

## 【新学術領域研究（研究領域提案型）】

### 理工系



#### 研究領域名 感応性化学種が拓く新物質科学

広島大学・大学院理学研究科・教授

やまもとようすけ  
山本 陽介

#### 【本領域の目的】

元素の特性に着目した物質創製化学である「元素化学」の発展はめざましく、従来は不安定で合成が困難とされてきた分子性化合物が次々と単離され、それらの構造と性質が詳しく検討されるようになった。高周期元素は広がりが大きくエネルギー準位の高い原子価軌道をもつため、炭素や窒素などの第2周期元素と比べてHOMO/LUMOギャップのはるかに小さな化合物を形成する。そのため、それらの化合物は外場からの物理的・化学的刺激に鋭敏に反応して物質機能の要である高エネルギー化学種に容易に変化する「感応性化学種」であり、機能の宝庫と期待される化合物群である。しかし、その高い感応性に起因して一般に極めて不安定であるため、高機能性物質として利用するためには効果的な安定化手法の開発が必須の要件であった。近年の元素化学分野における最大の進展は、立体保護基による速度論的安定化や、配位子による複数原子の空間配列制御など、機能発現に関わる構造要素を高度に保持したまま分子を安定化する精緻な分子デザイン法が大幅に発展したことにある。その成果は分子機能の開拓をめざす他分野の研究者にとっても大変魅力的なものであり、周辺分野にも影響を及ぼしはじめているが、これらの高い潜在能力が物質創製化学全般に波及し、有効に活用されているとは言い難い。これは、従来の元素化学研究が、有機元素化学など基礎有機化学の一部の分野に限定的であったためである。

そこで本領域では、機能性物質の創製研究において共通性の高い「感応性化学種」を研究コンセプトとして、近年の元素化学の研究成果に、物理有機化学、有機金属化学、錯体化学、触媒化学、生物化学、機能物質化学、物性化学、理論化学などの先導的研究者がもつ多様な研究観点と研究知見を融合し、真に独創的な機能性物質群を創造するための新学術基盤を構築する。

#### 【本領域の内容】

高周期典型元素は広がりが大きくエネルギー準位の高い原子価軌道をもつ。また、s軌道とp軌道のサイズ差が大きいため軌道混成を起しにくい。これらの元素特性は遷移元素との共通性が高く、両者の分子性化合物とそれらの複合型化合物について総合的観点から研究を展開することにより、個別研究では実現し得ない革新的な機能性物質を創出できる可能性がある。実際、高度な生命活動を担う酵素活性中心では、高周期典型元素と遷移元素が機能発現の根幹をなしている。以上の観点から、本領域では、高周期典型元素と遷移元素の分子性化合物を研究対象とし、それらの精密

制御法と機能の探究を通して、新反応・新物性・新触媒を開発するとともに、酵素反応機構の解明と人工酵素の開拓へと研究を展開する。そのため、標的とする感応性化学種の機能に基づき、本領域に以下の研究項目A01～A04を設けた。

A01 班 新反応開拓のための感応性化学種：高周期元素と酸素などの電気陰性度の高い元素との間に形成される分極率の高い結合を用いて、CO<sub>2</sub>などの不活性小分子の変換反応を開発する。高周期元素ラジカルの発生・制御法を開拓し、リビングラジカル重合などの有用反応に応用する。

A02 班 新物性創出のための感応性化学種：熱や光励起に鋭敏で優れた酸化還元特性をもつ高周期元素化合物やπ単結合化合物の精密デザイン法を探究し、磁性材料、電子輸送材料、発光材料、電池材料などへの応用を念頭に置いた機能性物質群を創出する。

A03 班 新触媒開発のための感応性化学種：高周期典型元素の低配位化合物がもつ反応基質との効果的な会合を担保する不飽和性と、反応基質との電子授受を容易にする電子的柔軟性を活かし、既存の概念にとらわれない新触媒を開発する。

A04 班 生体反応解明のための感応性化学種：高周期典型元素と遷移元素を活性中心にもつ酵素反応系を対象とし、最先端の構造生物化学と大規模量子化学計算を駆使して実在系に生成する感応性化学種の発見とそれらが受ける摂動メカニズムの解明に取り組む。

#### 【期待される成果と意義】

機能に優れた分子性化合物の創製は、化学が果たすべき最重要課題の一つである。本領域では、「感応性化学種」という明確な研究コンセプトと、先導的研究者の有機的連携がもたらす多様な研究観点を車の両輪として、緊迫するエネルギー・環境問題の解決に資する新反応・新物性・新機能を開拓し、豊かな人類社会の発展に貢献する。

#### 【キーワード】

感応性化学種：外場からの物理的・化学的刺激に鋭敏に反応して物質機能の要である高エネルギー化学種に容易に変化する化合物群

#### 【研究期間と研究経費】

平成24年度～28年度  
1,118,200千円