

「分子技術イニシャティブ」要旨集

主催：日本化学会・科学技術振興機構

日本化学会春季年会（近畿大学） 3月27日（土） 13:30—17:20 S7会場 19号館

◆プログラム——

1. 分子技術コンセプト

(13:30-14:15) 座長 村井眞二 (奈良先端大)

- 1-1 技術俯瞰における分子技術の多面性 (JST, NEC) 曾根純一
- 1-2 国家の基幹技術としての分子技術 (東大理) 中村栄一
- 1-3 分子科学から分子技術へ (東大工) 相田卓三

2. 形状・構造制御にもとづく分子技術

(14:20-14:50) 座長 山本 尚 (シカゴ大)

- 2-1 バイオ系・医療系での分子技術 (東大薬) 長野哲雄
- 2-2 無機・有機複合系での分子技術 (京大工) 北川 進

3. 電子状態の精密制御を可能にする分子技術

(15:00-15:45) 座長 佐藤勝昭 (JST)

- 3-1 さらなる期待を集める分子エレクトロニクス (住友化学筑波研) 大西敏博
- 3-2 自発光柔軟表示システムの市場と開発競争—分子フォトンクスへの期待 (NHK 技研) 時任静士
- 3-3 無機・有機複合系の電子状態制御 (東京理科大理) 福山秀敏

4. 変換分子技術・プロセス分子技術

(16:10-16:25) 座長 藤田照典 (三井化学)

- 4-1 グリーンテクノロジーと分子技術 (東工大資源研) 辰巳 敬

5. 集合体・複合体の制御にかかわる分子技術

(16:25-16:55) 座長 西村伸太郎 (アステラス製薬)

- 5-1 汎用新バイオ技術の開発と創薬への期待 (東大先端研) 菅 裕明
- 5-2 さらなる期待を集める膜技術 (東レ地球環境研) 辺見昌弘

6. 分子設計・機能設計に基づく分子創成

(17:00-17:15) 座長 諸熊奎治 (京都大・エモリー大)

- 6-1 超高速計算機がもたらす分子技術の革新 (理研次世代分子理論ユニット) 平尾公彦

7. 展 望

(17:15-17:20) 座長 玉尾皓平 (理研)

- 7-1 分子性、合成分子技術、分子技術イニシャティブ (奈良先端大) 村井眞二・(東大理) 中村栄一

特別公開シンポジウム
分子技術イニシャティブ

はじめに

環境・エネルギー・生活・持続可能社会の課題に向け様々なアプローチがなされています
当シンポジウムでは「分子科学」に「分子技術」を対比させます

「分子科学」を物理・化学・生物の分野および先端精密生産技術と融合させ、さらに社会との接点
へ展開するとき、そこには新しい語「分子技術」で表現される広大な未知領域が描かれます

————— **Molecular Technology** —————

これを、国家の基盤となる一大技術集積とし、
将来の環境・エネルギー・生活の課題に具えることが大きな目標となります
諸外国ではまだ積極的に意識されていないこの目標を、世界に先駆け抽出することが
このシンポジウムの目的です

広い目標を持つこのイニシャティブでは、本シンポジウムに見られるように
課題は多岐にわたり多彩です
対処するに、いわゆるゼロ、ゼロ新、ピカ新、のいずれのアプローチも重要であり、
総がかり的体制をつくることが望まれます

企画グループ
(奈良先端大)村井 眞二
(東大理)中村 栄一
(北大理)魚崎 浩平
(北大触媒センター)笠原 二郎
(理研)玉尾 皓平
(JST)田中 一宜
(JST)曾根 純一
(JST)石森 義雄
(JST)河村 誠一郎
(JST)永野 智己
(JST)中山 智弘

プログラム

開催日時 3月27日(土) 13:30-17:20

1. 分子技術コンセプト - 座長 村井 眞二(奈良先端大) 13:30-14:15

- 1-1 技術俯瞰における分子技術の多面性 曽根 純一 (JST、NEC)
- 1-2 国家の基幹技術としての分子技術 中村 栄一 (東大理)
- 1-3 分子科学から分子技術へ 相田 卓三 (東大工)

2. 形状・構造制御にもとづく分子技術 - 座長 山本 尚(シカゴ大) 14:20-14:50

- 2-1 バイオ系・医療系での分子技術 長野 哲雄 (東大薬)
- 2-2 無機・有機複合系での分子技術 北川 進 (京大工)

3. 電子状態の精密制御を可能にする分子技術 - 座長 佐藤 勝昭(東京農工大) 15:00-15:45

- 3-1 さらに期待を集める分子エレクトロニクス 大西 敏博 (住友化学 筑波研)
- 3-2 自発光柔軟表示システムの市場と開発競争。分子フォトンクスへの期待
時任 静士 (NHK 技研)
- 3-3 無機・有機複合系の電子状態制御 福山 秀敏 (東京理科大)

4. 変換分子技術・プロセス分子技術 - 座長 藤田 照典(三井化学) 16:10-16:25

- 4-1 グリーンテクノロジーと分子技術 辰巳 敬 (東工大資源研)

5. 集合体・複合体の制御にかかわる分子技術 - 座長 西村伸太郎(アステラス製薬) 16:25-16:55

- 5-1 汎用新バイオ技術の開発と創薬への期待 菅 裕明 (東大先端研)
- 5-2 さらに期待を集める膜技術 辺見 昌弘 (東レ 地球環境研)

6. 分子設計・機能設計に基づく分子創成 - 座長 諸熊 奎治(京都大・エモリー大) 17:00-17:15

- 6-1 超高速計算機がもたらす分子技術の革新
平尾 公彦 (理研 次世代分子理論ユニット)

7. 展望 - 座長 玉尾 皓平(理研) 17:15-17:20

- 7-1 分子性、合成分子技術、分子技術イニシヤティブ
村井 眞二 (奈良先端大)・中村 栄一 (東大理)

目 次

1. 分子技術コンセプト

- 1-1 技術俯瞰における分子技術の多面性 曾根 純一 (JST、NEC) …1
1-2 国家の基幹技術としての分子技術 中村 栄一 (東大理) …2
1-3 分子科学から分子技術へ 相田 卓三 (東大工) …3

2. 形状・構造制御にもとづく分子技術

- 2-1 バイオ系・医療系での分子技術 長野 哲雄 (東大薬) …5
2-2 無機・有機複合系での分子技術 北川 進 (京大工) …7

3. 電子状態の精密制御を可能にする分子技術

- 3-1 さらに期待を集める分子エレクトロニクス 大西 敏博 (住友化学 筑波研) …9
3-2 自発光柔軟表示システムの市場と開発競争。分子フォトンクスへの期待
時任 静士 (NHK 技研) …13
3-3 無機・有機複合系の電子状態制御 福山 秀敏 (東京理科大) …16

4. 変換分子技術・プロセス分子技術

- 4-1 グリーンテクノロジーと分子技術 辰巳 敬 (東工大資源研) …18

5. 集合体・複合体の制御にかかわる分子技術

- 5-1 汎用新バイオ技術の開発と創薬への期待 菅 裕明 (東大先端研) …22
5-2 さらに期待を集める膜技術 辺見 昌弘 (東レ 地球環境研) …25

6. 分子設計・機能設計に基づく分子創成

- 6-1 超高速計算機がもたらす分子技術の革新
平尾 公彦 (理研 次世代分子理論ユニット) …26

7. 展望

- 7-1 分子性、合成分子技術、分子技術イニシャティブ
村井 眞二 (奈良先端大)・中村 栄一 (東大理) …30

参考文献 1 「国際化する化学-我が国の取るべき戦略は？」

(化学と工業 2010 年 3 月号より転載) …33

参考文献 2 「科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」概要」 …35

技術俯瞰における分子技術の多面性

(独) 科学技術振興機構、日本電気(株) 曾根 純一

これまでエレクトロニクス産業を牽引してきた半導体の微細化による電子機器の性能向上が、もはやストレートには期待できなくなっている一方で、時代は性能向上だけでなく半導体では実現できない多様な機能を持ったデバイスを要求している。また、環境・エネルギー問題が深刻化する中、高性能なエネルギーデバイスの実現、環境負荷の小さな製造方法が必要となっている。一方、バイオの世界でもタンパク質構造の分子レベルでの理解が進み、創薬、医療、健康といった領域での新たな展開が期待されている。これらに答えるために、分子レベルからの素材、さらにはデバイスのイノベーションが求められており、それを可能にするだけの分子レベルのシミュレーション技術、計測技術、分子科学としての知の蓄積が整いつつある。材料科学は世界の中で日本が強さを発揮してきた学問分野であり、それをバックに素材産業、電子部品産業では世界をリードする製品群も多い。材料科学の一分野として発展しつつある分子科学も日本が世界のリーダーとして一翼を担っており、これまでの蓄積された知見を基に、広範な応用を可能にする技術として発展が期待されている。そのポテンシャルの一端は既に実用に供されつつある有機 EL、分子標的薬、さらには近年、研究開発が盛んな有機太陽電池、有機エレクトロニクス等に見ることができる。今後はさらに、医療・健康、情報通信、環境・エネルギーなど幅広い応用分野からの要請が高まる中であって、それらに的確に応えていける「分子技術」の体系を構築し、その基盤技術を向上させ、有効な分子材料の設計指針を取り揃えておくことが重要になってくると考える。

