

令和2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— 触媒化学・ナノ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)

本調査研究担当者は、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)プログラム戦略推進室(プロ戦室)特任研究員として、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た経験が有る。また、同じくJST さきがけ研究「革新的触媒」や創発的研究支援事業の研究総括、POとして、触媒化学分野の動向分析も行っている実績がある。この実績を元に、調査を行った。

対象の国際会議は、大規模な年次総会や、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。重点的に対象とする分野は「触媒化学」と「ナノ化学」として、調査研究担当者がこれまで継続的に参加している「錯体化学」も含めて、動向調査を行った。また、研究力強化に向けていま学界に何をめとめるか、基礎研究か応用研究か、について取り纏めを行った。

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、触媒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)も務めており、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。インフォマティクスの活用が進んでいるとのことである。また、日欧触媒ワークショップ(@TUM)にオンライン参加して、欧州のトレンドを調査した。低級アルカンからの基礎化学品への転換等が進捗しているようだ。さらに、大きな新興領域になりつつある「ハイエントロピー材料」の国際会議(ICHEM2020@バイロイト)に参加し、特にナノ化学分野、触媒化学分野での展開に注目して動向調査を行った。ウェットケミストリーによるハイエントロピーナノ材料に関しては本調査研究担当者の研究室が最も世界をリードしている。また、International Co

nference on Advances in Molecular Materials Research(インド)にオンライン参加した。日本よりも、物理学と化学の融合が図られているようであった。インドは応用科学よりも基礎科学に重心があるようである。化学分野における産学連携は進んでいないようである。

研究力強化に向けての方策について、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・物質の発見ができる研究者を育成すべき、という趣旨の報告を行った。

機能物性化学関連分野に関する学術研究動向—光子、 熱およびエネルギーの有効利用に向けた超分子機能 化学における研究動向に関する研究

河合 壯(国立大学法人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系物質からなる材料の電子的、光学的、力学的、熱的諸物性を機能物性として探求するとともに、合成方法、構造および機能物性の相関を解明し、高性能あるいは新機能を有する新材料開発の基盤となる学理の構築が進められてきている。なか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ってお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レジスト剤のような製造プロセスなどの技術分野の基盤となってきた。従来は溶液や高分子媒質中に単一分子や孤立分子として分散している分子のふるまいが検討されてきた。一方で、近年は機能性分子の集積化によって新機能材料を開拓しこれまでの課題を克服しようとする研究が進められている。例えば光励起状態の分子間には本質的に強い分子間相互作用が介在することから、多数分子の集団的な励起状態のふるまいを積極的に利用する超分子光機能化学に関する研究が進められている。

分子の光機能性における集団効果としては、分子会合状

令和2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)

態における励起子間相互作用に基づく発光波長の長波長化が従来から知られてきた。また凝集に伴う発光強度の低下や、発光増強も検討されてきた。近年、凝集状態における顕著な光学機能性の発現としてキラル分子の凝集に伴う円偏光発光の増強効果が報告されている。これらの視点に関連して、フランスの高等教育研究機関である ENS-ParisSaclay の RamiMetivier 博士、Clemence Allein 博士らが主催する共同 Web ワークショップに参加し調査活動を行った。実際に彼らの研究チームでは、力学応答性を有する分子固体発光材料を構築し、刺激応答に伴う分子凝集構造の変化を円偏光発光性の変化により検出している。これらの研究では超解像顕微鏡との組み合わせで局所的な力学現象を検出するツールとしても興味深い。ノーベル化学賞として注目を集めた分子マシンなどに関連して世界的に重要な研究となると期待される。

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)

金属イオンと有機分子で構成される「配位高分子」に関する研究が近年盛んに行われている。この配位高分子は従来の研究対象である「錯体」を高分子へと拡張させたものである。今回は配位高分子に関する学術研究動向の調査を行った。

1920-2020 年における「Web of Science」を用いた調査結果では「coordination polymer (配位高分子): 53, 172 報」および「MOF (金属有機骨格): 21, 629 報」が報告されている。配位高分子の研究は 2000 年ごろから増加し、2005 年から一定の論文報告数となることがわかった。これに対し、2000 年に Yaghi が報告した MOF は 2010 年ごろから急速に論文数が増加し、2019 年には配位高分子の論文数より多くなることがわかった。

配位高分子を構成する元素については、「Cu(19%)」「Co(18%)」「Zn(15%)」「Cd(12%)」となっていた。一方、配位高分子の研究分野に注目すると、構造(structure: 69%)

および合成・反応(react*: 32%)に関するものが多かった。機能に関しては、磁性(magnet*: 23%)、触媒(cataly*: 13%)、吸着(adsorp*: 12%)、発光(emission: 10%)、センシング(sens*: 8%)であった。

配位高分子の研究論文数が急速に増加し始めた 2000 年からの配位高分子の機能に関しての年代別研究動向調査を行った。その結果、磁性研究(magnet*)は 2004 年から減少傾向にあり、センシング研究(sens*)の論文は 2019 年に磁性研究の論文数よりも上回ることがわかった。この配位高分子のセンシング研究に関して、ここで使用元素の分布を解析した結果、配位高分子の構成元素として多く用いられる「Cu, Co, Zn, Cd」に加えて、希土類元素である「Eu」を用いた論文が多く報告されていることがわかった。つまり、希土類元素が配位高分子の近年研究では極めて重要な位置を占めていることが本解析結果からわかった。

錯体光化学の分野は発光や太陽電池のような「光機能」が活発に研究され、配位高分子の研究論文はセンシング機能が特に注目されていることがわかった。昨年調査した「錯体の学術研究から固体機能へと研究動向がシフト」の研究動向は本年の学術調査および配位高分子に関するデータ解析からも明らかすることができた。

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 (東海国立大学機構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

令和2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)

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。また、無機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、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。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。モアレ物質の可能性は、ねじれ2層グラフェンにおける超伝導の発見以降、電子相制御、新材料開発の新しい手法として注目され、2次元材料系の一大トピックスとして展開している。モアレ物質は遷移金属カルコゲナイドなどの無機系でも注目を集めており、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し、量子デバイスへの応用が期待されている。また、酸化物ナノシートでは、0、1次元材料などと組み合わせた高次機能材料の創製が進んでおり、単純な材料の足し合わせや整数次元で説明できない「超次元」とも呼べる機能が発現することが明らかになっている。こうした低次元ナノ材料の積層・接合などは、これまで個別に研究が行われてきたが、これらを体系的にとらえることで、新たな次元性機能創出の可能性が広がっている。