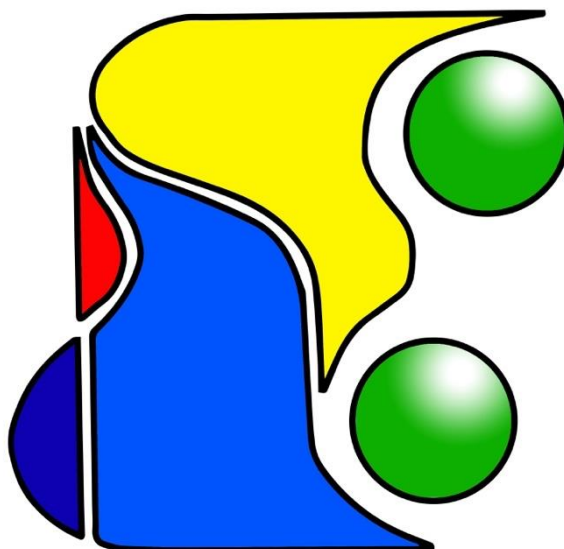


SPACC
先端錯体工学研究会

The Society of Pure and Applied Coordination Chemistry

News Letter (April, 2024)



SPACC ニュースレター
(2024 年 4 月号)

目次

1. 研究紹介

「錯体を用いた分子コンピュータの実現に向けたモデル計算」

工学院大学 教育推進機構 基礎・教養科
徳永 健

2. 2022 年度 先端錯体工学研究会奨励賞 受賞者 研究紹介

「先端錯体工学研究会奨励賞を受賞して

「Mist CVD 法による窒化物結晶成長」

工学院大学 先進工学部 応用物理学科
山口智広

3. 2023 年度 先端錯体工学研究会 学生研究奨励賞(竹田理化工業賞)

受賞者 研究紹介

「2023 年度 先端錯体工学研究会学生研究奨励賞を受賞して」

大阪市立大学大学院 理学研究科 物質分子系専攻
後期博士課程 3 年 藪根 夏希

4. 日本化学会第 104 春季年会 特別企画 開催報告

「機器分析が拓く次世代の医療技術」を企画して

東京医療保健大学 大学院医療保健学研究科
松村有里子

5. SPACC 年会費納入のお願いと入会のすすめ

6. 今後の行事予定及び事務局からのお知らせ

★賛助会員からのお知らせ

錯体を用いた分子コンピュータの実現に向けたモデル計算

工学院大学 教育推進機構 基礎・教養科

徳永 健

e-mail: tokunaga@cc.kogakuin.ac.jp

コンピュータに搭載されている中央演算処理装置（CPU）の性能は飛躍的に向上しているが、現在の電界効果トランジスタに基づくデバイスの性能は近く限界に到達すると言われている。その代替として様々なデバイスが提案されてきたが、我々はその1つである量子ドットセルオートマトン（QCA）に注目している。QCA[1]のアイデアは1993年にC. S. Lentによって考案された。4つの量子ドットでセルを作り、そこに2つのホール（または電子）を注入すると、電荷の反発によってエネルギーの縮退した2つの状態0,1が生成される（図1）。セルを複数組み合わせ、セル内およびセル間の相互作用によって状態0,1を切り替えることで論理演算を行うのがQCAである。例えば、図2は多数決回路である。入力セルA, B, Cの状態0,1の組み合わせは $2^3 = 8$ 通りある。電荷間の反発を考慮すると、演算セルXの状態は入力セルA, B, Cの多数決になる。この他に、QCAにはAND回路, OR回路, NOT回路などもある[2]。QCAはセル内の電子移動により状態0,1を切り替えて演算を行うため、セル間での電子移動は起こらない。このため、省エネや演算速度の向上が期待される。金属の量子ドットを用いたQCAの動作は実証されたが[3, 4]、常温ではセルの状態0,1が容易に入れ替わってしまうため、正常動作は極低温に限られた。この問題の解決のため、1つのセルを1つの分子で置き換えた分子QCA[5]がLentにより提案された。分子QCAは、理論上は常温で動作すると言われているが、まだ動作は実証されていない。このため、混合原子価錯体（図3）などを分子QCAの候補分子として、実験的・理論的に研究されてきた。本稿では、分子QCAに関する我々の理論的研究について解説する。

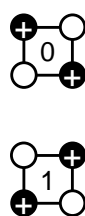


図1 セルの状態0,1

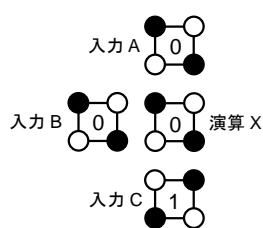


図2 QCA 多数決回路

A	B	C	X
0	0	0	0
0	0	1	0
0	1	0	0
0	1	1	1
1	0	0	0
1	0	1	1
1	1	0	1
1	1	1	1

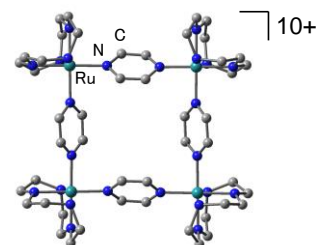


図3 分子QCAの候補の例

【分子内の信号伝達挙動】 [6, 7]

分子QCAの演算においては、分子内を伝わる信号の「信号強度」と「信号伝達速度」

が重要である。「信号強度」は入力に伴う分子内の分極に関係し、分子の近傍に架空の点電荷を置いて量子化学計算を行うことで明らかにすることができる。一方、「信号伝達速度」は、分極がどれくらいの時間で起こるかを表し、時間に依存する Schrödinger 方程式を用いて明らかにすることができる。図4は、Ru 二核錯体における、入力による信号伝達のイメージである。入力電荷が正から負にスイッチすることで、電子が右に移動する。

