



# 化学は物質創成を柱とした 科学分野である

茅 幸二 Koji KAYA

国立研究開発法人 理化学研究所 研究顧問



20世紀は「物質的に豊かな社会」へと繁栄した世紀であるが、物質創成をその柱として化学が重要な寄与をしたことは、化学を学ぶ者の一人として誇りを感じず。「ハーバー・ボッシュ法」によるアンモニア合成の成功が、人類の飢餓への恐怖を救ったことは卓出した成功例であるが、20世紀後半から21世紀の世界的な人口増加、生活レベル向上と相まって、環境・資源・エネルギー問題が世界的規模に問題とされ、「持続可能な社会」への科学技術の在り方が重要となった。

2006年、Nature誌が「化学の未来はあるのか?」という疑問を投げかけたのは、記憶に生々しいものがある。それに対し、世界の化学のリーダーの多くは、「生命機能解明の化学からの寄与」を重要な課題として提唱している。20世紀末期から急速に発展した生命科学は、生命機能を創り上げる機構を、タンパク質を含めた分子レベルで探求しており、計算機科学の大型計算のホットトピックスとしても、世界的な研究開発が進行している。一方、化学は単一分子のみならず、分子集合体の機能、構造を探索する「ナノ物質化学」としての発展を含みつつ現在に至っている。カーボンナノチューブ、フラーレンさらにはグラフェンなど、今後これらのますますの大量合成の必要が迫っている一方、これらの化学的合成の試みは、いまだに足踏み状態であるが、このような新規ナノ集合体が、ナノサイズの大きさのレベルで、材料システムとしての機能を持ち得るのかという疑問がある。現在稼働している世界最高規模の「京」コンピュータの最小機能単位であるCPUはマイクロメータ程度である。生命体の機能の最小単位である細胞は、マイクロメータ程度で、その中に極めて濃度の高いタンパク質などを含む「分子混雑系」を構成していることが知られている。そこでは、情報あるいはエネルギーなどの伝搬が行われること、その際、混雑系の構造に何らかの秩序をもった構造変化があるとされている。この問題は多くの研究者が熱い視線を送っている「解明すべき」課題であるが、問題は混雑系の大きさは10ナノメータからサブマイクロメータの程度であり、ナノテクノロジーで扱っている分子数、分子量の最大値の2桁以上と推定されるが、バルク材料から見ると桁外れの小さいサイズである。しかし、物質機能システムとしての最小単位としての分子混雑系への挑戦は、あらゆる障害を越えて化学者の向かうべきテーマに思える。ここでは、従来からの測定法あるいは計算法を、より本質的な近似法に替えていく必要がある。我々は日常生活で、周囲のものを常に違った単位で考えに入れ、社会生活を送っている。それと同様に、分子複雑系を表現するに相応しい近似法、つまり「疎視化」の化学(科学)が必要である。実験(観測単位)、計算(計算の本質を壊さない程度の近似)双方での「疎視化」の科学が輝く時が到来することを切望する。

© 2016 The Chemical Society of Japan