以上の問題意識から、(独) 科学技術振興機構 (JST) 研究開発戦略センター (CRDS) では、東京大学の中村栄一教授にコーディネータをお願いし、平成 21 年 12 月 17 日に、『科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」』を開催した。ワークショップでは、「分子技術」を分子科学の知見を基に、分子を設計・合成・操作・制御・集積することによって、分子の特性を活かしながら所望の機能を創出し、広範な応用に結び付けていく一連の技術と定義し、「分子技術」が今後の日本にとって基幹的な技術になり得るかを検証し、技術の方向性や具体的な研究開発課題を抽出する目的で開催した。上記 WS では、「分子技術」を、その属性・機能から、「設計・創成」、「電子状態制御」、「形状・構造制御」、「集合体・複合体」、「変換・プロセス」、「物質輸送」といった 6 つの要素に分け、それぞれの領域で有識者からの講演を頂き、議論を深めた。これらの議論を通じて、分子技術が提供する多様な機能、多様な応用への可能性が浮き彫りにされ、国として「分子技術」の研究開発を推進、加速し、日本の産業競争力に結び付けていくべきとの認識を新たにした。そのためには、化学、物理学、生物学、情報学、工学など、広範な学術分野・技術分野間の連携・融合が必須であり、その象徴ともいえるナノテクノロジーの進化が重要である。CRDS では、今回の化学会でのシンポジウムを口火に、応用物理学会や物理学会などにもシンポジウム開催を働きかけ、「分子技術」に関して異分野融合の研究の流れを産み出し、国への積極的な提言に結びつけていこうと考えている。

本講演では以上の観点を基に、広範な応用分野で多様な役割が期待される「分子技術」を俯瞰し、後に続く分子科学、分子技術に関する専門的な講演の口火にしたいと考えている。

分子技術の展望

東大理 中村 栄一

「化学」は解析と理解を主目的とする「分子の科学」と、物質設計と制御という「分子の技術」的側面を合わせ持つために、「分子科学vs. 分子技術」という対比概念が希薄であった。近年の「ナノ科学・技術」の発展の伴い、材料開発やバイオメディカル研究における分子性物質がますます重要性を増す世界的背景の中で、村井眞二阪大名誉教授が最近提案した「分子技術」という概念を今、明確に認識し、さらに分子技術と社会要請を融合させた研究分野を新しく定義する必要がある。それは、分子および有機エレクトロニクスから化学生物学、創薬・医療、工業生産技術などの出口を意識して、「合目的性を持った機能分子を特定し、これらの分子の機能設計と機能発現を目的とした技術」を推進するための広い研究領域であり、「ナノ科学・技術」の化学的側面を広く包含する研究および事業活動である。

尚、趣旨についてはセッション7「展望」の要旨を参照のこと。

分子科学から分子技術へ

東大工 相田 卓三

Google で「分子技術」と入力すると、「高分子技術」という単語はヒットするが、「分子技術」という言葉は見当たらない。「技術」という言葉がついている以上、私が理解する限り、多分に社会問題との関連を意識した言葉である。エレクトロニクス、エネルギー、環境、医療の諸問題にこたえる「知的分子を基本とした材料やインターフェース」の構築を意味する—これが個人的な理解である。特に理学系の方の中には「なんだ、出口指向の応用研究をやれというのか」とおっしゃる方がいるかも知れない。しかし、まじめに応用を考えてみることにより、未だ未発達の重要な基礎科学の分野が存在することに気付かされるという可能性は少なくない。

「高分子科学」で扱う分子—すなわち高分子—は古くから社会問題に立ち向かうことを間接的にも直接的にも求められてきた。この分野にノーベル化学賞の受賞者が数名存在することから明らかなように、重要な基礎を含んだ学問分野でもある。しかし、今私たちの身の回りに存在するものを見渡すと、高分子材料なしでは私たちの生活がなりたないのは自明である。

高分子科学の教育は、「合成」と「物性」のセットでなされるのが常であり、合成関連の授業の最初には、身の回りの機能性高分子に関する概要が説明され、物性関連の授業の最終段階には、高分子の応用研究に関する解説がなされる。高分子化合物は立派な有機化合物であるが、しかし、理学部系の学科で高分子に関する授業がなされることは稀であり、このために、卒業生の高分子に関する理解は破格に小さいように思う。社会に出て、企業にはじめて有機化学と高分子が結びつき、高分子を開発研究の対象にするようになる—というのが実用である。

私自身の教育のバックグラウンドが高分子化学であるからといって、私は高分子至上主義では毛頭ない。しかし、「分子技術」という戦略を推進する上で重要なことのひとつは、その根幹となる教育の確立である。「有機化学」の分野で教育を受ける学生に乏しい「物性」という要素が高分子には存在し、高分子研究者が「技術」を意識する頻度は有機化学研究者よりも100倍以上多いという事を忘れてはいけない。

私自身の研究は著しく基礎的であるが、意識の上では、エネルギー(バッキーゲル、グラファイトナノチューブ、液晶性半導体など)、環境(アクアマテリアル)、医療(モレキュラーグルー)の諸問題に立ち向かって行きたいと考えている。これらの研究のキーワードは、分子間相互作用の高度な制御、いいかえると、「分子を接着させたり、はがしたりする科学」である。

多くの優れた有機半導体が設計・開発されているが、デバイス化における金属電極表面との接合をどうしたらよいかは未解決問題である。そこに多くの英知が注がれなければ、有機半導体デバイスがシリコンの半導体に置き換わることはない—と私は考えている。金属電極表面を意識した有機化学・分子技術は存在するのか？有機化学のコアの人間が情熱を持って心血を注げる分野なのか？おそらく、今現在はそうではない。そんなことをやっている有機化学者としては三流あつかいされる可能性もある。しかし、10年後はどうだろうか。立

場が逆転するかもしれない。あるいは、第一線の有機化学の研究者が同時にその問題に挑戦するようになるかもしれない。若い皆さんは、10年後まで待つことなく、時代を先取りされてはいかがでしょうか？

小職とバイオとの接点は、バイオ分子に選択的に接着し、情報を伝え、必要次第では何もなかったかのように離れる—そんな分子の設計である。幸い東大の医工連携プロジェクトに加えていただく機会を得た。「医療」に関心がなかったわけではないが、そのプロジェクトを通じて、意識をなかば強制的に「医療」に向けることとなり、しかし、学生と真剣に向かうことで、生理的環境下でも働くモレキュラーグラーを開拓するに至った。グアニジン表面に有する水溶性 dendrimer の開拓である。この研究は期せずしてアクアマテリアルの開発にもつながった。つまり医療だけでなく環境に関連する研究も同時にプッシュすることとなった。タンパク質や核酸の表面に多価相互作用で接合することを意識してデザインした dendrimer が、粘土を構成する「粘土ナノシート」の表面に強く接着するとは当初考えてもいなかった。



「分子技術」の重要な方向性: ナノスケールからマクロスケールまでのあらゆる異種界面の間に存在する諸問題に力が向けられることになるのではないかと—それが私のパースペクティブである。高分子が担っているある意味のバルクの機能を分子技術が目指すというのはあまりに虚しい。有機と無機、有機と金属、有機とバイオ分子表面などあらゆる物質間での情報を円滑に交換するために分子技術という考え方は著しく有効である。