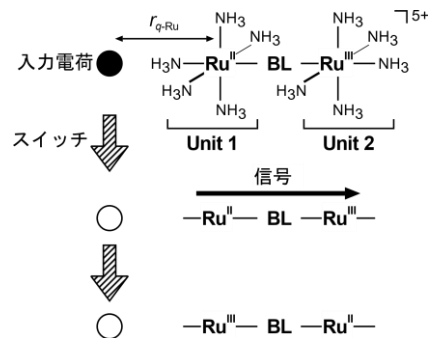


図4 Ru 二核錯体における信号伝達のイメージ

図5(a) は入力電荷の大きさと Ru 二核錯体の各部位の電荷 Q の関係、つまり分極の大きさを表す静的な結果である。図5(b) は信号伝達の動的なシミュレーション結果であり、1~2 fs でユニット間の電子移動が起こることが分かる [6]。

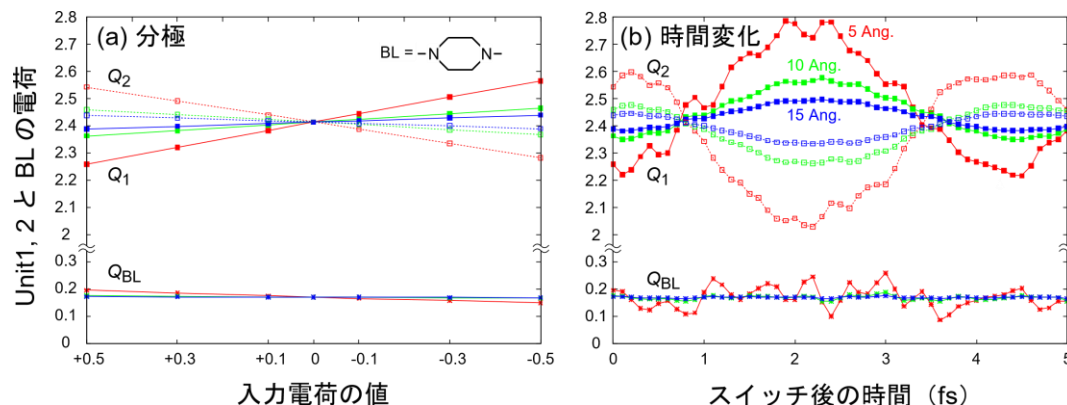


図5 (a) 入力電荷による錯体の分極、(b) 入力電荷を+0.5 から-0.5 に変化させたときの信号伝達の様子。色の違いは入力電荷と金属原子の距離 (r_{q-Ru}) の違いを表す。

信号強度や信号伝達速度は、金属・架橋配位子・錯体の価数などに依存する。詳細な説明は省略するが、理論的な考察から[6, 7]、入力電荷による分子軌道の歪みが大きいほど信号強度は大きく、分子の HOMO-LUMO ギャップが大きいほど信号伝達速度が速いことから、そのような性質をもつ分子や錯体が、分子 QCA に適している。

以上の静的・動的な議論は四核錯体にも適用できるが、これまでの静的な計算では入力 A, B, C による 8 つの入力パターンすべてで正しい多数決を与える四核錯体が見つかっていない、という重要な問題がある。多数の四核錯体について量子化学計算を行うには手間と時間がかかる。そこで、四核錯体の多数決回路としての動作を静的に簡便に予測するため、我々は簡易モデルを考案した(図6)。

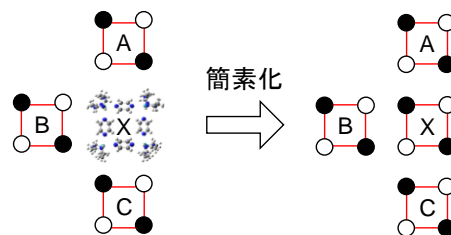


図6 Xセルの四核錯体の簡素化。金属原子の位置に点電荷を配置する。

【簡易モデル計算】 [8]

このモデルは、演算セル X に対応する錯体の金属原子の位置に点電荷を配置して、（量子化学ではなく）単純にクーロンの法則に基づくポテンシャルエネルギーから X セルの基底状態を簡便に見積もるものである。3種類のビフェロセニウム錯体（図7）について計算したところ、 $3 \times 8 = 24$ の入力パターンのうち 23 パターンで、簡易モデル計算と量子化学計算の基底状態が一致した [8, 9]。つまり、簡易モデル計算で多数決回路の静的な挙動を良い精度で予測できる。最終的には量子化学計算による検証も必要になるが、錯体の多数決回路としての静的な動作を即座に予測できるという点で、簡易モデルは強力なツールとなる。

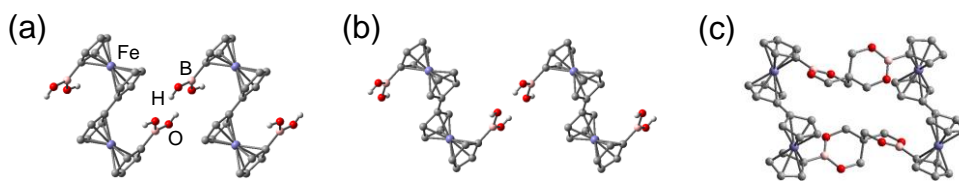


図7 3種類のビフェロセニウム錯体。(a) ビフェロセニウムジボロン酸ダイマー（中性状態）、(b) ビフェロセニウムジボロン酸ダイマー（二電子酸化状態）、(c) ビフェロセニウムジボロン酸エステル

【簡易モデル計算の応用】

簡易モデル計算は短時間でできるため、QCAセルの形状を様々に変化させて、多くのデータを得ることができる。図8は、セルの形状を角度 $\theta = 90^\circ \sim 87^\circ$ 、辺長 $r_1, r_2 = 1 \sim 11 \text{ \AA}$ で変化させた場合に、8つの入力パターンのうち正しい多数決を与えるパターンの数を示したものである。赤色の領域 (=8) がすべての入力パターンで正しい多数決を与える、つまり多数決回路として正常動作することを表す。従って、正方形に近く、辺長が 7 \AA 程度までの構造を有する分子が分子QCAとして期待できる。この解析方法は、分子の幾何学的な構造パラメータについて明確な設計指針を与えてくれる。今後は、得られた結果に基づき既存の錯体の中から分子QCA候補を探したり、正常動作が期待される錯体構造を実験研究者に提案していきたい。

