

二国間交流事業 共同研究報告書

令和4年4月19日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[代表者所属機関・部局]

大学共同利用機関法人自然科学研究機構・岡崎共
通研究施設計算科学研究センター

[職・氏名]

教授・江原正博

[課題番号]

JPJSBP1 20199902

1. 事業名 相手国: ノルウェー (振興会対応機関: OP) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 錯体超分子構造体の理論化学

(英文) Theoretical Chemistry of Supramolecules and Frameworks based on Metal Complexes

3. 共同研究全実施期間 平成31年4月1日 ～ 令和4年3月31日 (3年0ヶ月)

4. 相手国代表者(所属機関・職・氏名【全て英文】)

University of Oslo, Professor, Trygve Helgaker

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		2,614,810 円
内訳	1年度目執行経費	1,870,000 円
	2年度目執行経費	744,810 円
	3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究全実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	7名
相手国側参加者等	3名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	4	0	2(0)
2年度目	0	0	0(0)
3年度目	0	0	0(0)
4年度目	0	0	0(0)

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣: 本委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入: 相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は本委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流実績の概要・成果等

(1)研究交流実績概要(全期間を通じた研究交流の目的・研究交流計画の実施状況等)

Metal-Organic-Frames (MOFs)は最近見出された遷移金属錯体を主要部分とする高分子結晶であり、多くの興味ある性質をしめすことから理論化学研究による成果が実験分野から求められているが、無限系であるため、高精度電子状態計算が困難であり、理論的研究は限定的であった。ノルウェーのオスロ大学 Hylleraas Centre の Trygv Helgaker 教授をはじめとする理論化学研究者は高精度電子状態計算で世界的な成果を上げている。この Helgaker 教授グループと研究の交流をすることにより、MOFs のような複雑な構造を持つ巨大複合系の電子状態計算による理論的研究を進め、その分子科学的・物理化学的な知見を得るとともに、当該分野および関連分野における電子状態理論に基づく理論化学を発展させることを目的とした。

コロナが始まる前の 2019 年は、日本側から主要メンバーがオスロを訪問し、シンポジウムを開催し、共同研究の打ち合わせを行った。また、オスロ大学 Hylleraas Centre からも MOF の研究を行っている2名の研究者が来日し、分子科学研究所と京都大学福井謙一記念研究センターでワークショップを開催し、共同研究の打ち合わせを行った。コロナが始まった 2020 年から 2021 年度は日本側からのオスロ直接訪問、ノルウェー側からの日本直接訪問は不可能となったが、Zoom による公開シンポジウムと研究打ち合わせを行い、共同研究を進めてきた。本年度は、日本学術振興会北欧支部による JSPS 同窓会の講演会と合同で、MOFs および類縁物質の実験および理論化学研究に関する日本ーノルウェーシンポジウムを開催し、3年間の成果のまとめを行った。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

ノルウェーのオスロ大学で開発された代表的な MOF の一つである UiO-66による二酸化炭素、アセトン、メタノールなどの気体分子の吸着挙動に関する電子状態理論研究を行った。これらの気体分子と UiO-66の相互作用は分散力が重要な役割を果たしていること、分散力を正しく見積もるために、全系を周期境界条件下での密度汎関数理論により計算し、気体分子と UiO-66 の主要部分との相互作用を post Hartree-Fock 法の SCS-MP2 法や MP2.5 法で計算する Cluster Model/Periodic Model 融合法が強力な計算法であること、メタノールやアセトンの吸着系の NMR の化学シフトの計算値と実験値が一致し、NMR がこの種の MOFs への気体分子吸着の研究に強力な方法であること、実験結果が乏しい二酸化炭素についても NMR の化学シフトが、吸着位置と吸着分子数に関する情報を与えてくれることを明らかにした。これらの共同研究の成果について、現在、論文をまとめている。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

我が国からもノルウェーからも、理論化学研究者とともに、MOFs の実験化学研究者が研究打ち合わせに参加し、単に MOFs の化学の進展だけでなく、理論化学研究と実験化学研究のインタープレイが確立でき、このようなタイプの共同研究が、現在の物質科学で重要な研究課題となっている複雑な複合系の研究に欠くことが出来ない重要な研究体制であることが示された。この成果は、単に、MOFs の科学に留まらず、関連する無限系、複雑系、ソフトクリスタルなどの分野にも波及する重要な成果である。