これからの日本を支える若い有機化学者や学生諸君にぜひ「分子技術のあるべき姿」を考えていただき、会場で意見交換をさせていただければ幸いである。

創薬基盤設備の充実に向けて — 創薬は分子科学と分子技術の融合研究 —

東京大学大学院薬学系研究科・教授 長野 哲雄

I. 概要

ライフサイエンス研究において、研究成果の国民への還元の見地から“創薬”に言及することが多い。しかし、創薬の上流に位置する探索研究から下流の開発研究までを遂行するための基盤設備が大学等の公的研究機関において整備されてこなかったために、現在公的研究機関による本格的な“創薬”研究は実質上遂行できない状態にある。このため、日本において公的“創薬”研究はこの基盤の欠如により諸外国に比べ著しく立ち後れている（III. 諸外国の現状を参照）。

“創薬”は標的タンパク質の科学（分子科学）と分子技術が融合した研究である。分子技術を展開するためには基盤設備を整備することが重要であり、これに基づいて化合物/薬理活性データあるいは疾患の生体情報などのデータを収集してデータベースを構築する事により、日本全国のライフサイエンス研究者の“創薬”研究の基盤となる（下図）。具体的には、疾患に関連するタンパク質などを研究している全国の研究者との連携・共同研究に基づいて、“創薬”基盤設備を活用して、これらのタンパク質の機能を制御する化合物を見だし、それを新薬開発につなげると同時にそのタンパク質の生理機能の解析、生命現象の解明に寄与する。特に、難治疾患、患者数の少ない稀少疾患（rare and neglected diseases）の治療薬の開発は製薬企業が主として経営的観点から研究を逡巡するため、死に至る重篤な疾患があるにもかかわらず、放置された状態になっているが、これらの難治・稀少疾患の治療薬の開発は公的研究機関が行うべき最重要課題である。

基盤整備により、国民への還元が可能な明確な出口の見える成果を挙げることができ、創薬研究者の人材の養成に有用であり、我が国の創薬力の底上げに貢献できる。

II. 整備すべき基盤設備

前記目的を達成するために必要となる基盤設備を以下に示す。

1. 十万種類を超えるロボット制御の化合物ライブラリー施設、化合物の収集（天然化合物を含む）/ 保管体制の構築
2. 高効率スクリーニングセンターの設置
3. 理論創薬研究の基盤となる *in silico* アプローチのための大型コンピュータ設備
4. 最適化研究のための化学合成センター
5. 毒性と体内動態などの前臨床試験のための関連設備
6. 創薬研究データベースセンター

これらの基盤に基づいて、大学等我が国の研究施設間で“創薬”研究のネットワークを構築し、疾患に関連するタンパク質などの生体分子を研究しているライフサイエンス研究者と連携研究・共同研究を行う。

III. 諸外国の現状

米国においては NIH Chemical Genomic Center を中心として、Molecular Libraries Initiative の第一期 Pilot Phase が 2004 年より 2008 年まで研究総額\$385M (約 400 億円) で行われ、この中で化合物ライブラリーの整備が行われ三十数万種類の化合物が保管・管理された。これを用いて全米 10 カ所にスクリーニングセンターを設け、新規医薬品の候補化合物探索研究が行われた。第二期の Production Phase (2008 年-2014 年までの計画) が第一期と同規模予算で開始されている (Nature Chemical Biology, 5, 441-447 (2009))。EU においては半官半民の European ScreeningPort 等の組織があるが、最近では European Strategy Forum on Research Infrastructures (ESFRI) が創薬の観点から化合物ライブラリーおよびケミカルバイオロジーを取り上げている。アジアでは、韓国、台湾が積極的に化合物ライブラリーを構築しており、特に韓国では 2008 年より国のプロジェクトで合成された化合物は全て収集保管することが決められた。

分子技術としての創薬研究の概念図

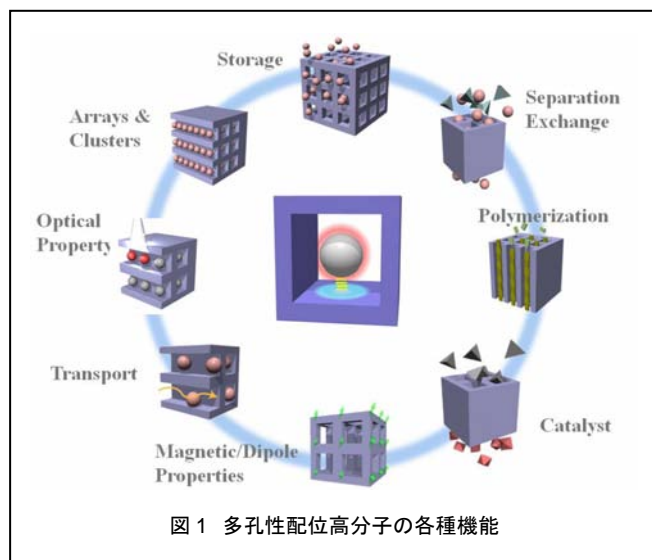


無機・有機複合系での分子技術

京都大学物質－細胞統合拠点・副拠点長・北川 進

1. 概要

金属イオンと有機分子をうまく組み合わせると、非常に規則的なマイクロ孔(2nm以下のサイズ)をもつ骨格構造ができるという研究が十数年来進んできている。我々はこのような物質をPCP (Porous Coordination Polymer) と呼んでいるが、MOF (Metal-Organic Frameworks) とも呼ばれている。これまで、主として結晶のバルク形態(ミクロン以上のサイズ)における構造と機能開拓に注目されて研究が非常に進んできた。現在、年間2000本くらい論文が出る時代になり、データベース化へかなり進んできている¹。この多孔性材料の進歩はますます加速され、材料としての斬新性と高機能化に向けて、ナノ



からメソ領域 (10~100nm程度の領域) のサイズと形態の制御 (薄膜結晶、コアシェル、layer-by-layer 層構造など) が、今最も注目されている技術となっている。すなわち分子をビルディングブロックとして多様な化学的および物理的機能性材料を簡便に得られる時代が到来しつつある。

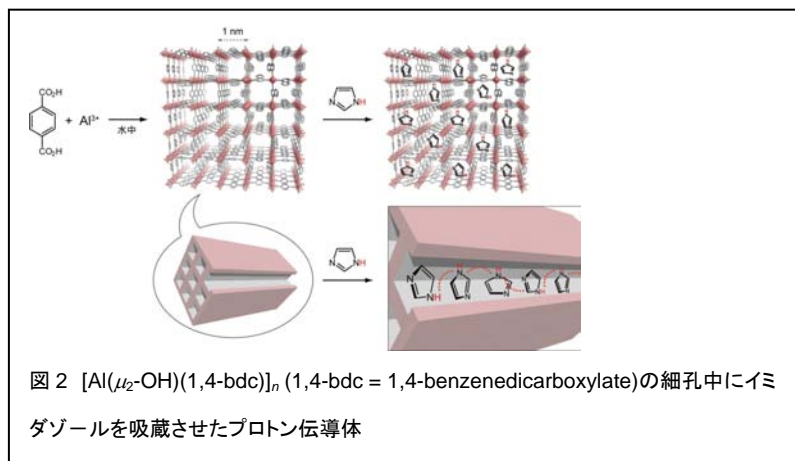
2. 俯瞰

まずバルク材料の機能の特徴を挙げると、1) 非常に比表面積が大きく、2) 細孔径も大きいものが、3) 合理的に合成できる。すなわち、設計性があり、望みの構造を一から作ることができる。4) 最も重要な点は、有機分子と金属イオンの結合を使うので、柔軟な骨格を持ち、結晶でありな

がら体積や形態をかえる応答性のあるものが合成できる。機能面での出口としては、貯蔵、分離、触媒、イオン輸送および電気伝導など(図1)が考えられる。

この材料の設計性としての好例をあげてみよう。我々はアセチレンの貯蔵および二酸化炭素との認識、分離に挑戦した。アセチレンの形に合わせて、細孔表面と水素結合できるように分子設計すると、室温爆発限界の200倍の濃縮度でも安定に貯蔵できるということがわかった²。貯蔵材の場合、材料の重さを軽くする研究は重要である。構造をつないでいる金属元素の研究例としては、軽い金属、すなわち、マグネシウム、アルミニウム、カルシウム、などを使う例もあり、その材料の報告例はますます増加している。

