

## 中長期テーマ「複雑系のための分子科学」

藤井 正明

東京工業大学 科学技術創成研究院 教授

### 企画趣旨

分子系→超分子系→分子集合系→組織系→生命系という物質の階層構造に呼応して化学のフロンティアは複雑で高度な系へと対象を広げており、複雑系の機能の解明と創出に向かっている。物質創製の根幹を担う有機化学、無機化学では息を飲むほど高機能な超分子が創製され、ナノテクノロジーを含めてこれらの分子群を基礎、応用両面で駆使し始めている。生体分子は複雑な系の代表であり、その高度な機能を分子システムの観点から論じることが可能になりつつある。従ってこのようなこの複雑で高度な機能を発揮する分子群や分子システムを分子論的に解明する事は 21 世紀の化学が担う大きな命題である。

従来、複雑な分子群、分子システムは、その複雑さ故に 20 世紀的な単純な測定法では歯がたたず、また、理論的にも切り込むのが難しい系であった。しかし、現在、物理化学を中心として複雑な系に適用できる新たな測定法の開発が進みつつある。非線形分光を駆使した気液界面分子の精密測定、液体表面分子を観る超高感度 AFM、タンパク質の特定部位を測定する超高速ラマン分光など複雑系に切り込める手法が出現し始めている。さらに、計算機の高速化はめざましい勢いで進んでおり、世界最速を記録した国産超高速計算機「京」などは生体を丸ごとシミュレーションする事も視野に入れて複雑系にアプローチしている。これに呼応して理論化学も超高速計算機に適した理論構築を進めている。

このような背景のもと、本会の「30 年後の化学の夢」でも複雑で高度な分子と分子システムに関する夢が多く取り上げられた。物理化学では「分子システムのための測定技術と理論」、「理論化学・情報科学・計算化学の夢」、「分子性界面デバイスを用いた物性研究」「単一分子分光による巨大分子の構造揺らぎの観測と理解」、「分子の自由度を利用した新物質科学の確率」「埋没界面複雑系の解明」など、ナノテクノロジーでは「無機-誘起ハイブリッド自己組織化」、「ナノクラスターの複合化による分子デバイスの創製」「生体分子の構造を精密に変化させる分子機械」、無機化学では「自己組織化」「超分子錯体」「無機生体材料」が取り上げられ、また、有機化学でも「電子回路を合成」という夢が複雑系分子および分子システムに関するトピックスである。

すなわち、「複雑系のための分子科学」は物理化学のみならず、無機・有機化学、ナノテクノロジーといった広い領域の化学者に共通の話題を提供するトピックスであり、また、理論・計算化学の加速度的な進歩とも呼応している。以上のように、本企画は化学とその関連する広い分野に影響を与えるテーマであり、本会中長期テーマとして推進した。

## 各中長期テーマ企画のシンポジウムの概要説明

### 1) 第93回春季年会中長期企画

企画タイトル「複雑系のための分子科学－複雑さと柔らかさ」

実施日2013年3月22日（金）

複雑な分子の特徴として分子の柔らかさに焦点を当て、理論・計測・物質創製の観点からその本質を論じた。理論からは林重彦（京大）、森田明弘（東北大）、計測には田原太平（理研）、高橋聡（東北大）、物質創製には村橋哲郎（東工大、当時分子研）、中西尚志（物財機構）、神取秀樹（名工大）という複雑系に挑戦する気鋭の研究者を講師に迎え、講演のみならず総合討論でも複雑系の特性である「柔らかさ」に熱い討論が交わされた。

この初回に集ったメンバーを中心に新学術領域「柔らかな分子系（略称、領域番号2503）」が開始されたことはこの中長期テーマ設定の重要性を物語っている。

### 2) 第94回春季年会中長期企画

企画タイトル「複雑系のための分子科学－理論研究によるアプローチ」

実施日2014年3月27日（木）

最先端の理論研究を行っている研究者の講演を中心に、複雑で構造や状態を自在に変化させて機能を発揮・制御する分子系について議論した。ここで取り上げられたのは計算機のパワーを有効利用する分子動力学計算や量子化学計算と分子動力学計算を併用する理論計算によるアプローチであり、これによりタンパク質およびその集合体の機能、酵素機能や生体内化学反応の解明、溶液内光化学反応、膜の柔らかさと機能など典型的かつ重要な複雑系分子の理論研究が論じられ、計測を主体とする研究者・合成化学者、生化学研究者などと理論によるアプローチの可能性が論じられた。

### 3) 第95回春季年会中長期企画

企画タイトル「複雑系のための分子科学－先端計測によるアプローチ」

実施日2015年3月26日（木）

複雑系に切り込める先端計測法を概観し、理論研究のみならず、超分子化学など最先端の合成化学との連携も視野に入れた討論を企画した。これにより、複雑で構造や状態を自在に変化させて機能を発現する複雑分子系の本質やその機能制御について議論した。後に分子機能と分子の稠密性の関係に結びつくタンパク質の時間分解振動分光、分子モーターダイナミクスの画像計測、寿命の揺らぎを用いる新しい蛍光相関分光など複雑系を解明する新たな手段が紹介され、適用できる系や現象などの可能性が論じられた。

