

# 令和元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

### —分子組織化学の学術動向と学術振興方策—

君塚 信夫 (九州大学大学院 工学研究院・主幹教授)

本調査研究においては、光の有効活用技術に関連して、励起三重項状態の有効利用に関する研究動向を調査した。太陽光の大部分を占める低エネルギーの近赤外光を、高エネルギーの青色光へ変換する技術は、光化学反応や光触媒反応への応用をはかる上で極めて重要である。近赤外光から青色光への大きなアンチストークスシフトを実現することは容易でなく、TTA-UCの各素過程 (ISC、TET、TTA) において発生するエネルギー損失を最小限にすることが必要となる。近赤外光の三重項増感剤としては、量子ドットやペロブスカイトナノ粒子が用いられている (M. L. Tang, C. J. Bardeen et al., *Nano Lett.*, 2015, 15, 5552., M. A. Baldo, *Nature Photon*, 2016, 10, 31. L. Nienhaus, *Matter*, 2019, 1, 705)。一方、本研究者ら (*J. Am. Chem. Soc.*, 2016, 138, 8702)、Liuら (*Dalton Trans.*, 2019, 48, 11763) によって、Singlet-Triplet (S-T) 吸収を示す重金属錯体を三重項増感剤 (ドナー) として利用し、ISCに伴うエネルギー損失を最小限に抑制するアプローチによって、近赤外光を励起光とする TTA-UC が達成されている。Akshayらのグループは、白金錯体 (PtTPBP) をドナー、TIPS-Ac をアクセプターとして用い、波長 785 nm から 475 nm へ 1.03 eV のアンチストークスシフトを有する近赤外—青 TTA-UC を報告している (A. Rao et al., *ACS Materials Lett.*, 2019, 1, 660)。このように、近年、近赤外励起型ドナーが開発されており、適切なエネルギー準位を有するアクセプターを組み合わせれば、大きなアンチストークスシフトを有する近赤外—青 TTA-UC を実現することができる。今後は、より低強度の励起光で駆動する近赤外光のフォトン・アップコンバージョンを実現することが重要である。

TTA-UCの科学は、有機ELにおける励起三重項—励起一重項のダイナミクスと密接に関連して展開しており、Adachiらによる熱活性化遅延蛍光 (TADF) が応用されている。今後注目されるのが、高次の三重項 (Tn) から一重項 (Sm) への逆項間差 (RISC) である。励起状態の局在励起状態

(LE) 性と電荷移動状態 (CT) 性を利用した “hot excitation” 機構や、分子の対称性を制御することによる RISC の促進が有効な戦略として示されつつあり (Y. Ma et al., *Adv. Mater.* 2019, 31, 1807388)、分子組織系におけるエネルギーランドスケープの自在制御技術が、今後のこれらの展開を握るものと考えられる。

## 化学 (特に有機化学) 分野にかかる学術研究動向に

### 関する調査研究及び学術振興方策に関する調査研究

#### —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、有機化合物を合成する方法論の開発およびその方法論を活かして、新たな化合物を合成することを目指した研究領域であり、その対象は、医薬、農薬から、機能性材料まで多岐に渡っている。以上を踏まえ、2019年5月にスイスで開催された Bürgenstock Conference on Stereochemistry に出席した。有機化学を中心として、生化学、ケミカルバイオロジー、機能性分子科学まで、幅広い化学の分野を含む権威ある国際会議である。Erick Jacobsen (ハーバード大学、米国) は、キラルな水素結合供与体を不斉触媒として用いた、様々な不斉触媒反応を紹介した。光反応および有機分子触媒を用いた研究で世界を牽引している Paolo Melchiorre (ICIQ、スペイン) は、光反応の歴史から始まり、光還元触媒を用いない、EDA 錯体を用いた、不斉触媒反応の最新の成果について講演した。Abigail Doyle (プリンストン大学、米国) は、Ni 錯体を用いた様々なカップリング反応の開発について講演し、特に光還元触媒を用いた新たな展開についても紹介した。Tobias Ritter (マックスプランク研究所、ドイツ) は、精力的に取り組んでいる late stage functionalization についての最新の成果、19F-PET の医療への展開までを紹介した。若手の研究者が新しい分野を切り開いていくことを実感できた。