この物質の細孔はサイズが非常に均一であることから、ナノサイズの反応容器として制御されたポリマー合成も可能である。モノマーを均一に入れておき、そこで反応を生じさせると、非常に立体規制されたポリマー構造ができ上がる。ポリアセチレン合成の例では、通常バルクスケールの容器(フラスコや反応釜)ではシスアセチレンが一定量混入してきて電気伝導性が悪くなるが、細孔物質で作ると立体配置の規制ができてトランスアセチレン体が選択的に生成する³。



次に、燃料電池の電解質膜材料において新しいプロトン伝導膜としての可能性を持つPCPを合成できた例を紹介する。水を担体とするプロトン伝導は100℃までしか使えないが、イミダゾール担体としてナノチャンネルに導入すると、150℃に加熱しても安定に保持されること、さらに、細孔内で規則配列することにより、効率のよいプロトン伝導体

ができることが明らかになった⁴。これはPCPと担体の多様性を考えると今後、ますます研究が進められ多くのプロトン伝導体が合成されるものと期待される。図1にあげた機能は現在までに見いだされたものである。本物質は化学機能のみならず物理機能までもつ新しい多孔性材料としての地位を築くものと思われる。

3. 今後の発展

高機能の多孔性材料を実現するやり方には二通りある。一つは、一つの孔に全部機能を入れる、これを多能性と呼びます。もう一つは、一つ一つ別の機能を持った物質を張り合わせていくというハイブリッドの考え方である。一つの孔に全部機能を入れるというのは、まさに孔自体が応答する、というイメージだが、張り合わせるやり方は機能と構造の設計をしやすいという点で優れている。これを実現するために、ナノ～メソ形態、すなわち薄膜結晶、コアシェル、layer-by-layerでくみ上げた結晶(膜)を作っていくことが重要になる。この5年で急速に研究が進められてきた。我々はコアシェル型のPCP(PCP-on-PCPまたはMOF-on-MOFと呼ぶ)の合成に世界で初めて成功した⁵。このような構造体を実現すると、たとえばコア結晶の中で貯蔵、外部結晶は分離機能を持たせた選択的貯蔵機能を持つ材料が生み出される。PCPの柔らかさも大きな特徴でありセンサー、応答性材料としての将来性も大いに期待される⁶。もう一つは、サイズを小さくするナノ結晶の合成研究であり、確実にこの研究例は増加しつつある。

今後の研究の方向は、すでに述べた機能のインテグレーションがあるが、さらに発展させて、ナノ結晶をつくり、その表面を外部環境に順応するように修飾することによってさらに複雑な機能構造体、例えば、細胞、組織にまで適用可能な材料を生み出していくことが考えられる。構造の形態としてはナノ結晶、ナノロッドだけでなく、層状にlayer-by-layerでつくることによって、一種の膜状のイオン、分子のトランスポーターのような材料をつくり、このチャンネル空間を一方向性を持って運搬するものまで設計、実現するという方向に進みつつある。

(1)S.Kitagawa, et.al., *Angew.Chem.Int.Ed.* **2004**,43,2334.

(2)R.Matsuda, et.al, *Nature*, **2005**,436, 238. (3)T.Uemura, et.al., *Chem. Soc. Rev.* **2009**, 38, 1228.

(4)S.Breckaew, et.al., *Nature Mater.* **2009**, 8, 831. (5)S.Furukawa, et.al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 48, 1766.

(6)S.Horike, et.al.,*Nature Chemistry*, **2009**,1,695.

さらなる期待を集める分子エレクトロニクス

住友化学株式会社 筑波研究所 大西 敏博

1. はじめに

「分子エレクトロニクス」は狭義には、単一分子によって動作する素子あるいはその集積体を意味するということであるが、本稿ではもう少し広義に解釈して、分子の機能を用いた素子、エレクトロニクスとして論じたい。分子の機能を用いたものとして、1977年に発見された導電性ポリアセチレンがまず挙げられる¹⁾。これを契機として、多くの導電性高分子が開発され、種々の応用が開始された。このような新分野の開拓、大きな展開に対して、白川先生らは2000年にノーベル化学賞を受賞された。

導電性は π 共役系高分子に電子受容体や供与体をドーピングすることで発現する。共役系高分子自体はバンドギャップが1~3eVの有機半導体として、電荷の輸送、光の吸収・発光の機能を有している。導電性高分子の応用としては、コンデンサーへの応用が大きなものであるが、ここでは半導体素子への応用、特に、共役系高分子を用いた有機EL素子について述べたい²⁾。

ここで共役系高分子の特徴を纏めてみると、以下の点が挙げられる。

① 生体との適合性

炭素、酸素、窒素の原子から構成された共役系材料であり、 π 電子が非局在化していることから、半導体としての性質以外に、励起エネルギーが可視光領域にあり、光吸収、発光などの特性は生体の感受波長範囲をカバーしている。

② 省エネルギー、省資源プロセス

無機半導体のように高温のプロセスでなく、室温での製造プロセスが可能で、しかも、印刷やインクジェットにより必要なところに機能を発現する材料を配置できる。

③ 機能の多様性

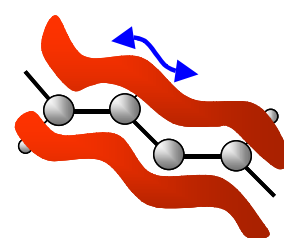
ヘテロ原子含有芳香族化合物や置換基でその特性が大きく変化することから、機能が非常に多様性に富み、さらにその設計が分子軌道計算により可能である。

これらの特徴から、共役系高分子を用いた有機ELは次世代ディスプレイとして注目を集めている。

2. 共役系高分子の構造と特性³⁾

ポリアセチレンを始めとする共役系高分子は主鎖が sp^2 の炭素が結合したものであり、芳香環などが直接炭素-炭素結合で連結した材料も含まれる。これらもHOMO-LUMOギャップは自由電子モデルでは分子鎖長が無限大であれば、ゼロとなるが、実際にはパイエルス転移が起こり、有限のギャップを生ずる。たとえば、ポリフルオレンやポリフェニレンでは青色、ポリフェニレンビニレンでは黄緑、ポリチオフェンでは赤の蛍光を有している。

一方、電極から注入された電荷は分子中にカチオンラジカルやアニオンラジカル(ポーラロン)となり、伝導していく。ここで、高分子中で電荷は、分子内と分子間の移動過程を経由して電極から内部へ移動することになる。高分子鎖長より長い移動距離で測定した電気伝導度や移動度はこれら二つの過程が混在したものとなっ



非局在化
Eg=1-3eV (吸収と発光)
(Si, GaNに値に相当)

図1. 共役系高分子

ていると考えられる。

最近、分子内での移動度を測定する方法が開発されている。電荷の移動距離が分子内程度に相当する周波数のマイクロ波を照射し、吸収を調べる方法である。平面性の高い高分子で非常に高い移動度が報告されている。一方、フィルムで測定した値と分子内の移動度に大きな差がないとの報告もされている。

3. 高分子有機 EL 素子³⁾

有機 EL 材料は、図 2 に示すように低分子系と高分子系に大別される。高分子有機 EL 材料には、共役高分子系、非共役高分子系が知られている。共役系高分子は蛍光性や燐光性の材料開発が行われているが、非共役系高分子は燐光性材料を中心として開発が行われている。

低分子と高分子の中間に位置するものに、 dendrimer がある。 dendrimer は低分子のように、構造に曖昧さがないが、巨大分子である。溶解性がよいことも特徴である。

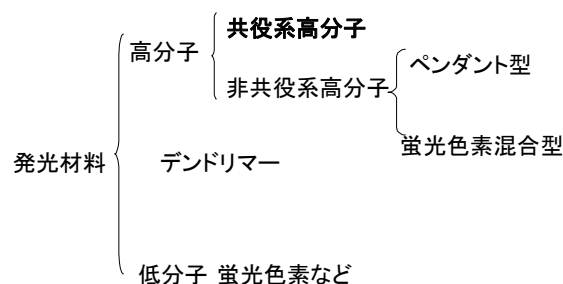


図 2. 発光材料の分類

素子の構造や製造プロセスの観点から図 3 に示されるように低分子と高分子有機 EL の特徴が纏められる。低分子有機 EL 素子は多層構造の複雑な構造を有しており、製造は真空蒸着が主に使われている。一方、高分子有機 EL 素子は 2 層構造と比較的単純な構造であり、有機層の製膜は主にインクジェットなどの印刷プロセスが使われている。