### 4) 第96回春季年会中長期企画

企画タイトル「複雑系のための分子科学－新しい分子機能の創成にむけて」

実施日2016年3月24日（木）

本シンポジウムでは、超分子創製や生体分子の改変から新たな機能創成に挑んでいる若手研究者の講演を軸として、複雑分子系が機能を発揮・制御する過程について、理論や先端計測の研究者を交えて議論した。特に芳香族骨格のナノカプセルによる大きな分子の包摂は理論側の解析も進み、カプセルが固定した形を形成するのではなく、ダイナミックに動きながら包摂する動的包摂という新概念が大きな反響を呼んだ。

#### 5) 第97回春季年会中長期企画

企画タイトル「複雑系のための分子科学—理論, 計測, 合成の連携で拓く柔らかな分子の新機能」

実施日2017年3月16日(木)

本企画はこの中長期テーマシンポジウムの5回目当たるが、ここまでの継続により、超分子や生体分子系で新たな機能を創成する研究者、超高速計算機を駆使して複雑系を可視化する理論研究者と最先端の分子計測研究者の協力がすることで複雑系の本質を担う分子の柔らかさと機能の関係が明らかになりつつある。そこで、本企画を契機に始まった異分野間の共同研究を中心として複雑分子系が機能を発揮・制御する過程について議論した。講演では共同研究者と一緒に登壇し異分野間のインタープレイを講演でも披露する新趣向を導入した。生体分子の機能転換に関しては、進化と機能転換の容易さが関連するという新概念(機能転換の非対称性)が発表されて大いに注目を集めた。シンポジウムの最後には複雑系研究の先駆者であるUC Berkeley・G. Fleming教授(本会名誉外国人会員)に特別講演をして頂いた。

#### 6) 第98回春季年会中長期企画

企画タイトル「複雑系のための分子科学—分子機能はどこまで予言できるか」

実施日2018年3月20日(火)

本テーマでは複雑分子系が機能を発揮する過程を分子理論, 先端計測, 合成化学研究者らによる議論を進めてきた。次の重要なステップは高機能な複雑分子系のデザイン, すなわち機能予測である。そこで本シンポジウムでは合成化学, 分子理論, 先端計測の最前線で活躍している研究者により, 分子機能の予測の現状と必要性を概観し, 突破口を全員で議論した。特にここで注目されたのは光機能材料の創製とその機能予測であり, AIの可能性とその限界点や励起状態への理論—創製—計測のサイクルの可能性が論じられた。

#### 将来の予測と可能性

物質創製の根幹を担う有機化学, 無機化学では想像もできなかった高機能な超分子が創製され, 生化学は生命を司る生体分子の集合体の機能改変を行い, またナノテクノロジーでは材料科学に新たな可能性を提供している。この中長期テーマでは複雑な分子の機能を計測し, 理論解析して物質創製と連動させること狙いとして進めた結果, 動的包

摂や機能的稠密性, 機能転換の非対称性と行った新たな概念を見出すとともに, 複雑な分子の構造変化を効率的にサンプリングするシミュレーション法や量子化学とカップルして発色団構造変化にアプローチする新規な計算手法, 複雑系分子に明快な気相分光を適用できる ESI 冷却イオントラップ分光法, 二次元蛍光寿命相関分光法, フォトンアップコンバージョン分子の創出と理論解析など複雑系に挑戦するツールと解析例が多く報告された.

これらを概観するに, より高機能なシステム創出には, 複雑な分子をさらに集積して機能を発揮させる方向性, すなわち複雑系分子をビルディングブロックとする分子システムに強く興味を持たれ, また, 大きな発展性を秘めていると考えられる. 理論, 計測の研究者にとってはさらに高度な系に対応できる手法が求められるが, 合成研究者と協力することで大きなヒントがつかめることがこの中長期企画テーマでも明らかになっており, より高度な分子システムも理論・計測・物質創製研究者の共同研究で解明できると考えられる. さらにこの共同研究は物質創製にも直接的に貢献できる点で意義が高く, 次世代に向けてはこのような共同研究リンクを広げることが重要と考えられる. このリンクの重要性を高めるのは, 第6回シンポジウムで試みた機能予測であり, これが複雑分子を集積した分子システムに対して適用できるならば, 物質開発の効率化, 迅速化, そして化学者の直感を超えて物質創製できる道を拓くと考えられる.

#### まとめ

本中長期企画は, 化学の根幹を担う物質創製が高機能で複雑な分子に向かっていることを受け, ともすれば原理のわかりやすい簡単な分子に固執しがちな物理化学者が最先端の合成化学者・生化学者らと直接議論できる道を拓きたいという気持ちで開始した. 賛同して参加した物理化学者にとっては, 綺麗な都会の中からジャングルに放り込まれるような印象だったかもしれないが, 得られたものは極めて大きく, そこが未知の金脈の眠る宝の山であることが理解されてきたと考えられる. さらに喜ばしいことは, 合成化学者, 生物化学者も測定・理論を主体とする研究者と共同することで新たな展開を見いだせることを理解していただいたことである. この理論・計測・物質創製は化学における基本的な共同研究体制であるべきで, 計算機や様々なソフトウェア, そして計測技術のパワーアップとも呼応して今後もさらに重要性を増していくであろう. 次世代の化学者の一助になるなら誠に幸いである.