現段階では簡易モデル計算は静的な計算のみなので、今後は時間的な要素を含めた動的な計算も行うことで、現実のデバイス動作により近い簡易モデル計算を行いたい。

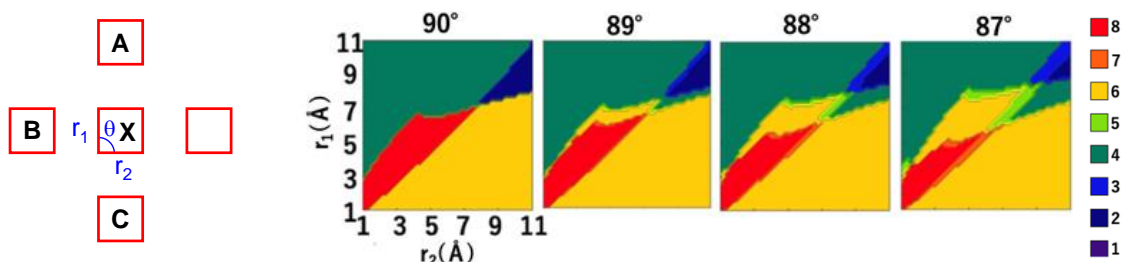


図8 様々なセル形状を用いた簡易モデル計算

【今後の課題と展望】

分子 QCA について理論化学的な立場から紹介した。分子 QCA 研究の興味深いところは、回路設計・分子設計・分子合成・分子操作・分子観測・理論計算など、化学・物理・電気電子などの様々な分野の基礎と応用が絡んでいる点である。近年も、新たな候補分子の提案[10]、電子と分子振動のカップリングを考慮した計算[11]が行われている。また、基板上の分子の観測[12]や、新しいセルの配置[13]など、盛んに研究が行われている。我々の簡易モデルを用いた解析でも興味深い結果が得られている。これらの研究が結びつき、分子 QCA による論理演算が実現されることに期待したい。

【謝辞】 研究遂行において共同研究でご協力頂きました田原圭志朗氏（香川大学創造工学部 准教授）と佐藤光史氏（工学院大学 名誉教授）、そして、計算を実行して頂いた工学院大学の卒業生の皆さんに厚く御礼申し上げます。

【参考文献】

- [1] C. S. Lent, P. D. Tougaw, W. Porod, and G. H. Bernstein, *Nanotechnology* **4**, 49 (1993).
- [2] 図2の多数決回路において、セルAの状態を0に固定すると、演算セルXの状態は入力BとCの状態の論理積になる。つまり、AND回路として働く。セルAの状態を1に固定すると、演算セルXの状態は入力BとCの状態の論理和になる。つまり、OR回路として働く。セルを単純に横に並べたものは、状態0または1をそのまま伝達するワイヤーとして働くが、ワイヤーのセルを途中で上または下にずらすと、状態が反転する。つまり、否定（NOT）回路として働く。このように、セルを様々な組み合わせで、演算に必要な論理回路を作成することができる。
- [3] A. O. Orlov, I. Amlani, G. H. Bernstein, C. S. Lent, and G. L. Snider, *Science* **277**, 928 (1997).
- [4] I. Amlani, A. O. Orlov, G. Toth, G. H. Bernstein, C. S. Lent, and G. L. Snider, *Science* **284**, 289 (1999).
- [5] C. S. Lent, *Science* **288**, 1597 (2000).
- [6] K. Tokunaga, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, 1474 (2009).
- [7] K. Tokunaga, *Cellular Automata* (Chapter 7), Intech, pp.153-176 (2011).
- [8] K. Tokunaga, F. Odate, D. Asami, K. Tahara, and M. Sato, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **94**, 397 (2021).
- [9] 簡易モデル計算では、Xセル中の電荷の配置を状態0,1など7種類に変えて、それぞれでエネルギーを計算し、最もエネルギーの低い電荷の配置を基底状態とする[8]。なお、3種類のビフェロセニウム錯体も、8つの入力パターンすべてで正しい多数決を与えるわけではない。
- [10] N. Montenegro-Pohlhammer, C. M. Palomino, and C. J. Calzado, *Inorg. Chem. Front.* **10**, 2484 (2023).
- [11] B. Tsukerblat, A. Palii, S. Zilberg, D. Korchagin, S. Aldoshin, and J. M. Clemente-Juan, *J. Chem. Phys.* **157**, 074308 (2022)
- [12] S. Mahapatra, J. F. Schultz, L. Li, X. Zhang, and N. Jiang, *J. Phys. Chem. C* **126**, 8734 (2022).
- [13] M. Repe and S. Koli, *Sci. Rep.* **14**, 190 (2024).

先端錯体工学研究会奨励賞を受賞して 「Mist CVD 法による窒化物結晶成長」

工学院大学 先進工学部 応用物理学科

山口智広

e-mail: t-yamaguchi@cc.kogakuin.ac.jp

はじめに

この度は栄えある 2022 年度先端錯体工学研究会奨励賞を賜ったこと、大変うれしく思います。会長の佐藤光史先生をはじめ、ご推薦頂きました工学院大学永井裕己先生、選考頂きました先生方に深く御礼申し上げます。本受賞に対し、2023 年 12 月 20～21 日に Virtual Conference として開催された The 28th International SPACC Symposium において、受賞講演を行わせて頂きました。

私は、学部時代に半導体結晶成長に出会い、以来、物理気相成長 (Physical Vapor Deposition: PVD) 法の 1 つである分子線エピタキシー (Molecular Beam Epitaxy: MBE) 法や、化学気相成長 (Chemical Vapor Deposition: CVD) 法の 1 つである有機金属気相成長法 (Metal Organic chemical vapor deposition: MOCVD) 法を用い、青色発光ダイオードなどに用いられる高品質な GaN や InN などの窒化物半導体の結晶成長を中心に研究を行ってきました。近年、気相成長法による窒化物半導体の結晶成長以外にも、新学際領域を開拓するため、液相成長法と気相成長法の間位置するミスト化学気相成長 (Mist CVD) 法を用いた Ga₂O₃ や In₂O₃ を中心とする酸化物半導体の結晶成長にも取り組んでいます。本受賞では、この Mist CVD 法を用いて窒化物半導体の 1 つである Cu₃N の結晶成長に成功したことを評価頂きました。