有機 EL 材料をディスプレイに形成する点で、ピクセルにパターンニングできることが重要である。高分子の場合には溶液とすることで、製膜方法に、インクジェットなどの印刷技術が使えることになり、大型基板での 3 原色材料の塗り分けが容易に行えるなど、大きな特徴を発揮する。高分子や dendrimer はこの観点から有利な材料と言える。さらに構造が単純であることも溶液からの製膜では大きな利点となる。

4. 高分子有機 EL 材料の設計

高分子の分子設計の特徴としては、共重合でいろいろな機能を組み込めるということがある。共役系高分子は、そのものが有機半導体であり、一般的に正孔や電子の注入・輸送能や電子・正孔の再結合による励起子生成と発光の機能を有する。図 4 に示すように、共役系高分子を構成するユニットにおいて、発光、色、電荷輸送等の特性が不足する場合に、発光性、電子輸送性、正孔輸送性を有する別のモノマーと共重合することで全体の特性を調整することができる。これにより発光色や電荷の注入バランスを制御することができ、大きく特性を向上させることができる。

低分子有機ELと高分子有機ELの特徴比較

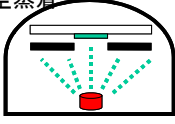

| | 低分子有機EL素子 | 高分子有機EL素子 | | | | | | | | | | |
|-------|--|--|-------|-----|-------|-------|------|--|----|-----|-------|------|
| プロセス | 真空蒸着  | インクジェット  | | | | | | | | | | |
| 構造 | 複雑 <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <tr><td>陰極</td></tr> <tr><td>電子輸送層</td></tr> <tr><td>発光層</td></tr> <tr><td>正孔輸送層</td></tr> <tr><td>正孔注入層</td></tr> <tr><td>透明電極</td></tr> </table> | 陰極 | 電子輸送層 | 発光層 | 正孔輸送層 | 正孔注入層 | 透明電極 | 単純 <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <tr><td>陰極</td></tr> <tr><td>発光層</td></tr> <tr><td>正孔注入層</td></tr> <tr><td>透明電極</td></tr> </table> | 陰極 | 発光層 | 正孔注入層 | 透明電極 |
| 陰極 | | | | | | | | | | | | |
| 電子輸送層 | | | | | | | | | | | | |
| 発光層 | | | | | | | | | | | | |
| 正孔輸送層 | | | | | | | | | | | | |
| 正孔注入層 | | | | | | | | | | | | |
| 透明電極 | | | | | | | | | | | | |
| 陰極 | | | | | | | | | | | | |
| 発光層 | | | | | | | | | | | | |
| 正孔注入層 | | | | | | | | | | | | |
| 透明電極 | | | | | | | | | | | | |
| 特徴 | 実用化で先行 特性向上で先行 | 大面積が容易 低コスト、量産性 | | | | | | | | | | |

図 3. 低分子 EL と高分子 EL の比較

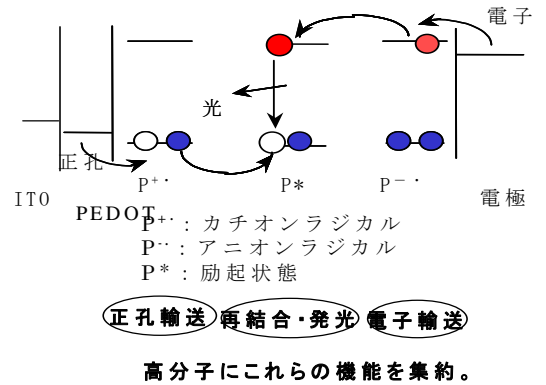


図 4. 高分子 EL の動作原理と必要機能

共重合による特性の制御についての例を図 5 示した。フルオレンホモポリマーは比較的高い正孔の移動度を有している。これに正孔輸送性のある芳香族アミンを共重合していくと、初期は移動度が低下し、共重合比が高くなるにつれて、移動度は増加する。これは少量のアミン成分は正孔トラップとして作用するが、量が増えるにつれて、アミン間の正孔がホッピングパスが生成して移動度が高くなることで説明される。一方、発光効率を見ると、移動度の低い比率で高い傾向を示している。これは電子の移動度が低いために、正孔の移動度が電子のそれにバランスすることで発光効率が高まったものと考えられる。

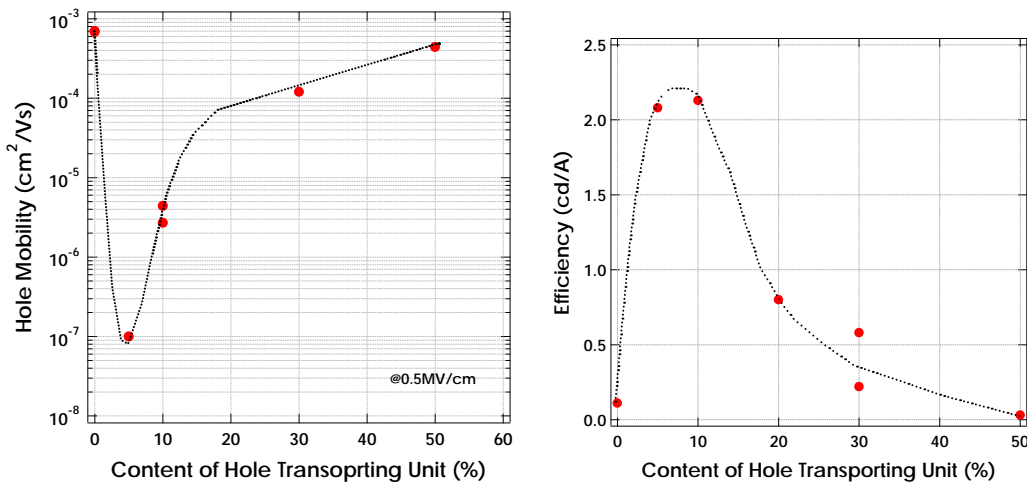


図 5. フルオレンーアミン共重合体の移動度と発光効率のアミン濃度依存性

5. 高分子有機 EL 発光材料特性⁴⁾

最新の高分子発光材料の特性を表1に示した。電荷輸送と発光を両備するユニットの開発や安定なインターレイヤを開発し、さらに素子作成条件を最適化することで、その特性は低分子型発光材料に肉迫しており、

小型ディスプレイ用としてほぼ実用化の領域に達したと考えている。今後は大型ディスプレイ用の特性の達成や、高分子の特性を生かした素子構造、プロセスを合わせて開発することで市場を拡大したいと考えている。

表1. 最新材料の特性

| | 赤 | 緑 | 青 |
|-----------------------------------|------------------|------------------|------------------|
| 効率(cd/A) | 31 | 28 | 8 |
| 色(C.I.E) | x=0.63 y=0.37 | x=0.35 y=0.60 | x=0.14 y=0.21 |
| 半減寿命 (hrs)@1kcd/m ² | 350k | 200k | 26k |

6. 今後の展開と分子エレクトロニクス

共役系高分子は発光材料以外に電荷の輸送機能を利用した有機トランジスタや光の吸収・電荷輸送の機能を利用した有機薄膜太陽電池にも利用が始まっている。共役系高分子の持つ多様な機能をそれぞれ用いた応用であるので、溶液からの塗布印刷で素子の製造が可能である利点を保持しつつ、機能向上は図ることが出来れば、大いに応用が広がるものと期待される。

一方、単一分子素子については、1970年台に分子にトランジスタの動作を行わせる分子構造などの提案がCarterらによって行われた⁵⁾。しかしながら、分子の合成方法や分子を外部回路につなぐ手法の開発も未成熟の状態であり、関心が薄れて行った。しかし、最近ではSPMを用いて、ベンゼン等の有機分子の電気伝導度が測られているなど、関心が高まっている。さらに、和田らは外部回路との接続方法を種々提案しており、さらに、トランジスタとして動作する分子についても提案がなされている⁶⁾。

