

東京大学教授／理化学研究所主任研究員・チームリーダー 内山 真伸 氏

Masanobu Uchiyama

(業績)「理論計算と合成化学のインテグレーション反応開発／新材料創製」

New Reactions, New Materials, and New Functions based on Integration of Theoretical Calculation and Synthetic Chemistry



内山真伸氏は、『有機化学・合成化学』を基軸として、見えないものを光で探る『分光学』と、分子の性質や機能などを計算機で探る『理論計算』を組み合わせた独自の研究スタイルで、有機合成化学に新たなフロンティアを切り拓いた。新反応開発、反応機構解析、物質創製、機能創発などの研究分野において「実験化学と理論計算の融合」を実現・推進し、牽引してきた。同氏の研究の独創的な点は、1) C(炭素)H(水素)N(窒素)O(酸素)などからなる有機化学を周期表横断型の元素化学へと展開し合成化学、物質科学、生命科学の未踏分野を切り拓いたこと、2) 理論計算を用いて、元素の選択、立体構造、電子配置、軌道相互作用、分子機能を巧みに設計・予測することで、数々の分子触媒、変換プロセス、機能性分子を開発提案したことにある。

以下に特に顕著な業績を示す。

### 1. 理論計算による反応設計、合成化学、機能創製

有機化学、合成化学、物質科学の世界には、「手に取り出すことのできないもの」「目には見えないもの」などが多数存在する。これらをいかに合理的にデザインし、機能を予測するかがとても重要である。新反応開発を一例として以下に説明する。目的の新反応を実現させるためには、一般に、試薬・基質をデザインし、反応条件(反応温度・時間・溶媒)を実験により最適化する。時には、反応活性種や中間体の結晶構造解析を行ってみたり、各種スペクトルによる反応の経時変化の追跡や速度論的な実験を行うこともある。これらは、反応経路に関する情報、あわよくば反応の遷移状態に関する情報を“実験的に”得ることを目的としている。遷移状態(あるいは遷移構造)は、選択的な化学変換の実現に決定的な役割を果たすからである。しかしながら、実験的手法では、遷移構造を直接『見る』ことはできない。唯一、その姿を直接『目にする』ことができる方法が「理論化学・計算化学」である。近年の飛躍的な計算機の進歩によって、複雑な有機化合物、金属錯体、機能解析に高精度量子化学計算が適用できるようになってきた。同氏は、合成化学における未解明反応機構の遷移構造解析・反応経路探索を行い、重要な反応機構・化学

概念をいくつも明らかにしてきた。自然界における現象についても、仕組み(からくり)を理論計算で解き明かし、新物質創製に役立ててきた。さらに同氏は、計算化学を用いて未知物質の機能を予測し、独自の手法で合成することで「光を活用する分子」「光電変換材料」など『物質と生命を光でつなぐ分子群』を生み出した。

### 2. 元素の科学に立脚した反応開発研究 ～機能性アート錯体の創製と合成的応用を中心として～

内山氏は、有機化学を周期表横断型の元素化学へと展開し、元素の特性を深く理解し、潜在能力を最大限に引き出すことで、革新的な合成化学、機能性材料をいくつも開発した。実験化学と理論計算を組み合わせた独創的な手法で活性分子(反応活性種や機能性分子)を設計し、合成し、実現した。「ジアニオン型アート錯体」「水中で反応が行えるアート錯体」「電子移動能を配位環境で制御するアート錯体」「求核性と塩基性を区別したアート錯体」など、有機金属化学の世界に新しい概念を次々と生みだし、これらの概念を基軸として、「芳香族ハロゲン化物の化学選択的メタル化反応」「アート型塩基の開発と芳香環の位置選択的脱プロトン化(メタル化)反応」「不飽和結合へのシリル亜鉛化反応」「置換基を有するベンザインの発生法と制御機構」「水中アニオン重合反応」などの開発に成功し、有機合成化学の分野に独創性溢れた成果を数多く残した。

以上のように内山真伸氏は、「有機合成化学」を縦糸に、「理論計算」を横糸に組み合わせた独創的研究を牽引し、薬学・医学・工学・農学などとの境界領域において有機化学・合成化学のフロンティアを開拓した。同氏のこれらの研究業績は、有機合成化学に新たな視点を与えるとともに、学術的な独創性、先駆性、研究の波及効果の観点において、その貢献は極めて大きい。よって、有機合成化学協会日産化学・有機合成新反応／手法賞に値するものと認め、ここに選定した次第である。