以下では、この Mist CVD 法による窒化物結晶成長について紹介させていただきます。

Mist CVD 法

Mist CVD 法は、装置が簡便で溶液を使用した非真空成膜技術であるにもかかわらず、高品質半導体単結晶を製作できる手法として、2000 年代後半に京都大学より広く報告されるようになった^[1-3]。また、高品質半導体結晶だけでなく、多結晶膜、アモルファス膜、絶縁膜、コーティング膜などニーズに応じた薄膜製作が可能である。

図 1 に一般的な Mist CVD の装置構成

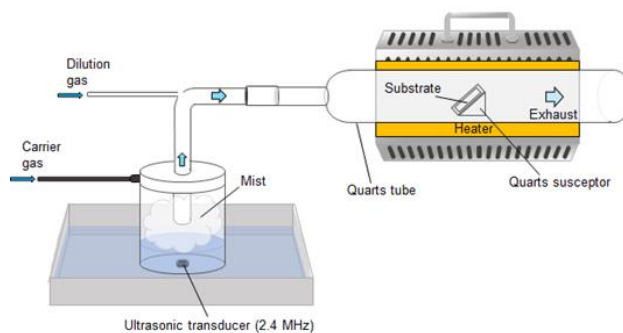


Fig. 1. Typical Mist CVD setup (Hot-wall horizontal-type system).

(図は Hot-wall 横型)を示す。Mist CVD では、まずアセチルアセトナート錯体などの金属原料を水やアルコール等に溶解させる。その原料溶液は超音波振動を用いて霧化され、キャリアガスを使用して反応炉に送られる。ミスト粒は数 μm 程度の直径サイズを持つが、反応炉内に設置された基板直上では分子レベルの CVD 反応を起こし、原子レベルで配列した結晶膜を作ることができる。水溶液からなるミストを原料とするため酸化膜成膜を得意としているが、本研究では窒化膜の 1 つである Cu_3N の成長に成功した。

Mist CVD 法を用いた Cu_3N エピタキシャル結晶成長^[4]

Cold-wall 縦型 Mist CVD 法を用い、(0001) $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板上に Cu_3N 膜を 30 分間成長させた。銅原料には、銅(II)アセチルアセトネート錯体を使用した。この銅原料を濃度 28%の NH_3 水溶液に溶解することにより銅原料溶液を作成した。この時、銅のモル濃度は 0.10 mol/L に固定した。2.4 MHz の超音波振動子を使用して銅原料溶液を霧化、窒素キャリアガスを用いて霧化されたミストを反応炉に輸送し、成長温度 250~500 $^\circ\text{C}$ にて成膜を行った。

図 2(a)に成長温度 250~500 $^\circ\text{C}$ にて(0001) $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板上に成膜したサンプルのスキャン範囲 20~80 $^\circ$ の X線回折(XRD) θ -2 θ 測定結果を示す。このスキャン範囲において確認できるピークは、基板の $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (*)に加え Cu_3N (●)および Cu (◆) のみであり、CuO または Cu_2O の酸化銅に対応する明瞭なピークは観察されなかった。図 1(b) は、35~55 $^\circ$ のショートスキャン範囲の結果を示している。250 $^\circ\text{C}$ および 300 $^\circ\text{C}$ で成長させたサンプルからは、(0006) Al_2O_3 および(002) Cu_3N の回折ピークのみが観察された。これは、成膜した Cu_3N が[001] Cu_3N //[0001] Al_2O_3 の配向関係を持っていることを示している。また、極点図測定より、 $\langle 100 \rangle \text{Cu}_3\text{N} // \langle 11\text{-}20 \rangle \text{Al}_2\text{O}_3$ もしくは $\langle 100 \rangle \text{Cu}_3\text{N} // \langle 10\text{-}10 \rangle \text{Al}_2\text{O}_3$ の面内方向の配向関係も制御された形で、 Cu_3N 膜のエピタキシャル成長が実現されたことを確認した。なお、350 $^\circ\text{C}$ および 400 $^\circ\text{C}$ で成長させたサンプルでは(111) Cu_3N の回折ピークが追加で現れ、500 $^\circ\text{C}$ で成長させたサンプルでは(002) Cu_3N と

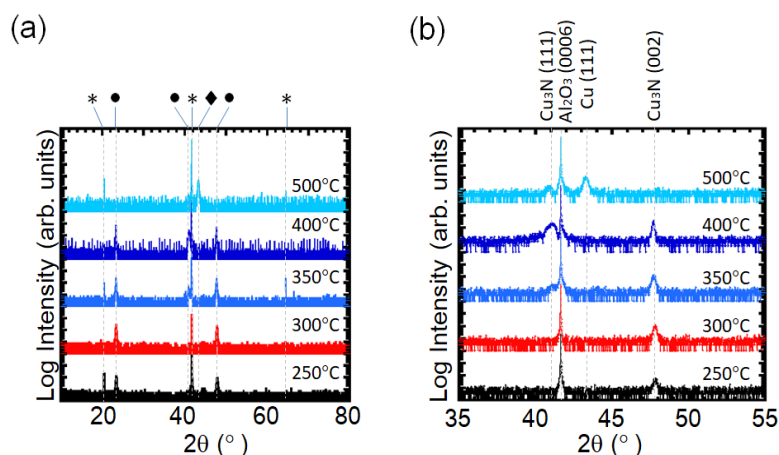


Fig. 2. XRD 2θ - θ scans in (a) wide range of 10 $^\circ$ –80 $^\circ$ and (b) short range of 35 $^\circ$ –55 $^\circ$ for samples grown at temperatures between 250 $^\circ\text{C}$ and 500 $^\circ\text{C}$. Diffraction peaks corresponding to $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, Cu_3N and Cu are denoted by stars (*), filled circles (●) and filled diamond (◆), respectively, in Fig. 2(a).

