

# 金属錯体化学は今何歳?



若 者

森 本 祐 麻\*

Age of Research Area: Case of Coordination Chemistry

Key Words : Transition metal complex, Artificial Intelligence

## はじめに

金属イオンが有機物と結合してできる金属錯体という物質群が、私の研究対象である。皆様に馴染みのありそうなところと言えば、新幹線の爽やかな青色は銅の錯体のものであり、紫陽花の可憐な紫色は、アルミニウムの錯体が作り出す色である。我々の血が赤いのも鉄の錯体の色で、この錯体が酸素を手放すと、血は鮮やかな赤色を失い、黒っぽくなる。同じ金属を中心に持つ金属錯体であっても、そこにくっつく(配位する)有機物が少し変わると、色をはじめとする物性や反応性が大きく変わる。特に遷移金属イオンは、縮退したd軌道が周辺環境の変化を鋭敏に感じ取り、裸の金属イオンとは全くことなる豊かな表情を見せる。少しの変化が大きな変化を産む、自然の妙を感じることのできる研究対象であり、仕組みの一端を明らかにした際の感動は何物にも変えがたい。

私は現在、大好きな金属錯体について気のすむまで探求できる幸せな境遇にある。その一方で、歴史と由緒のある錯体化学の研究者として、新しい何かを歴史にのこせるのだろうか、という若さゆえの焦燥も感じている。エッセーの執筆を通じ、日頃の雑感を棚卸しする貴重な機会を得たので、34歳の愚考をストレートに書いてみたいと思う。浅学な部分についてもご笑覧いただき、どこかでコメントなどいただけたら幸いである。



\* Yuma MORIMOTO

1986年11月生まれ  
 大阪大学大学院 工学研究科 生命先端  
 工学専攻博士後期課程 修了(2013年)  
 現在、大阪大学大学院 工学研究科  
 応用化学専攻 助教 工学博士  
 TEL : 06-6879-7234  
 E-mail : y-morimoto@chem.eng.  
 osaka-u.ac.jp

## Deep Learning の衝撃

現在、人工知能と呼ばれる分野の隆盛が凄まじい。囲碁界最強の棋士が、2016年にGoogleの開発したプログラムに破れたニュースも記憶に新しい。あれから約5年の間にも、凄まじい勢いで情報処理の分野では研究が進んでいる。国内外の有力企業も、こぞって人工知能の応用利用を画策している。学術分野においても、人工知能研究をはじめとする情報処理分野に、これまでより多くの研究予算を配分しようという流れがある。無論、自然科学研究と、情報分野の研究、学問としての優劣は無く、等しく人類社会に必要であると、筆者は考えている。しかし、それでも新しく勃興する若い分野は眩しく、隣の芝は青く見える。

## 人工知能研究の歴史

人工知能の分野は、筆者の傾倒する錯体化学の領域と比較すると新しい。しかし、一体どのくらい若いのだろうか。1954年の第6号から電子アーカイブが利用できる「生産と工業」誌の中で「錯体」を検索すると430件のHitがある一方で、「人口知能」は現在130件であり、それなりの数の論文が投稿されているのが筆者には意外であった(面白いものも数多くあった)。筆者より年長の方は、人工知能といえば、仰々しいワードの割には、ほとんど使えない代物であった頃をご存知の方も多いと思う。総務省の資料によれば、現在の人工知能研究は第3次ブームの最中であるとされている[1]。人工知能研究エキスパートの読者もいることは重々承知だが、軽くその歴史について俯瞰する。

人工知能という言葉が初めて定義されたのは、1956年の会議であるとされている。この前後、人間のニューロンをモデルとした計算アルゴリズムの研究が第一次ブームを形成した。その後一旦、研究

は下火になる。1980年代に第二のブームが起こった。ここでは医学知識などの専門情報を大量にインプットした機械に、診断などの判断を下させようとするプロジェクトが流行った。しかし現実社会の問題は、当時の技術で捌き切れるほど、線引きの明瞭なものではなく、広く普及するシステムは作れなかった。その後また、研究者にとっては辛く厳しい冬の時代が訪れたようだ。

時を経て、2000年代にコンピュータの計算機能の向上、画像を始めとする様々な種類のデータの爆発的な増大があった。これを背景として、トロント大学の Geoffrey Hinton 教授が第3次ブーム開始の口火を切った。Hinton は、入力された情報から特徴量を抜き出すような操作を何度も繰り返すことにより、人工知能の能力を飛躍的に向上させる Deep Learning という手法を開発した (2006年 Science) [2,3]。彼の研究が転換点となって、現在の人工知能は、りんごの絵をたくさん与えれば、「りんごは赤い」とか、「りんごは直径が10cm くらいの球状」といった情報を与えずとも、自律的にリンゴの特徴を判断できるようになった。2015年に行われたコンペティションでは、すでに人間よりも高い精度で画像データを処理できる人工知能が登場している。画像処理以外にも驚くような成果が報告されているが、詳細な技術の進展についてはここには述べない。

