

1. 研究領域名：配位空間の化学—分子凝縮、ストレス、変換場の創成—

2. 研究期間：平成16年度～平成19年度

3. 領域代表者：北川 進（京都大学・大学院工学研究科・教授）

4. 領域代表者からの報告

(1) 研究領域の目的及び意義

本研究領域は、錯体化学、生物無機化学、触媒化学、電気化学、物性物理の研究グループを組織し、これまでの化学と物理の分野には無い、原子・分子の配列がつくる「空間」という新しい視点からの研究を展開する。空間構造の形成および機能を発現する上で配位結合が主要な役割を演ずる空間を「配位空間」と捉え、(1)ナノサイズの空間（ナノ空間）を分子レベルで精密制御する新しい合成手法を創出する。特に、空間内におこる未知の分子凝集、分子ストレス、分子活性化の諸現象に注目して研究を展開し、(2)多彩な新規「ナノスペース物質」を創製するとともに、(3)ナノ空間に展開する分子系に特有な磁氣的、誘電的性質および光科学的物性や反応性・触媒機能などを発現させ、「配位空間における新現象」を世界に先駆けて発見し、この空間に特有の法則を見出し、新しい空間の学問領域を築き上げることを目指す。さらに、(4)今後のナノサイエンス・テクノロジーの一翼をになう物質系を先駆的に開拓し、その合成技術を確認することを目的としている。

本研究領域では、上記の「配位空間」という新しい研究概念を日本で構築して、それを具現化した研究成果を生み出し、世界に発信することによって、世界的に新しい研究の潮流が生み出される意義を有する。

(2) 研究成果の概要

閉鎖配位空間物質、開放配位空間、柔軟配位空間、エネルギー操作配位空間を作る新しい物質系の創製を行った。具体的には、多孔性配位高分子が形成する「配位空間」が従来の多孔性材料（ゼオライト等）では実現できない随意設計可能な表面機能性、規則性、柔軟性等を有することを見出し、大量吸蔵、選択的分離、高効率触媒などの応用可能性を明らかにし、アセチレン濃縮、特異的な重合反応に成功した。世界最高性能高輝度放射光と精密電子密度解析法を利用した配位空間内ガス分子の精緻な構造解析に成功した。また界面逐次錯形成を利用した錯体ポリマー分子ワイヤの自在作製法を開発し、分子鎖内電子輸送機構を解明、さらに単一光源を用いる可逆な分子メモリ制御を達成した。さらに、金属蛋白質等に代表される柔軟配位空間の化学を展開し、アポフェリチン蛋白空間の内部表面と様々な金属イオンが配位結合した金属酵素の合成、構造解析を行い、触媒機能を達成した。またルベアン酸の銅錯体の発生期水素による水素吸蔵やプロトン伝導などの固体プロトニクスに関して、水素吸蔵に伴う非常に高い絶縁体から金属状態までの導電性変化、著しい相対湿度依存性と極めて高いプロトン伝導率を見出した。上記成果は、ガス吸蔵・分離等に関する次世代先端機能材料や、将来的な単分子デバイス、触媒、選択的変換、エネルギー変換などへの応用系に発展すると期待できる。以上の成果より「配位空間」が新物質の創製研究において重要な概念として定着しつつある。

5. 審査部会における所見

A (研究領域の設定目的に照らして、十分な成果があった)

原子・分子が造り出す「空間」の中でも特に配位結合を基礎とした「配位空間」に注目し、新しい空間の学問領域開拓を進めることにより新物質系の創製に数多く成功する等、設定された多様な研究課題が十分に達成され、本研究領域の意義を大いに高めた。領域代表者が研究領域を適切に組織化し、さらに組織内、組織間の共同研究を積極的に推進することで領域全体としての広がりも成果として表出していること、併せて国内外に向け積極的に研究成果等の情報を発信する運営についても高く評価する。以上のことから、特定領域研究として大きな成果を上げたと判断する。また、本研究領域は環境、エネルギー、バイオ課題に関する分子の捕獲、貯蔵、変換を担う新材料として注目を浴びる等関連分野へのさらなる波及効果も多大であると期待する。