(111)Cu₃N の回折ピークがほとんど消失し、代わりに (111)Cu の明瞭な回折ピークが観察された。Cu₃N が 500°C で解離したと考えることができる。

図 3 は、300°C で成長させたサンプルの高角度環状暗視野走査透過型電子顕微鏡 (HAADF-STEM) 画像と、銅 (Cu)、窒素 (N)、酸素 (O) のエネルギー分散型 X 線分析 (EDX) 元素マップを示す。EDX 元素マップの結果から、膜領域では Cu と N が検出されたが、この領域では O のピークはほとんど検出されなかった。膜中の O 混入は、ラザフォード後方散乱分光法(RBS)においても測定検出限界程度であることを確認した。

以上の結果は、Mist CVD 法を用い、不純物となる酸素の混入が制御された窒化物膜が基板の情報を引継ぎエピタキシャル成長できることを示している。

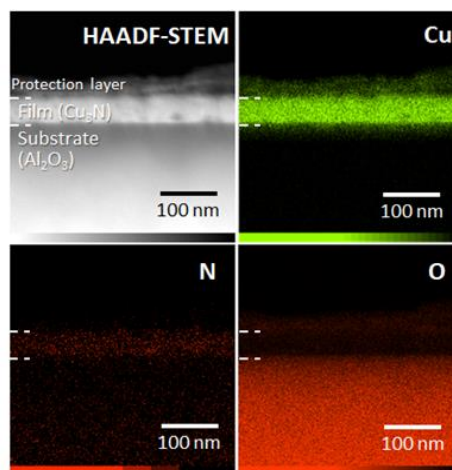


Fig. 3. HAADF-STEM image and corresponding EDX elemental maps of Cu, N, and O in sample grown at 300 °C.

エチレンジアミンを加えた Mist CVD 法を用いた Cu₃N 結晶成長^[5]

上記実験では、原料溶液からのアンモニア脱離により、成長中に溶液状態が変化してしまう問題が確認された。そのため、アンモニア以外の窒素源材料として、銅と安定した錯体を形成しやすいエチレンジアミン (EDA : C₂H₈N₂) 配位子に着目した。本実験では、銅原料溶液は全条件において Cu(C₃H₇O₂)₂ 濃度を 0.050 mol/L 一定とし、(I) 濃度 28% の NH₃ 水溶液で調製したもの、(II) EDA と NH₃ 水溶液を 1:9 の割合で混合した溶液で調製したもの、(III) EDA と純水を 1:9 の割合で混合した溶液で調製したものの 3 種類を準備し、Mist CVD 法を用い (0001)α-Al₂O₃ 基板上に Cu₃N 膜を 300°C で 60 分間成長させた。

図 4 に、(I)~(III) の原料溶液を用いて成膜したサンプルの XRD θ-2θ 測定結果を示す。原料溶液 (I)、(II) を用いた場合には単相 Cu₃N の回折ピークが得られた。特に、原料溶液 (II) を用いた場合には、原料溶液 (I) を用いた場合と比較して、原料安定性ととも Cu₃N の膜厚増加を確認した。ただし、原料溶液 (III) を用いた場合には Cu₃N からの明瞭な回折ピークは確認されなかった。

図 5 に、図 4 で示した各サンプルの X 線光電子分光法 (XPS) Cu 2p, N 1s スペクトルを示す。Cu 2p スペクトルでは、どの原料溶液でも 1 個の Cu ピークが主体的に観測された。ただし、原料溶液 (III)

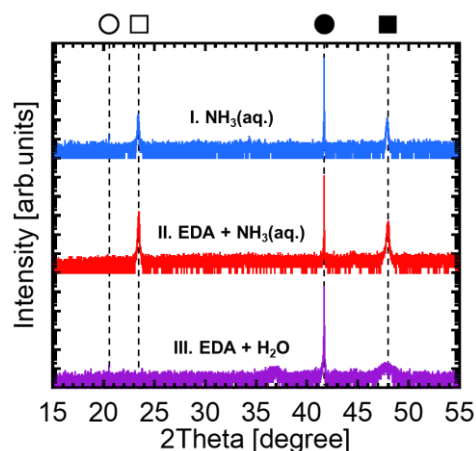


Fig. 4. XRD 2θ scans of samples grown at 300°C using Cu(C₃H₇O₂)₂ dissolved in (I) NH₃ (aq.), (II) NH₃ (aq.) containing EDA and (III) H₂O containing EDA.

を用いた場合、原料溶液(I)、(II)を用いた場合と比較して、2価のCuピークが強く観測された。N1sスペクトルでは、原料溶液(I)、(II)を用いた場合にNitrideのピークが明瞭に観測されたが、原料溶液(II)でNitrideのピークとともにC-N結合ピークが確認された。また、原料溶液(III)を用いた場合にはC-N結合ピークが主体的に観測された。

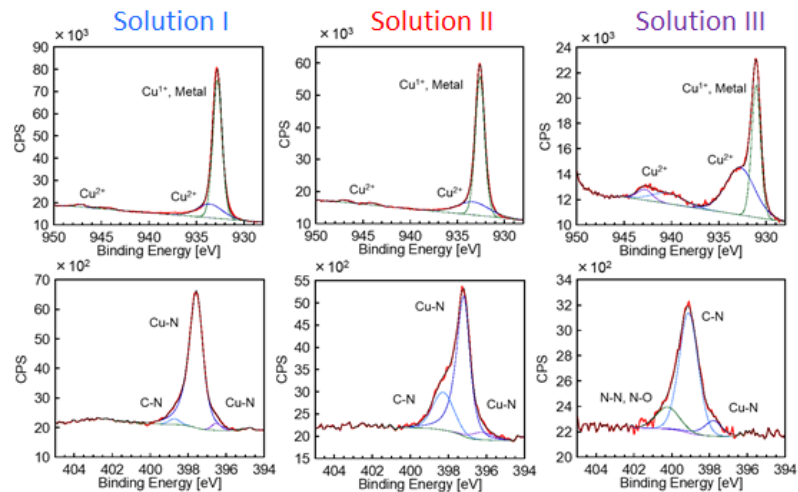


Fig. 5. XPS Cu2p and N1s spectra of samples shown in Fig. 4.