また、フランスのレンヌ大学を訪問してセミナーを行うとともに、有機化学分野の研究者、大学院生と議論した。フランスは競争的な研究費を獲得するのは容易ではない

## 令和元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)

が、共通で用いる基本的な測定機器については、大学が整備し専任の職員が管理している。欧米の多くの大学は、そのような仕組みがうまく機能しているが、一方、日本は、大学の予算が削減されているため、科研費を用いる必要がある。科学技術を発展させるためには、科研費のみならず、大学への予算の増額が必要であろう。

### 生物分子科学分野に関する学術研究動向—生体膜と脂質の先端的研究について

村田 道雄(大阪大学大学院理学研究科・教授)

標記の学術研究動向について調査したので、概要を以下に述べる。国内においては、天然有機化合物討論会に参加し、また、研究集会を開催して、情報交換を行った。さらに、海外においては米国生物物理学会などにおいて学術動向調査を行った。生体膜などの細胞内を区切る構造物については、その重要性から多くの分野で研究されており、徐々に理解が進んできた。生命科学の先端を切り開いてきた遺伝子やタンパク質と異なり、脂質分子の集合体としての生体膜については研究手法が発展途上であり、特に非平衡の分子集合体を扱う点で他の分野とは趣を異にする。したがって、物理化学的な研究手法の開発が重要な分野であるともいえる。

生命科学と化学の境界領域における学術動向として、特に印象に残ったトピックは細胞内に存在する三次元分子集合体であった。例えば、プリンストン大学の Brangwynne 教授は脂質膜で区切られていない細胞内領域(例えばP顆粒や核小体)について生物物理的研究を行っており、その生成機構や生命機能との関連について優れた研究成果を挙げている。二次元の膜で区切られた画分であるゴルジ体やミトコンドリアなどとは異なり、三次元の液体の相分離によって形成されたこれらの領域については、その消長や周囲の領域との物質交換においてより多様な機能を発揮できると考えられる。細胞機能を理解する上で新たな視点を与えるものであると言える。また、生物物理学会では、生体膜のモデルとして用いられている非対称膜についてのシンポジウムが開催されており、生化学的および計算科

学的研究において先端的研究成果が発表されていた。例えば、膜タンパク質の分子動力学計算においては、脂質を精密に再現した状態でのシミュレーションが可能となり、脂質のフリップ・フロップを司るタンパク質を含めて、実験で直接観測することが困難であった脂質との相互作用が再現できるようになりつつある。

さらに、膜脂質とタンパク質の相互作用について、主に国内の研究者による小規模な研究集会を高知大学・杉山成教授と共済し、従来の単結晶X線回折法の新しい展開や、クライオ電子顕微鏡による高分解能構造解析技術が紹介された。これらの新技術は、化学・生物融合領域においても影響を与えており、今後、生体膜研究にブレークスルーをもたらす可能性が示された。

### 無機材料, エネルギー関連化学分野に関する学術研究動向—無機ナノ材料および蓄電デバイス材料開発の新たな潮流—

森口 勇(長崎大学大学院工学研究科・教授)

電気化学や電池, 吸着, 炭素材料等をベースにした国内外の学術集会において, ナノ多孔材料およびエネルギー関連材料を中心とした学術研究動向を調査した。

ナノ多孔材料については, 活性炭やカーボンナノチューブ等のカーボン多孔材料の吸着・分離, 触媒, 電気化学機能等に関する研究が活発であり, 特にCO<sub>2</sub>の吸着分離や蓄電デバイス電極への応用研究が近年増加している。Metal Organic Framework (MOF)に関する研究は変わらず盛んであるが, ガス吸着・分離材料や触媒, 電気化学機能材料への応用に関する研究も増えてきている。

エネルギーデバイス関連では, キャパシタや電池等デバイスおよび関連材料の開発研究が活発に行われている。二次電池関連研究では, 元素戦略の観点より, 特にNaイオン電池に関する学術論文発表や特許がこの5年間で急増し, 活発化している。Liイオン電池そのものの研究は継続的に活発に行われているが, 発火の危険性がない安全性向上の観点より, 従来の有機電解液系電池から全固体型電池の開発研究へシフトしつつある。全固体型電池に関する学術論

## 令和元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)

文発表や特許もこの5年間で急増し、特に、高イオン伝導性を有する硫化物系固体電解質を用いた高容量かつ安定な全固体型電池の開発研究が活発化している。また一方で、高濃度水系電解液のLiイオン電池等への応用に関する研究が近年注目を集めている。高エネルギー密度電池の開発の観点では、Li-S電池や空気電池やコンバージョン反応や合金系反応を活用した大容量電池電極開発が精力的に行われているが、特にLi-S電池に関する学術論文発表や特許が急増している。

