなる分子集合体での構造の制御やその予測は、材料開発研究の主要な標的とはなっていない面があった。このような中、有機材料化学分野で注目されている材料系に共有結合性有機構造体 (covalent organic framework, COF) と呼ばれる二次元高分子がある。合成の困難さのため、従来の COF では  $\pi$  電子系が高密度に集積されておらず、光・電子機能の開拓は限定的であったが、近年、縮合多環芳香族、ポルフィリンやフタロシアニンなどの高度に拡張した  $\pi$  電子系を構造単位とした COF が開発され始めた。さらに電荷輸送能や伝導に関する実験的な評価も行われ始めており、分子構造に基づく理論計算から得られる電子的特性との比較が可能となりつつある。一方で、構造決定の曖昧さは依然として課題ではあるものの、分子レベルからバルクでの物性と機能を直接設計できる材料系として注目されている。

一方、従来の有機半導体のデバイスへの応用では、トランジスタ、電界発光、光電変換が主たる標的となっていたが、熱電変換素子への応用に関する研究も着目され始めている。Web of Science を用いた調査では、1990 年以降、約 1900 報の論文が報告されており 2010 年頃から論文数が急速に立ち上がり、ここ数年は年間 200 報を超える論文が発

表されていることが分かった。研究の進展に伴い、熱電変換特性の向上が認められており、特に研究初期 (2010 年前後) では、研究例が少なかった n 型熱電変換における特性向上が顕著である。一方で、これらの研究における材料評価の多くが、熱伝導度を含めた無次元性能指数 (ZT) ではなく、熱電能と電気伝導度のみであったことから、今後の更なる発展に材料開発とともに評価法の確立も重要となることが示唆された。