以上の結果は、Mist CVD法を用いたCu₃N成長においてEDAは溶液安定性向上に寄与する一方で、Cu₃N成長の窒素源としては機能しにくいことが示された。今後、Mist CVD法を用いた安定性の高い窒化物成長技術を確立していくためには、溶液中の錯体設計が重要な課題の1つとなると考えられる。

最後に

本研究テーマに携わった修士学生(高橋幹夫君、若林那旺君、吉田将吾君)をはじめとする研究室のみなさん、本研究に多くのご助言を下された先生方、研究者の方々に深く感謝申し上げます。新しい視点で先端錯体工学研究会や同研究分野の発展に貢献できるよう、今後も学生達と共にさらに精進し成長していきたいと思えます。

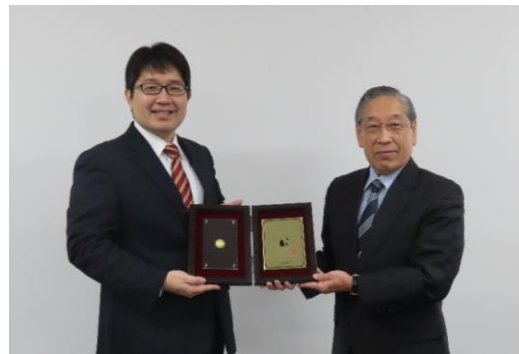


Fig. 6. Photo with Prof. Sato, President of SPACC.

参考文献

- [1] T. Kawaharamura, H. Nishinaka and S. Fujita, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 4669 (2008).
- [2] T. Kawaharamura, Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 05FF08 (2014).
- [3] S. Fujita *et al.*, Phys. Status Solidi C **11**, 1225 (2014).
- [4] T. Yamaguchi et al., Appl. Phys. Express **13**, 075505 (2020).
- [5] 吉田将吾等、第84回応用物理学会秋季学術講演会 20p-B101-1 (9月20日、熊本市) (2023).

2023 年度 先端錯体工学研究会学生研究奨励賞を受賞して

大阪市立大学大学院 理学研究科 物質分子系専攻
後期博士課程 3 年 藪根 夏希
e-mail: yabune@sci.osaka-cu.ac.jp

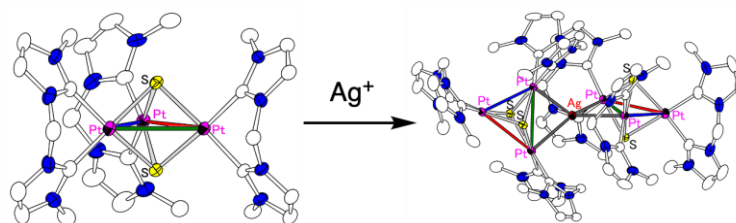
この度は、The 28th International SPACC Symposium にて Young Investigator Award 2023 (Takeda Rika Kogyo Co. Ltd) を賜り、大変光栄に存じます。多くの先生方のご指導のおかげでこのような賞をいただくことができ、深く感謝しております。また、このような大変栄誉のある賞に選んでいただきましたこと、先端錯体工学研究会の皆様には厚く御礼申し上げます。以下に、この場をお借りして私の研究について簡単に紹介させていただきます。

受賞研究タイトル

「Activation of closed-shell trinuclear clusters bearing chelating bis-N-heterocyclic carbene and triply bridging sulfide ligands」

本研究で用いた三重架橋硫黄配位子をもつ三核錯体は、3 つの金属間結合をもち、安定で反応性が低い一方で、二電子還元による金属間結合開裂で反応サイトを提供することが分かっています。しかしながら、二電子還元体は単離が困難で反応の制御が難しいという問題があります。そこで、強い σ 供与性をもつ、N-ヘテロ環カルベン (NHC) 配位子を導入し、金属-硫黄コア上の電子密度を増大させることができれば、安定なまま錯体の反応性を向上させ新たな反応開発等に利用できるのではないかと考えました。さらに安定な三核錯体を利用することにより、2 つの NHC 部位をアルキレン鎖により架橋した二座キレート NHC(bisNHC) のアルキレン鎖長変更による NHC 平面と金属の配位平面の二面角の変化が金属-硫黄コアの電子構造や周りの立体構造に及ぼす影響を評価することができるのではないかと考えました。本研究では、三重架橋硫黄配位子をもつ三核錯体の反応性並びに bisNHC 配位子のアルキレン鎖長変更による金属-硫黄部位の反応制御について、三核錯体と Ag(I) イオンを反応させることにより評価しました。

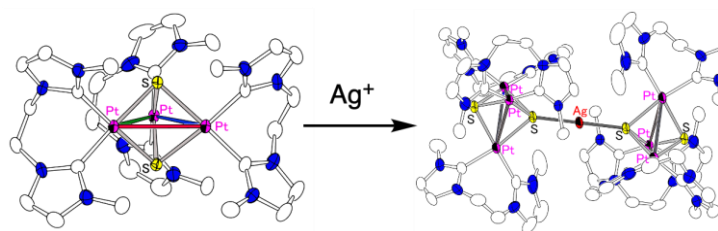
これまでにメチレン鎖架橋の bisNHC 配位子 (bisNHC-C1) を導入した白金三核錯体 ($\text{Pt}_3\text{-C1}$) と Ag(I) イオンの反応において、4 つの Ag-Pt 結合を持つ Pt_3AgPt_3 型の七核



スキーム 1. メチレン鎖架橋の白金三核錯体と Ag(I) イオンの反応

クラスターが生成することを明らかにしました(スキーム 1)¹。その一方で、メチレン鎖よりも長いエチレン鎖やプロピレン鎖架橋の bisNHC 配位子(bisNHC-C2、bisNHC-C3)を導入した白金三核錯体 (**Pt₃-C2**、**Pt₃-C3**)では、Ag(I)イオンが Pt₃S₂ コア上の白金間結合ではなく硫化物配位子と反応することを明らかにしました(スキーム 2)²。以上より、bisNHC は、架橋部位のアルキレン鎖長を変更することにより、各 NHC 部位の平面と金属の配位平面の二面角が変化し、錯体の金属-硫黄コア周りの立体障害を制御することが可能であることを示しました。