共役系高分子の合成においても一般的な鈴木カップリングで重合成長が制御され、分子分布の狭い方法が開発されている⁷⁾。合成技術、評価技術の進展があいまって分子素子、分子コンピュータが実現される日も近いと期待される。

文献

1) [H.Shirakawa, et al., J.Chem.Soc.,Chem.Comm.,578\(1977\).](#)

2) 大西、中野、土居、野口:特開平 3-244630

3) 高分子先端材料 One Point 高分子EL材料—光る高分子の開発— 高分子学会編集、大西、小山著

4) 関根 FPD インターナショナル 2009

5) F.C.Carter(ed), Molecular Electronic Device, Marcel Dekker Inc(1982)

6) 和田、機能材料、**28**,87(2008)

7) A.Yokoyama, et al., J. Am. Chem. Soc., 2007,**129**,7235

自発光柔軟表示システムの市場と開発競争—分子フォトンクスへの期待

NHK 放送技術研究所 時任 静士

1. はじめに

今後のディスプレイ開発の方向性は、利便性の改善と究極の高画質化、さらには高機能化であることは言う前でもない。「いつでも・どこでも・誰でも」が高画質の映像情報を見たり必要なデータ情報を入手できたりするユビキタス社会がインターネットやデジタル放送の普及に伴い現実化してきた。必然的に携帯型ディスプレイへの要求は高まっている。非常に薄くて軽く、形状を変形して便利に持ち運びでき、壊れにくいフレキシブルディスプレイが実現できれば、ユビキタス社会の利便性がますます高まることが想像できる。そのようなディスプレイ技術は、将来的には大画面のシート型ディスプレイへの展開も期待できる。家庭への大画面ディスプレイの導入を想定した場合、柔軟に形状を変えることのできる超軽量のフレキシブルディスプレイは戸口からの搬入が容易であり、限られた居間スペースへの設置が可能であると予想される。また、駅や空港などの公共の場所での曲面壁に容易に設置可能な大画面情報表示媒体としても応用が期待される。

更に、期待できる効果として環境への優しさがある。プラスチックフィルムを基板とした超薄型のフレキシブルディスプレイは従来のディスプレイと比較して桁違いに軽く、容積が小さい。また、プラスチックフィルムの耐熱性からその製造方法は必然的に低温プロセスとなる。このことは製造エネルギーの省エネルギー化につながり、また超軽量なので工場からの運送にかかるエネルギーを低減できる可能性がある。このように、超薄型フレキシブルディスプレイは環境に優しい「グリーンディスプレイ」としても期待できる。

近年、ようやく柔軟性を付与した電子ペーパーの開発が加速している。有機 TFT と電気泳動表示を組み合わせた反射型のディスプレイである。今後、この分野の市場は拡大することが技術調査会社によって公表されており、反射型と自発光型を含めた市場は、今年、約 500 億円、2013 年には約 2500 億円が予測されている。ただ、自発光型である有機 EL などを適用した応用では 60 億円とわずかである。しかし、その成長を見ると将来飛躍的に伸びる市場であると予測されている。フルカラーで動画用表示ができるフレキシブルディスプレイは究極的なディスプレイであり、今後その方向へ向かうことは間違いない。

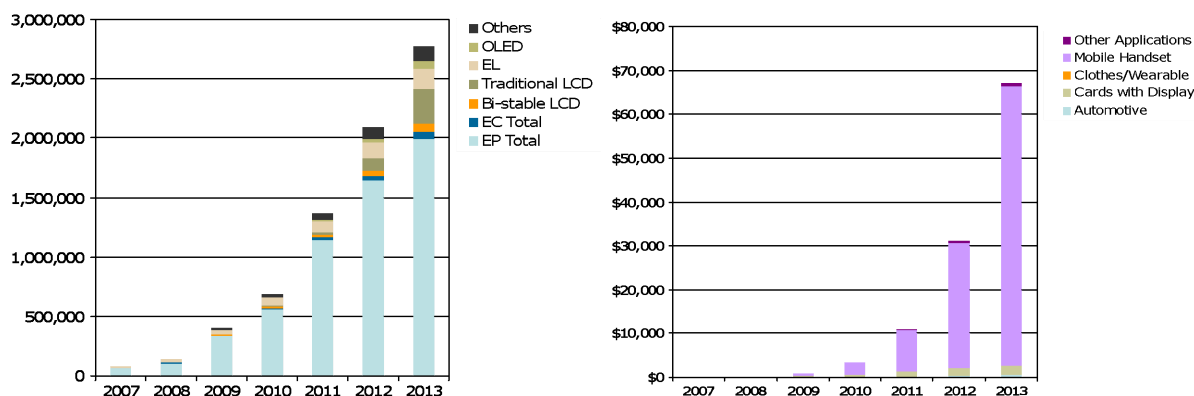


図1 フレキシブルディスプレイの市場予測 (iSupply より提供)

左がフレキシブルディスプレイ全体、右が有機ELを適用した市場、単位は千ドル

2. 要素技術

フレキシブルディスプレイを実現するために必要な要素技術を表1に示す。下地となる基板、映像を表示する技術、画素の駆動技術が重要であり、この他にそれらの作製技術がある。白黒表示や静止画を目的とした電子ペーパーの場合には、電気泳動、コレステリック液晶や電子粉流体などが表示技術としてあり、着実に実用化が進められている。一方、フルカラー動画表示となると、必然的にその候補は限られる。筆者らは有機 EL 素子と強誘電性液晶に着目し、2004 年頃からそれらを用いたフルカラー動画用フレキシブルディスプレイの研究開発を進めている。将来の大型化、高精細化、高画質化を考慮すると、薄膜トランジスタ(TFT)で画素を駆動するアクティブ駆動のディスプレイが本命となる。また、フルカラー動画表示を要求するのであれば、自発光の有機 EL が最有力であることは間違いない。他のディスプレイ技術と比較しても圧倒的に早い動作が可能である。薄膜への電流(電荷)注入、再結合、発光のプロセスをマイクロ秒でやってのけるデバイスである。将来、もし、最近話題の3Dをフレキシブルディスプレイに取り込むのであれば、さらにその強みを発揮できると思われる。

表 1 フレキシブルディスプレイの要素技術

| 基板 | 表示技術 | 駆動技術 |
|---------------------------|---|--|
| プラスチックフィルム 金属箔 薄ガラス | 液晶(LC) ・強誘電性 ・コレステリック 有機EL ・蛍光、リン光 ・低分子、高分子 電気泳動 電子粉流体 | シリコンTFT ・アモルファス ・マイクロ結晶 ・多結晶 有機TFT ・トップコンタクト、ボトムコンタクト ・低分子、高分子 酸化物TFT |

3. ディスプレイ試作の現状

自発光である有機 EL を表示部に使ったフレキシブルディスプレイに限定して、その開発動向をみてみると表2のようになる。カラー動画表示が実演できているものは数えるほどしかない。そのサイズは小型の3~5インチレベル、画素数はQVGAレベル以下である。理由の一つとして液晶や電子ペーパーの場合のアクティブ駆動では1個のTFTでよいが、有機ELの場合は画素選択以外に電流を供給する駆動用TFTが必要である。そのため、配線がかなり複雑となり、その引き回しのため、配線間の短絡が起りやすく、それだけに試作の難易度が高くなる。

基板の選択に関して言えば、LG電子やLGディスプレイのように実用的なステンレスを採用する例が多い。TFTも従来の半導体技術が適用できるシリコン系が主流である。その中で、プラスチック基板

表 2 フレキシブル有機ELディスプレイの開発状況

| | SDI | LGE | LGD | Sony | NHK |
|-----------|-------------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| サイズ (インチ) | 5.6 | 3.5 | 4.0 | 2.5 | 5.8 |
| 画素数 | | 176(RGB)x220 | 320(RGB)x240 | 160(RGB)x120 | 213(RGB)x120 |
| 基板 | 薄ガラス板 | ステンレス | ステンレス | プラスチック | プラスチック |
| TFT | Poly-Si TFT | 酸化物TFT | a-Si TFT | 有機TFT | 有機TFT |
| 有機EL | トップエミッション | トップエミッション | トップエミッション | トップエミッション | ボトムエミッション |
| 備考 | | | | オール有機型 | オール有機型 |