キャパシタ関連の研究では、高エネルギー密度化の観点より、Liイオンキャパシタに関する研究が特に活発に行われている。

### 機能物性化学と薄膜・表面界面物性分野に関する学術研究動向 -創エネルギーと省エネルギーを支えるサイエンス-

大西 洋 (神戸大学大学院理学研究科・教授)

機能物性化学と薄膜・表面界面物性の研究をできるだけ広くとらえて、人類全体の課題である創エネルギーと省エネルギーを支えるサイエンスの動向を調査した。典型例として人工光合成光触媒と固液潤滑界面の分子論的計測評価に着目し、学術論文として発表された研究を収集してデータベース(インターネットにて公開注)を増補改定した。収集した研究成果を分析したところ、物質材料の分析からデバイスの分析にパラダイムシフトしつつある計測評価技術を活用して、エンジニアリングを支援すると同時に、新しく深いサイエンスを見いだしていく研究スタイルの重要性がいよいよ高まっていることがわかった。

一方で、先端的な計測評価技術は年ごとに進歩しているが、計測対象をオリジナルと寸分違わない正確さで計測空間内に再現して(いわばクローニングして)満足する傾向が強まっている。サイエンスにおける計測評価は現象を理解するための手段である。その計測結果をどう利用して新たな理解に至るのかまでをパッケージとして立案実施することが学術研究者に求められている。民間企業でいえば技術だけでなく技術営業までをカバーする視点を持つこ

とは、学術研究者が新しく深いサイエンスを探求することと決して矛盾しない。

表面界面や固体触媒を専門とするヨーロッパ諸国や中国の研究者たちにインタビューしたところ、日本国内で注目されている若手研究者や、イノベーションの旗手としてもはやされている研究成果が、実験であっても理論であっても海外で驚くほど知られていないことがわかった。サイエンスに立脚したイノベーションを興す、あるいは、イノベーションから新しいサイエンス紡ぎ出すという意識を、我が国の研究者はより明示的にもったうえで、世界へ向けて上手に発信していく工夫が必要である。科学研究費の枠組みであれば、新設した国際共同研究強化(A)(B)が、国をまたぐ研究者人脈の形成に資することを願う。

註 光触媒材料データベース <http://www.edu.kobe-u.ac.jp/sci-onishi/Outcomes/natao3.html>

固液界面データベース <http://www.edu.kobe-u.ac.jp/sci-onishi/Outcomes/forcecurves.html>

### 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生物ドメインを問わず増加の一途を辿っている。またメタゲノム解析の件数がそれら以上に大きく増加しており、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。塩基配列決定技術の発展により、細胞内の全RNA量の定量的解析(RNA-seq解析)も可能となり、広く普及している。これらの解析により、特定の細胞(群)の多様な条件下における個々の遺伝子の発現状況を比較・把握することが可能となり、遺

## 令和元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)

伝子の機能同定や形質への寄与に関する情報が得られる。RNA seq 情報の蓄積にとまない、これらを集積・提供するためのデータベースも各国で設立されている。

バイオテクノロジー分野、中でも酵素工学分野においてはゲノム情報から出発した enzyme discovery のアプローチが増加している。例えば特定酵素の superfamily 構成員の配列情報を比較・分類することにより、機能解析が進んでいる酵素のグループ、全く解析されていないグループなどが浮かび上がり、後者に焦点を当てることにより、新しい特性を示す酵素が得られている。このようなアプローチは既存酵素と異なる基質特異性や立体選択性を示す酵素の同定に今後多用されることが予想され、蓄積しているゲノム情報の有効な利用法の一つであると考えられる。

また、タンパク質の立体構造解析については、従来から多用されている X 線結晶解析により明らかにされた構造の件数は 1990-2010 年の間に急速に増加し、現在も、最も多く利用されている。様々な技術革新により、構造解析に必要な結晶サイズの縮小、分解能の向上などが達成されている。核磁気共鳴による構造決定は 1990 年頃から報告され、2010 年頃までに広く普及し、溶液におけるタンパク質の構造情報が得られる点で注目されている。一方で、近年その構造解析件数が急速に増加している手法はクライオ電子顕微鏡によるタンパク質の構造解析である。本法を利用することにより、いままで結晶化が困難であった巨大複合体の立体構造解明も可能となり、数多くの報告がなされている。これらの手法から得られた知見により生体分子機能の化学的理解が大きく前進していると実感される。