さらに、一般的に後周期遷移金属イオンは硫黄との親和性が高いにもかかわらず、メチレン鎖架橋の bisNHC 配位子を持つ白金三核錯体の Pt₃S₂ コア上において Ag(I)イオンが硫化物配位子ではなく Pt-Pt 結合と反応することは非常に特異的であることから、3つの{Pt-bisNHC-C1}部位の一つを、他の金属-配位子部位に変更した三核錯体と Ag(I)イオンの反応を調査しました(図 1)。これにより、2つの{Pt-bisNHC-C1}部位における Pt-Pt 結合周りは、bisNHC-C1 配位子の柔軟性により、Ag(I)イオンだけではなく、もう一つの三核部位が近づけるほどの空間を提供できることが分かりました。さらに、導入した立体障害の異なる金属-配位子部位により、2つの{Pt-bisNHC-C1}部位における Pt-Pt 結合周りの立体を制御可能であることを見出しました。



スキーム 2. メチレン鎖架橋の白金三核錯体と Ag(I)イオンの反応

さらに、一般的に後周期遷移金属イオンは硫黄との親和性が高いにもかかわらず、メチレン鎖架橋の bisNHC 配位子を持つ白金三核錯体の Pt₃S₂ コア上において Ag(I)イオンが硫化物配位子ではなく Pt-Pt 結合と反応することは非常に特異的であることから、3つの{Pt-bisNHC-C1}部位の一つを、他の金属-配位子部位に変更した三核錯体と Ag(I)イオンの反応を調査しました(図 1)。これにより、2つの{Pt-bisNHC-C1}部位における Pt-Pt 結合周りは、bisNHC-C1 配位子の柔軟性により、Ag(I)イオンだけではなく、もう一つの三核部位が近づけるほどの空間を提供できることが分かりました。さらに、導入した立体障害の異なる金属-配位子部位により、2つの{Pt-bisNHC-C1}部位における Pt-Pt 結合周りの立体を制御可能であることを見出しました。

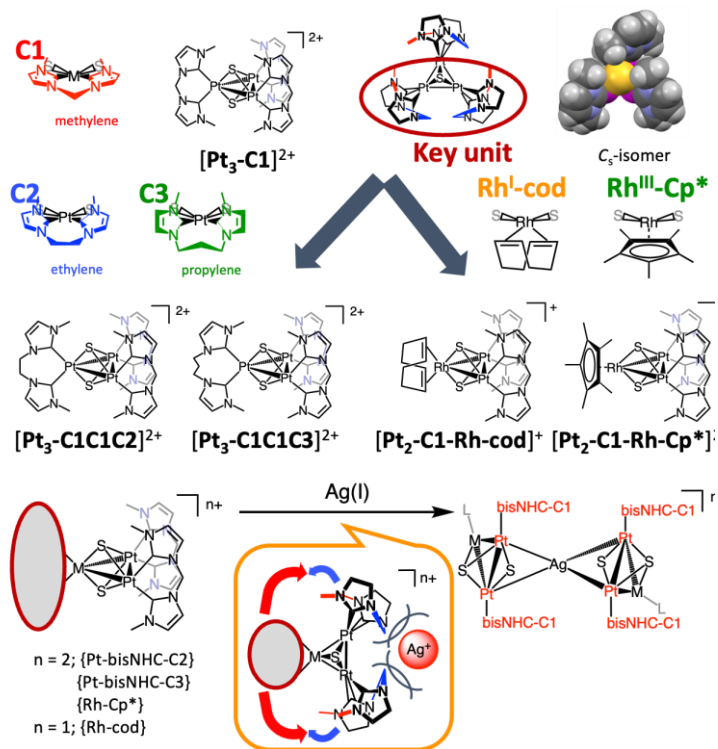


図 1. {Pt-bisNHC-C1}二核部位を有する三核錯体

は、bisNHC-C1 配位子の柔軟性により、Ag(I)イオンだけではなく、もう一つの三核部位が近づけるほどの空間を提供できることが分かりました。さらに、導入した立体障害の異なる金属-配位子部位により、2つの{Pt-bisNHC-C1}部位における Pt-Pt 結合周りの立体を制御可能であることを見出しました。

1. N. Yabune, H. Nakajima, and T. Nishioka, *Dalton Trans.* **2020**, 49, 7680–7683.

2. N. Yabune, H. Nakajima, and T. Nishioka, *Dalton Trans.* **2021**, 50, 12079–12082.

日本化学会第 104 春季年会 特別企画

「機器分析が拓く次世代の医療技術」を企画して

東京医療保健大学 大学院医療保健学研究科

松村有里子

e-mail: y-matsumura@thcu.ac.jp

日本化学会第 104 春季年会において、最終日の 3 月 21 日午後、株式会社島津製作所 谷浩行先生とともに特別企画「機器分析が拓く次世代の医療技術」を開催いたしました。本研究会のメンバーによる企画の立案は2年ぶりとなり、久しぶりの対面での開催でした。最終日の最終セッションということもあり、どれほどの人が集まるのか不安がありましたが、各分野の専門家や学生さんなど 50 人以上に参加いただきました。またご講演後には活発な質疑応答が行われ、多くの方に興味を持っていただける企画となりました。ご講演いただいた先生方、また会場に足をお運びいただいた皆様に大変感謝しております。

本特別企画では、下記の講演者からご講演をいただきました。

- リピドミクスを応用したアレルギー性疾患の病態解明と診断・治療への応用
村田 幸久(東京大学大学院・農学生命科学研究科)
- 分析データの集積と共有による医療課題の解決: 新型コロナからの教訓
末松 誠((公財)実験動物中央研究所)
- 再生医療、次世代治療薬開発に向けた、分析計測、自動化、AI 技術活用
江連 徹((株)島津製作所)
- ヘルスケアに向けての島津製作所の取り組み
中島 宏樹((株)島津製作所)
- 質量分析によるアルツハイマー病血漿解析
小田 吉哉(東京大学大学院・医学系研究科)