### 錯体化学研究の歴史

翻って、筆者の愛してやまない錯体についての研究はどうだろう。錯体化学の歴史は、Alfred Werner にまでさかのぼることができる。彼は博士論文 (1892年) で、金属元素のつくる結合についての理論を提唱した。その後の研究で理論を発展させ、1913年にノーベル賞を受賞した。現在では高校の化学の教科書でも、亜鉛や銅のイオンが四面体や平面四角形構造を取ることが紹介されており、金属イオンが綺麗な幾何学構造を取るとは至って当然のことに思える。しかし、Laue による単結晶 X 線回折の発見が1912年であることを考えると、どれも直接的に化合物を見たことのない時代に、金属錯体分子の構造を推定した Werner の想像力には驚きを禁じ得ない。彼の活躍した頃を、錯体化学の第一世代と見ることができよう。

Werner 以後の60年間、金属錯体化学が関連する

ノーベル賞は出なかったが、1973年に Wilkinson と Fischer が、炭素と金属の結合様式についての研究でノーベル賞を受賞した。この成果に基づいて、金属元素を効果的に用いた合成手法が開発され、後にこの分野の成果を応用し、Kowles、野依、Sharpless らが2001年に、Chauvin、Grubbs、Schrock らが2005年にそれぞれノーベル化学賞を受賞した。また、Taube (1983年にノーベル賞受賞) は、金属錯体が引き起こす酸化還元反応についての分野を確立した。続いて Cram、Lehh、Pedersen (1987年にノーベル賞受賞) らは、金属イオンを使うことで、従来にはなかったタイプの物質群を合成できることを示した。2016年にノーベル賞受賞した Sauvage の研究も、大局的に見れば、この研究の系譜にあると言えるだろう。Werner によるものから数え、大まかには4つの時代がこれまでの金属錯体化学にはあったとできる。

### 学術研究のタイムスケール

前述のように、人工知能の研究は約70年前に産声をあげ、現在3つ目の波の起こったところであり、約140年前に生まれた金属錯体化学の研究は4つ目の波がすぎた頃だ。こうして見ると、研究はとても息の長い営みなのだという認識を新たにする。研究のタイムスケールを捉えやすいよう、人間の年齢に例えてみたい。古典力学においては、ピサの斜塔から2つの球を Galileo Galilei が落とした1589年を誕生年と見ることができよう。そこから物理学者の興味を中心に量子力学に譲るまでに300年程度の時間が経っている。熱力学においても、ボイルの法則の発表から、散逸構造について研究した Prigogine のノーベル賞受賞までに、約300年を経ている。良質な研究対象の寿命は、人間の寿命の3.5倍くらいであろう。こうして見ると、1890年に産声を上げた錯体化学は、まだまだ壮年、不惑の頃である。徳川幕府も約260年続いた。強引なのは承知の上でこれと比較すると、人工知能研究は第三代将軍家光の治世、錯体化学の研究は第五代将軍吉宗の頃といったところだ。きっとまだ、驚くようなイベントが待っているはずだ。

前述の Hinton 氏は1947年生まれであり、現在の筆者と同じ30代の頃に人工知能の第二次ブームを経験しているが、その後50代でブーム後の氷河期

を経験している。この時代、人工知能関連の研究者は激減し、人工知能を研究しているのは変わり者、とさえ見られていたようだ。そのような状況の中から起死回生の論文を発表したのが約60歳のときである。どんなテーマであっても研究できるような優秀な方なのだと推察するが、不遇の時代であっても人工知能研究を続けたのは、強いこだわりや思い入れ、なによりその研究テーマが好きだったからなのだと思う。

### 終わりに

錯体化学も存外に若く、筆者同様に、これからまだまだライフイベントがありそうだ。腹をくくって付き合っていきたい。また、情報科学は自然科学の敵ではなく、助けてくれるものであるはずだ。筆者は化学の分野と情報科学の間に、まだまだ距離があると感じている。私のこれからのキャリアの中で、

その距離を埋めるような研究スタイルを構築していきたい。

最後に、貴重な執筆の機会を与えてくださった、大阪大学大学院工学研究科の安田誠教授ならびに「生産と技術」関係者の方々に深く感謝の意を表します。

### 参考

- [1] 総務省資料  
<https://www.soumu.go.jp/johotsusintokei/whitepaper/ja/h28/html/nc142120.html>
- [2] G. E. Hinton, R. R. Salakhutdinov, Reducing the dimensionality of data with neural networks. *Science* 2006, 313, 504–507.
- [3] NEC C&C 財団資料  
[https://www.candc.or.jp/kensyo/2016/group\\_b.html](https://www.candc.or.jp/kensyo/2016/group_b.html)