### 機能物性化学関連分野に関する学術研究動向 - 光、熱とエネルギーの有効利用に向けた超分子機能化学における新潮流に関する研究

河合 壯 (奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 物質創成科学領域・教授)

有機機能材料分野においては、分子や高分子など炭素原子を骨格とする材料の機能物性と、新材料開発の基盤となる炭素系材料に固有の学理の深化が探求されている。中でも

光物性は有機機能材料の重要な研究ターゲットとなり、応用面においては有機電界発光素子、液晶やエレクトロクロミックなどを含む表示素子、有機太陽電池などのエネルギー変換およびフォトポリマーや光レジスト剤のような製造プロセスなど多くの産業・技術分野の基盤となっている。今年度の動向調査では、アジアの中でも成長著しい、インドネシアにて開催された“12th International Symposium on Modern Optics and Its Applications (ISM OA) 2019” および“The 8th International Conference of the Indonesian Chemical Society (The 8th ICICS 2019)”を調査対象に選定し光機能有機材料に関連した研究分野の最新の潮流を調査した。インドネシアは人口が多く、大学などでの研究活動も活発化している。社会的なインパクトを目指した研究ターゲットが明確であることとともに、先端研究をフォローアップし新規研究にアプローチしようとの研究戦略が明確であった。一方、フランスで開催された、International Symposium on Organic Photochromism, ISOP2019 に参加し、調査活動を行った。有機フォトクロミック分子を取り扱う ISOP 国際会議では、光反応により分子構造が可逆に変化するフォトクロミック分子を中心に、光記録、センシング、エネルギー変換、光加工、OLED などの新展開を目指す研究者約 280 名が 18 か国から参加し、関連領域における研究成果に関して、活発な情報交換を行った。

### 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)

光機能を有する金属錯体はディスプレイなどの発光材料分野や新しい光化学反応を行う光触媒分野だけでなく、励起状態を解明する光物理過程の研究でも多く報告されている。有機機能材料および無機・錯体化学分野に関する学術研究動向を行うにあたり、今回は有機分子特有のキラル構造と分子集積構造に着目し、金属錯体の光機能の中でも近年注目されている「キラル機能」と「結晶構造機能」に

## 令和元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)

ついでに動向調査を行なった。

「キラル機能」に関しては、これまでキラル構造を有する金属錯体の円二色性スペクトル(CDスペクトル)を用いた構造解析が行われてきた。大学内で使用できる「Web of Science」を用いてキラル金属錯体の研究動向調査を行った結果、近年ではキラル金属錯体からの円偏光発光(CPLスペクトル)に関する研究が多く報告されていることがわかった。特に、希土類錯体の異方性因子は遷移金属錯体に比べて100倍程度の大きな値を示すことから、近年の金属錯体の円偏光に関する研究のほとんどは希土類錯体に集中している。近年では希土類錯体の集積体における円偏光機能について注目も集まっており、この分野は今後益々進展するものと考えられる。

「結晶構造機能」に関しては、結晶構造変化する様々な発光性金属錯体および結晶構造変化を観測する計測系が大きく進展している。近年の研究動向では、構造変化を詳細に解析するだけでなく、構造変化に伴う光や電子機能変化に関する計測系が発展している。新しい機能物質と計測・評価システムの発展は表裏一体であり、錯体が会合した「集積体」に研究の興味が移りつつある。

以上、単核の金属錯体に加えて金属錯体集積体の機能に潮流が変化してきていることがわかった。また、学会や研究会などの学術調査により、錯体光化学の分野は発光や太陽電池のような応用研究が活発に研究されていることがわかった。このように、錯体の学術研究から固体機能へと研究動向がシフトしつつあると考えられる。

### 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)

本調査研究においては、近年進展著しい無機系2次元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。

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、酸化物、水酸化物に代表される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。

無機ナノシートの多くは、層状化合物の化学的剥離により合成されており、導電性、半導体性、誘電性、磁性など、多彩な機能性ナノシートが開発されている。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。ボトムアップ手法では、自在な組成、構造設計が可能であり、非層状の酸化物や金属ナノシートの合成も可能となる。こうしたボトムアップ合成は、報告例も限られており、また構造制御が困難という課題もあるが、各種無機材料系への適用による今後の発展が期待される。