最初に東京大学の村田先生から、非侵襲的な対象である尿における生理活性脂質に焦点を当てた代謝物解析を踏まえて、獣医師としての視点も交えながらアレルギー性疾患との関連をわかりやすくお話しいただきました。次に、公益財団法人 実験動物中央研究所の末松先生から、AMED で取り組まれてきたことを踏まえて、多くの有用なデータがあるにも関わらずオープンアクセスではないデータベースが多く、医療課題のみならず各産業の発展にはデータ共有のための障壁が存在するという問題点と、それを解決するための施策についてご講演いただきました。株式会社 島津製作所の江連先生には、主に再生医療及び次世代治療薬開発における細胞培養において、画像解析・培養液分析・未分化マーカー探索・自立型実験システムなど多岐にわたる新規技術のご紹介をいただき、株式会社 島津製作所の中島先生からは、臨床診断及び微生物検査における取り組みについて幅広くご紹介いただきました。最後に東京大学大学院 医学研究科の小田先生からリポドミクスについて基本的事項の解説と初期のアルツハイマー病(AD)患者さんの血漿を用いたリポドミクスにより、血管内皮細胞のタイトジャンクションが関係する物質が AD に関連していることを見出すまでの研究成果をわかりやすくご紹介いただきました。本特別企画を通して、機器分析という化学者にとって身近な分析機器が医療技術革新をもたらすことを身近に感じ、分野の枠を超えた研究者が英知を結集し議論することで、科学技術の発展につながる明るい未来を感じていただければ幸いです。

末筆ながら、本企画に携わっていただいた関連の先生・講師の先生、また本企画をサポートしていただいた先端錯体工学研究会の先生方に篤く御礼申し上げます。

5. SPACC 年会費納入のお願いと入会のすすめ

先端錯体工学研究会(SPACC)会員の皆様におかれましては、常日頃より本学会の活動にご支援・ご協力を賜り、誠にありがとうございます。SPACCは、来る3月1日(金)をもちまして、新年度へと切り替わります。会員の皆様方には、会員係より年会費納入書類が郵送にてお手元に届きますので、そちらに従いまして年会費納入手続きのほど、何卒宜しくお願ひ申し上げます。

[年会費]

- ・個人正会員

賛助会員: 50,000 円, 正会員 : 3,000 円

- ・学生会員 (1口) 1,000 円

(1研究室で1口につき20名まで)

- ・法人会員 (1口)

維持会員: 10万円

一般会員: 2万円

期限: 5月10日(金)

振込先: 先端錯体工学研究会

- ・振込用紙を用いた郵便振込
00130-7-773549

- ・銀行からのお振込
ゆうちょ銀行

(金融機関コード: 9900)

〇一九店 (店番: 019)

当座 0773549

*学生会員の場合:

会費の振り込みの際は、担当教員名か研究室名を、通信欄あるいは振込者名に書き加えて下さい。また、登録学生およびメールアドレスは、忘れずに事務局宛にお知らせください。

[入会手続]

- ・電子メールによる手続

以下の URL に記載されているフォームをダウンロードするかコピーして必要事項をご記入の上、
jimukyoku@spacc.gr.jp 宛に送信してください。

個人正会員用: <http://spacc.gr.jp/page2e.html>

学生用会員: <http://spacc.gr.jp/page2f.html>

法人用: <http://spacc.gr.jp/page2g.html>

- ・郵送による手続

以下の URL に記載されているフォームをダウンロードして、必要事項をご記入の上、事務局宛に郵送して下さい。

個人正会員用: <http://spacc.gr.jp/page2e.html>

学生用会員: <http://spacc.gr.jp/page2f.html>

法人用: <http://spacc.gr.jp/page2g.html>

郵送先

〒141-8648 品川区東五反田 4-1-17

東京医療保健大学大学院

医療保健学研究科

松村 有里子

6. 今後の行事予定及び事務局からのお知らせ

主催

The 29th International SPACC Symposium (SPACC29)

場所: 北海道大学 鈴木章ホール

会期: 2024年9月5日-6日

担当: 佐藤敏文 (北海道大学)

詳細は、追ってご連絡致します

主催

The 30th International SPACC Symposium (SPACC30)

場所: 未定

会期: 2025年度内

担当: 佐藤光史、永井裕己 (工学院大学)

詳細は、追ってご連絡致します

主催

2025 SPACC 年会

場所: 琉球大学

会期: 2025年度内

担当: 福本 晃造 (琉球大学)

詳細は、追ってご連絡致します

編集後記

遅咲きの桜が見ごろを迎えています。大学では新年度となり、心機一転です。今号では、私の隣の研究室の工学院大学 徳永先生にご寄稿頂きました。徳永先生は、錯体、特に混合原子価錯体のような多電子系の理論計算にも造詣が深く、今回はそれを利用した QCA 研究を分かりやすくご説明していただきました。ご寄稿有難う御座いました。また 2025年度の会議も決まってきました。北海道から沖縄と全国に展開します。(桑村)

ニュースレター担当への問い合わせ方法

ご研究紹介等、SPACC ニュースレターへのご寄稿をしていただける場合や、本会が主催または協賛するシンポジウムの情報は、事務局までお気軽にお知らせください。

先端錯体工学研究会事務局

E-mail: jimukyoku@spacc.gr.jp

東京医療保健大学大学院 松村有里子

高速液体クロマトグラフ質量分析計
Liquid Chromatograph Mass Spectrometer

LCMS-8060NX  ANALYTICAL INTELLIGENCE

Enhanced performance
Sensitivity and Robustness

- 世界最高クラスの感度と測定速度
- ダウンタイムを最小化する高い頑健性
- ワークフロー全体を効率化する操作性



高速液体クロマトグラフ質量分析計
Liquid Chromatograph Mass Spectrometer

LCMS-2050  ANALYTICAL INTELLIGENCE

SIMPLY EFFORTLESS

LCMS-2050は、装置サイズの大幅な小型化と、分析の高速化・高感度化の両立を実現したシングル四重極質量分析計です。極限まで小さくなったボディの中には、島津の技術が凝縮されています。LC検出器としての使いやすさとMSの優れた能力を掛けあわせて、完璧なユーザビリティを追求した質量分析計、それがLCMS-2050です。



LCMS-2050の特長や動画をWebでご紹介



Analytical Intelligenceは、島津製作所が提案する分析機器の新しい概念です。システムやソフトウェアが、熟練技術者と同じように操作を行い、状態・結果の良し悪しを自動で判断し、ユーザーへのフィードバックやトラブルの解決を行います。また、分析機器に対する知識や経験の差を補完し、データの信頼性を確保します。

Analytical Intelligence logoは、株式会社島津製作所の商標です。