UiO-66 に関する成果としては、日本とノルウェーの化学者の研究打ち合わせから生まれた、「実験的な研究から得られる NMR 化学シフトと計算化学から得られる吸着位置、吸着エネルギー、NMR 化学シフトの情報を合わせることにより、実験的な情報の乏しい二酸化炭素の吸着構造を明らかにすることが出来るのではないか」と言うアイデアを、計算化学的に明らかにすることが出来た。この成果は、ここで取り上げた UiO-66 に留まらず、実験的な情報が乏しい場合の MOFs の化学へのアプローチの一つとして、今後、周辺分野で活用されると期待される。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

電子状態理論計算化学は科学分野で重要性を増している手法である。これまで、単一分子の計算化学が中心であったが、本研究をきっかけにして、無限系についても高精度の電子状態計算により実験では得られない情報が得られ、実験結果と相補的に無限系、固体系の物質科学を進展させることが可能となった。この成果は、最近の基礎科学と応用分野で重要な「分子材料の基礎と応用」に直接、寄与できる重要なものであると考える。

実際に、UiO-66 による二酸化炭素の捕獲が実験分野で行われており、UiO-66 の水に対する安定性から現実的に二酸化炭素捕獲に応用できるのではないかと期待されている。しかし、実際に二酸化炭素の MOFs への吸着は弱いと、実験的な知見は乏しい。本研究で得られた、二酸化炭素の吸着位置、吸着エネルギー、NMR の化学シフトとの相関は、二酸化炭素吸着材の発展に、寄与できるものであり、現在、大きな問題となっている地球温暖化問題の解決にも資するものである。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取り組み、成果)

日常的な研究打ち合わせの他に、共同研究の一環として、公開の日本ーノルウェージョイントシンポジウムを毎年度1回開催したが、毎回、若手研究者を招待し、若手研究者の国際的なプレゼンスの向上に取り組んだ。さらに、若手研究者を積極的に国際共同研究に参加するように求め、国際共同研究の経験を積むように企画・実行した。

同時に、理論化学者は、理論化学に閉じこもる傾向があり、将来的な発展を妨げている状況が散見されることから、実験化学者と理論化学者との交流を積極的に行い、分野を広い目で見ると経験が積むよう促した。そのため、実験化学分野での第一人者である数名の錯体超分子化学の研究者との積極的な交流を行った。

理論化学分野の中でも、世代間をまたがる交流により、若手研究者が自分の研究領域を俯瞰し、その位置づけを正しく理解でき、今後の正しい方向への発展に結びつくことが出来るような交流の機会を設けた。

(6)将来発展可能性(本研究交流事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

本事業がノルウェー側も大きく刺激し、ノルウェーのオスロ大学では長期的、計画的な日本との交流を継続するために、我が国の分子科学研究所、京都大学、理化学研究所をパートナーとして、電子状態理論化学研究に関する教育・研究計画を策定し、昨年度、ノルウェーの文部科学省に提出したが、採択には至らなかった。本年度は、その計画をさらに充実させて、提出した。

この予算措置が採択されれば、大きな額の予算措置が可能となることから、我が国とノルウェーとの間で、物質科学で重要な研究対象である複雑・複合物質に関する理論化学研究が大きく発展する。

採択されなかった場合も、Zoom などの手法を用いて、オスロ大学 Hylleraas Centre と研究交流を発展させ、双方の長所を生かした計算化学プログラムの開発とその応用などの、基礎と応用に関する理論化学研究体制を発展させることが可能である。

(7)その他(上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記述してください)

例:大学間協定の締結、他事業への展開、受賞、産業財産権の出願・取得など

本研究がきっかけとなって、オスロ大学 Hylleraas Centre と京都大学福井謙一記念研究センターは、すでに締結されている京都大学とオスロ大学は大学間協定を一層、強くするために、協議を進めている。

また、本研究の成果も考慮され、参加者の榊茂好(京大特任教授)は2019年度、錯体化学功績賞を受賞した。