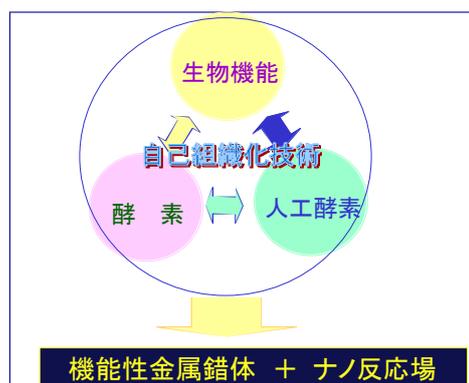


ディビジョン番号	5
ディビジョン名	錯体化学・有機金属化学

大項目	1. 錯体化学
中項目	1-3. 生物無機化学
小項目	1-3-5. 生物無機化学と材料科学

概要（200字以内）

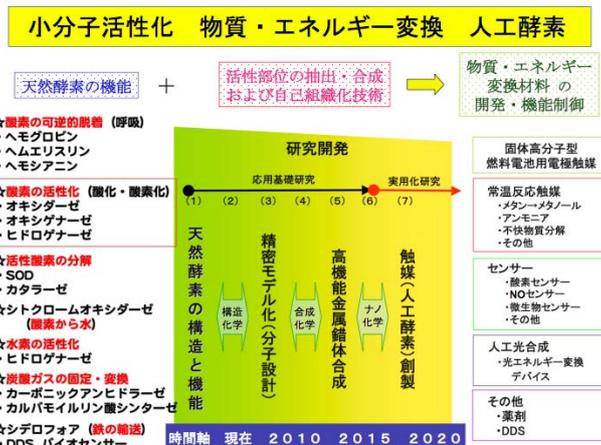
生体系には、水素・炭素・窒素・酸素・硫黄などの低分子量物質を変換する物質変換のみならず、光合成と呼吸鎖における水の酸化還元反応のように、化学結合の開裂・形成を通して、エネルギー変換に関わる金属酵素がある。これらは生体反応であるため、従来の工業的手法と比べて、低環境負荷かつ高効率・高活性であり、21世紀の持続可能な未来社会を支えるエネルギー循環システムを構築する材料開発研究に大きく貢献するであろう。



現状と最前線

【現状】近年、基質結合型の金属酵素のX線構造解析が多数報告され、不安定反応中間体のミリ秒オーダーでの挙動の追跡が可能となっている。また金属酵素の中心金属周りのアミノ酸変異体の調整も頻繁に行われ、酵素反応の機構解明や機能改変に役立っている。更に、合成分子を活性中心として導入した、新しいキメラ型人工酵素の構築もなされている。金属蛋白質の研究対象は、電子移動蛋白質や各種オキシゲナーゼ、加水分解酵素等に加えて、ヒドロゲナーゼやニトロゲナーゼなどの鉄硫黄系の活性中心構造を有する酵素が注目されている。また、光合成反応系IIの光アンテナ部位と係り、水分子から酸素発生の際に電子を取り出すマンガンクラスターの構造も明らかとなってきた。これらの金属活性中心の低分子モデルについても多数報告され、金属が関与する生体内反応の機構や、反応中間体の解明など、金属中心周りを理解する上で多大な貢献をしてきた。特に分子状酸素を活性化する人工酵素的な金属錯体触媒の開発は活発である。水素、窒素の変換を担うヒドロゲナーゼやニトロゲナーゼ活性中心、光合成反応系IIのマンガンクラスター部位と光アンテナ部位のモデル化は、その特殊な構造を構築するため非常に困難であるが、その合成と機能発現に対するアプローチは盛んに研究されている。

【最前線と方向性】金属蛋白質の機能を利用または人工的に再現して、低環境負荷な触媒やエネルギー変換材料の応用開発につながる研究課題として、①酸素分子の還元反応分子触媒、②窒素分子の還元とアミノ化反応触媒、③炭化水素の高效率資源化、④水素発生、⑤光エネルギーで駆動する分子触媒等が挙げられ



る。今後は、これらの反応活性中心を化学的に合成または再構成する方法から、反応のエッセンスの解明、ならびに各種固体担持材料との組み合わせによる不均一系触媒の開発などを引き続き検討するべきである。ここで耐久性を確保するとともに、高活性も達成するために、触媒周りの反応空間の設計も必須で、ナノ、マイクロ細孔構造を有する固体担持材料であるゼオライト、メソポーラスシリカ、多孔性カーボン、ナノ・マイクロリアクターなどのナノ、マイクロ細孔との組み合わせに期待するところは大きい。

### 将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

水素、酸素、窒素、硫黄、炭素の変換に関わる金属酵素の精密解析およびそれらの活性中心構造の本質の理解とその構造の精密モデル化が、今後5年間で相当進むと考えられる。また、金属酵素の基質特異性に必須である反応場としてのナノ細孔の精密制御および開発が進められる必要がある。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

金属酵素の構造と機能の三次元的な解明と、精密かつ高度な化学合成手法の進歩により、金属酵素様類似機能を掲載した低分子量金属錯体の合成が飛躍的に進むと考えられる。また、ナノテクの進歩により、金属酵素の反応場としてのナノ細孔の構築やマイクロリアクター・ナノリアクターの開発が進み、これらの融合による低分子量機能性錯体のデバイス化および低環境負荷な人工酵素の開発が期待される。

### キーワード

エネルギー変換・物質変換・金属酵素活性中心・デバイス化・人工酵素

(執筆者： 増田 秀樹)