と有機 TFT に拘っているのはソニーと NHK だけである。軽量性、コスト、安全性等を考慮するとプラスチックが理想的である。また、有機 TFT に関しては、低温での印刷形成が可能であるため、製造エネルギーを抑えた低コストプロセスが期待できる。無論、短期的に実用化を狙うのであれば、耐熱性やガスバリア性に優れたステンレスであり、従来プロセスが適用できるシリコン TFT が優位かもしれない。今後、いかにして 10 インチを超えるディスプレイを作製するかが大きな課題となってくる。特に、プラスチック基板と有機 TFT を採用する場合は、従来の半導体プロセスをそのままは適用できないため、有機デバイスに特化した製造プロセスを開拓する必要がある。プラスチック基板の抱える課題の中で最も重要となるのが大画面化と高精細化である。プラスチックは本質的に熱膨張係数が大きく、吸湿・乾燥による膨張・収縮、使用可能な溶媒の制限等がある。また、薄くて柔軟なため、ハンドリングの難しさがある。表3にプラスチックフィルムを基板として用いる場合のフレキシブルディスプレイの作製法を示す。現状では、所定のプラスチック基板をガラス板等に張り付け(ボンディング)してから多数の作製工程を行い、全工程完了後にガラス板からはぎ取る方法(直接形成法)を用いている。しかし、この方法では抜本的にプラスチック基板の変形を抑えることはできず、将来の大画面化、高精細化に対応できない。これに対して、転写法と呼ばれる方法がある。ガラス基板上に非常に薄い剥離層を形成した後に有機 TFT と有機 EL 素子を作製し、その後にプラスチックフィルムを張り合わせてガラス基板から剥離する方法である。この方法では 300°C 近い耐熱温度が確保でき、位置精度もガラス基板と同等、使用溶媒の制限も無く、大画面・高精細化の作製技術として期待できる。

表 3 フレキシブルディスプレイの作製法

| | バッチ処理 | | ロール・ツー・ロール |
|-------|---|---|--|
| | 直接形成 | 転写法 | 直接形成 |
| 耐熱性 | △ | ◎ | △ |
| 耐溶剤性 | △ | ◎ | △ |
| 位置精度 | △ | ◎ | × |
| 大面積化 | △ | ○ | ○ |
| 低コスト化 | ○ | ○ | ◎ |
| 備考 |  |  |  |

将来的には、巻き取りながら連続的に作製するロール・ツー・ロール法も期待されている。現状では位置精度等の問題があるが、精度補償を行うことで、低コストで大量にフレキシブルディスプレイを製造できる可能性がある。

分子フォトニクスといった観点から本テーマを考えると、有機分子の持つ特徴を生かした光との関わりあいは、単に表示デバイスだけでなく照明機器や太陽電池、さらには、光を検出するセンサーもその範疇である。有機分子あるいは有機材料だからこそ可能となる特長を整理して、その応用可能性を探求する必要がある。

参考資料

1. G. P. Crawford, flexible flat panel displays, John Wiley & Sons, Ltd (2005).
2. M. Mizukami, et al., IEEE Electron Dev. Lett. 27, 4, 249-251 (2006).
3. I. Yagi, et al., J. Soc. Info. Display 16/1, 15-20(2008).
4. Y. Nakajima, et al., J. Soc. Info. Display 17/8, 629-634(2009).

無機・有機複合系の電子状態制御

東京理科大学 福山 秀敏

1. はじめに

「技術」には「科学」の裏づけが必要であり、科学的な基礎のない“技術”は真の技術とはなりえない。また多くの技術は「物質」を基盤とする。実際「物質科学」による徹底した理解を踏まえて物質が「材料」（社会的に有用な物質）へと変身を遂げ社会にとって重要な技術を支えている例は半導体・磁性材料・高分子等枚挙にいとまない。従って、「分子技術」においても、孤立した分子ではなく分子集団である「分子系」（分子凝縮系）が持つ機能（「分子系の物性」）追求の視点が必須となる。

2. 「物性」の起源: 固体の電子状態

半導体・磁性材料等無機のマクロ結晶材料の構成要素は原子である。半導体エレクトロニクスにおいては1950年代のGe, Si結晶での現象発見から電子状態についての徹底した基礎研究が展開された。これを支えたのは、固体中を運動する電子に対する「バンド理論」である。現在ではバンド計算によってさまざまな可能性が探られるようになっている。しかし、バンド計算は「万能」ではなく、モット絶縁体や電荷秩序系のような「強相関電子系」にはそのままでは適用できない。この場合には、バンド計算を基礎においた「モデル計算」が回答を与える。このように「定量性」を追求するバンド計算と「概念」構築を目指した「モデル計算」の実効的な連携によって始めて多彩な物性の理解が可能となる。「理解」から一步進めて「設計」となるとステージが違う。実際、半導体等では電子状態の人工的な制御は進んでいるが、「室温超伝導」が実現しないことから理解されるように意義ある「物質設計」は一般には容易ではなく「設計」と実際の「物質の実現」の間には大きなギャップがある。

3. 「分子系」の物性: 分子性結晶

1970年代初頭から分子を構成要素とする結晶、「分子性結晶」、が物性物理学・固体化学の分野で大きな関心を集めてきた。「絶縁体」の代表であった分子系における「導電性」の実現がきっかけである。この「導電性」は異なった2種類の分子で構成される結晶における分子間電荷移動（「電荷移動錯体」）によって実現された。初期の顕著な例が TTF-TCNQ である[1]。こうして「分子性結晶」は今では多くの超伝導体をはじめ物性の宝庫の観を呈するまでになっている。それらの成果を踏まえて分子エレクトロニクスへの発展が追求されている。

4. 分子性結晶の電子状態: 分子軌道によるタイトバインディング近似

このように物性物理と固体化学の連携によって発展してきた「分子性結晶」の物性追求の背後にも「バンド理論による電子状態についての微視的な理解」が基盤にある。そこでは、分子を構成している原子個々に注目するのではなく分子を単位とした「分子軌道」をもとに分子軌道間の「跳び移り積分」によるタイトバインディング(TA)近似[2]およびそれを基礎にした電子間相互作用についてのモデルに基づいた理論的考察[3]の成功がある。このTA近似がもつ予言能力は、「単一分子金属」の実現[4]で実証されている。明確な概念（「信念」）に基づいた「物質設計」がこのような明快な形で成功することは稀であり、従って「単一分子金属」は物性探求における「歴史的快挙」といえる。

5. 導電性高分子:ポリアセチレン

分子凝縮系として重要な例として分子性結晶のように高い結晶性を持つ状況ばかりでなく結晶性が大きく乱されている場合もある。典型的な例はポリアセチレンのような高分子系である。導電性高分子では絶縁体状態にキャリアーがドーピングされ導電性が実現している[5]。この状況は概念的にはシリコンのような無機半導体と同様である。ここでも「バンド理論」による電子状態の理解が基盤となっている。

6. 今後の発展:生物物質科学への展開

以上のような分子系の物性探索の興味は自然に DNA やタンパク質で代表される生物を構成する物質へ向く[6]。実際生体関連物質が持つ機能の「絶妙さ」には驚かされる。最良のエレクトロニクス材料である生体関連物質を理解し、そこから機能性材料創成の指針を追求することはさまざまな可能性につながる。とりわけ金属という無機物と有機配位子の複合系とみなせる金属タンパク質は興味深い。これら結晶の周期性を持たない系における電子状態についても TA 的な方法が有効であることは原子を構成要素とする無機「アモルファス系」で実証されている。それは凝縮系の構成に際して個々の構成単位は変化せず(あるいは変化が少ない)単に原子間の繋がりが乱れているだけであるという事実に基づく。しかし、生物関連凝縮系では多くの場合事情が異なる。たとえばアミノ酸から構成されるタンパク質においてはアミノ酸の結合に際して化学反応(ペプチド結合—脱水反応)が起こり元来の孤立したアミノ酸のつながりとは異なる。このようなタンパク質の場合でも系全体の電子状態を個々のアミノ酸の分子軌道を基本にして記述する可能性が最近提示されており[7]、発展が期待される。

参考文献

- [1]L.B. Coleman et al., *Solid State Commun.* **12**(1973)1125.
- [2]T. Mori et al., *Chem. Lett.* **1982**, 1923.
- [3]H. Seo, C. Hotta, and H. Fukuyama, *Chem. Rev.* **104**(2004)5005.
- [4] H. Tanaka, Y. Okano, H. Kobayashi, W. Suzuki, and A. Kobayashi, *Science*, **291**, 285-287 (2001); A. Kobayashi, E. Fujiwara, and H. Kobayashi, *Chem. Rev.* **104**(2004)5243.
- [5] C.K.Chiang, C.R.Fincher,Jr., Y.W.Park, A.J.Heeger, H.Shirakawa, E.J.Louis, S.C.Gau and A.G.MacDiarmid, *Phys.Rev.Lett.* **39** (1977)1098.
- [6]「固体物理」特集「生物物質科学—金属を含む分子系を中心に」、**2008**年**11**月号。
- [7] “Molecular orbital calculation of biomolecules with fragment molecular orbitals”, Shinji Tsuneyuki et al., *Chemical Physics Letters* **476**(2009)104.