ナノシートは高キャリア移動度、低抵抗性、柔軟性、透明性、高耐熱など、従来のバルク、薄膜とは異なる機能の発現が期待され、次世代の電子材料、環境・エネルギー材料への応用が期待されている。無機ナノシートでは、水溶液プロセスを利用した人工超格子的アプローチによる機能開発、デバイス応用が進められており、透明伝導膜、誘電キャパシタ、人工強誘電体、マルチフェロイック材料、リチウム電池、光電変換素子、人工アクチュエータ材料など多彩な機能デザインや応用が示されている。こうした無機ナノシートの機能開発の研究は、グラフェンと比較すると開発途上と言えるが、その一方で、酸化物などは、超伝導、強誘電性、高誘電性、磁性など機能の宝庫であり、未開拓といえる無機ナノシートには新しい機能や Beyond グラフェンともいえる逸材が潜んでいるものと期待される。

### 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

## 令和元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)

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や、それらを連結させた擬似的な分子としての会合体の構築が繰り返されている。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。

Atomically Precise Nanochemistry に関する動向調査のために、本年度には、下記の国際学会に招待講演者あるいは企画者として参加し、情報の発信、収集、および情報を行った。中国で開催された 3 つの国際会議（ChinaNano2019、Asian Symposium on Nanoscience and Nanotechnology (ASNANO)、International Symposium on Monolayer Protected Clusters (ISMPC19)) において、招待講演を行った。これらの会議を通して、アジア全般でのナノサイエンス・ナノテクノロジーの目覚ましい進展が実感できた。特に、金属クラスターの精密合成や単結晶 X 線構造解析に関しては、中国の寄与が世界を席巻している現状を強く認識した。また、International Workshop on Designer Nanocluster Materials - From Gas Phase to Condensed Phase -, 及び Symposium on Size Selected Clusters 2020 において、招待講演を行った。これらの会議の参加者の多くは、真空中に孤立したナノクラスターに関する欧米の物理研究者であるが、クラスターの物質科学・材料科学への展開や、新しい評価方法の導入などに向けた新しい潮流がはっきりと感じられた。一方、Toward Atomic Precision in Nanochemistry: From Synthesis to Function と題する国際会議 Gordon Research Conference に、vice chair 及び招待講演者として参加した。錯体化学、イメージング、触媒などの周辺分野における原子精度の化学の重要性や、電子顕微鏡などの先進的なツールの開発の必要性を共有した。

### 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（九州大学先導物質化学研究所・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。有機合成化学関連で最も中心的な国内学会である有機合成化学シンポジウムに関しては第 115 回（2019 年 6 月、仙台）と第 116 回（2019 年 10 月、東京）の 2 回に参加した。これらのシンポジウムでは素反応の開発、不斉合成を含む立体制御法の開発、天然物の全合成など多岐に渡る課題に関して高水準の研究成果が多数報告された（第 115 回シンポジウム：口頭発表 36 件、ポスター発表 66 件、第 116 回シンポジウム：口頭発表 40 件、ポスター発表 12 件）。また受賞講演として、長澤和夫氏（東農工大）によるグアニジンアルカロイド類の全合成、斎藤進氏（名大）による精密錯体触媒を用いるカルボン酸誘導体の水素化法、大嶋孝志氏（九大）による官能基標的触媒を用いた複雑系分子の直接の変換法に関する研究成果が報告された。これら複雑構造天然物の合成、新規な素反応・触媒系の開発などは、世界で活発に行われている研究分野である。その中であって各氏の研究水準の高さは、日本の有機合成化学研究が世界を先導していることを示す好例である。

また関連分野の学会として、シンポジウム モレキュラーキラリティー2019（2019 年 6 月、金沢）、27th International Society of Heterocyclic Chemistry Congress（2019 年 9 月、京都）、第 23 回ケイ素化学協会シンポジウム（2019 年 11 月、宮崎）、The 14th International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia (ICCOCA-14)（2019 年 9 月、ニセコ）などに参加し、それぞれ、不斉合成法やキラル構造有機化学的研究、多様なヘテロ環化合物の精密合成、有機ケイ素分子の合成に関する研究、アジア諸国に於ける有機合成化学研究の最新の研究成果を学び、研究動向に関する知見を得た。