グリーンテクノロジーと分子技術

東工大資源研教授 辰巳 敬

1. はじめに

化学変換プロセスの低環境負荷化、省資源化、省エネルギー化を図ることは重要な課題であり、化学変換プロセスを Benign by design とする分子技術が求められている。この際、従来の反応ルートの改良だけでなく、新しい反応ルートの開拓を目指す必要がある。この種の新反応の開発は再生可能な資源を原料とした将来の持続可能な物質生産の基盤となるものである。

分子技術は分子触媒に限るものではない。かつては固体触媒の活性点はしばしば*で表されたが、分子レベルでその活性点構造を理解し、それをフィードバックすることにより、活性点を分子レベルで構築する段階に達しつつある。ここでは、時間の制約もあり、全化学プロセスの 30%を占め、最も基本的かつ重要な工業的反応のひとつであるが、大きな環境負荷をもたらしやすい部分酸化反応に限って述べる。

2. 概要

実験室における合成や小規模プロセスにおける部分酸化反応は試薬酸化の割合が多い。酸化剤試薬は酸化に有効に使用される酸素量が少なく、使用した酸化剤の大部分は廃棄物となる。しかもこの廃棄物はしばしば大量の重金属やハロゲンを含み、ハロゲン系有機溶媒が用いられる場合も多い。理想的な酸化剤は言うまでもなく酸素(空気)である。しかし、過酸化水素水溶液も優れた酸化剤である。過酸化水素は有効酸素の割合が大きく、生成物は水である。分子状酸素による酸化はしばしば過酷な条件を必要とし、また、逐次的酸化による CO、CO₂ の生成もおこし易い。このため、近年、分子状酸素を直接の酸化剤とすることが困難である系において、過酸化水素を用いた選択酸化反応の検討は重要なテーマとなっている。

産総研の佐藤らはアミノメチルスルホン酸—第4級アンモニウム硫酸水素塩—タングステン酸ナトリウム系をはじめとする触媒系を用いたオレフィンエポキシ化など、有機溶媒を使用せず、塩素フリー条件での過酸化水素によるクリーンな酸化を実現している。

東大の水野らは、二原子欠損型ポリオキソタングステートに様々な遷移金属を導入することにより、過酸化水素酸化に非常に高い活性を有する触媒の合成に成功した。二核金属種は図1のような構造をとっているものと考えられている。{Fe(OH)}₂ はメタンモノオキゲナーゼの活性点と類似しており、アルカン、アルケンの過酸化水素酸化に活性であるだけでなく、分子状酸素を酸化剤に用いることも可能である。ここではポリオキソタングステート骨格はいわば無機配位子として機能しているものといえる。工業的には、不均一系触媒として触媒・生成物の分離回収、触媒の再使用を容易にすることが重要であり、そのような試みも行われている。

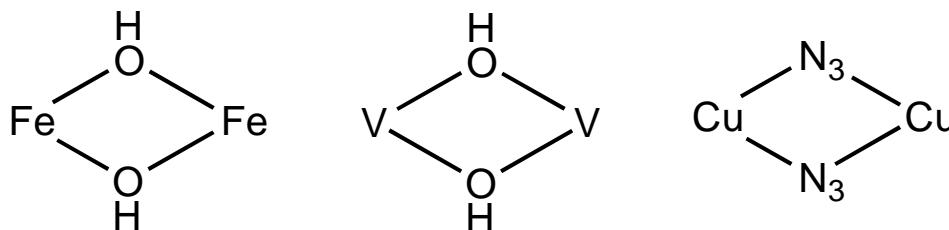


図1 ポリオキソタングステートに置換導入した金属二核種の構造

ゼオライト骨格に Ti 原子を導入した、TS-1 をはじめとするチタンシリケートゼオライトは Ti 原子がゼオライト骨格内に孤立して存在するシングルサイト触媒であり、過酸化水素を用いた各種有機化合物の酸化反応の優れた触媒となる。BASF-Dow は、2008 年、TS-1 を触媒とした過酸化水素酸化によるプロピレンのエポキシ化の大規模プラントの運転を始めた。過酸化水素酸化反応は過酸化水素のコスト面から競争力が問題となってきたが、このように、近年大きな変化のきざしが見られる。

我々は、TS-1 よりも活性の高いチタンシリケートゼオライトを探索し、Ti-MWW が非常に優れた触媒であることを見いだした。MWW 構造への Ti の導入は困難であり、層状の非ゼオライト系の物質が得られ易いが、結晶化促進剤としてのホウ素を大量に添加することによって、Ti-MWW の合成が可能である。さらにポスト合成チタン導入法で、直接合成法よりもさらに高い活性を示す Ti-MWW をつくることもできた。

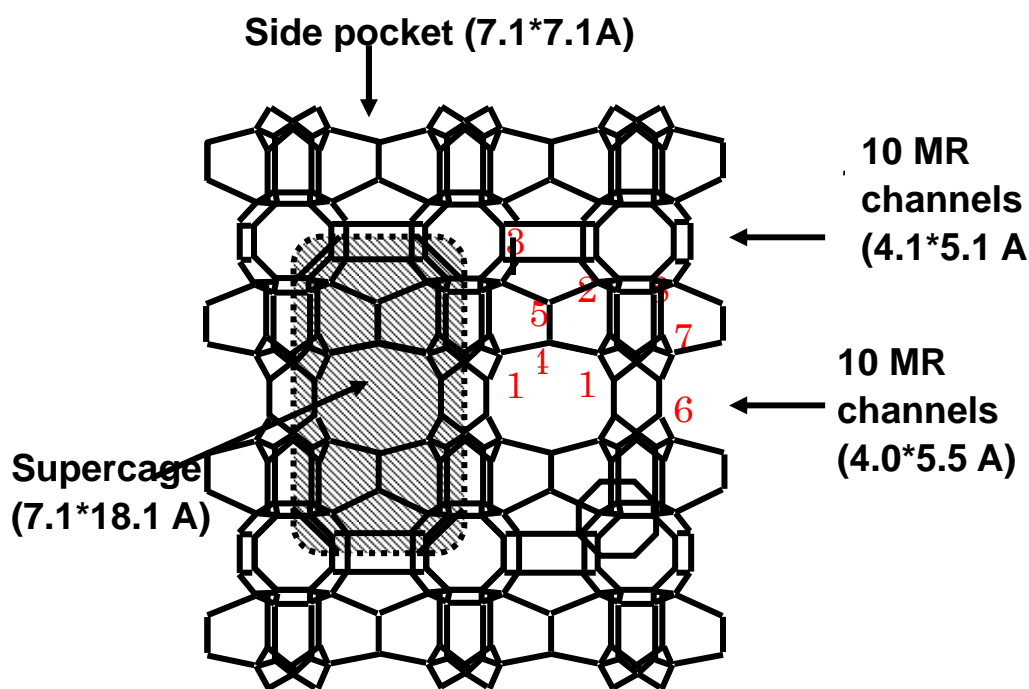


図2 MWWトポロジー(h0l 面)

図2に示すように、MWW 構造の骨格には8種の幾何学的に(錯体化学の用語で言えば配位環境が)異なった四面体配位(T)サイトがある。直接水熱合成法では、ホウ素が置換しにくいTサイトにTiが置換されるのに対し、ポスト合成法ではホウ素が置換していたTサイトにTiが置換されるという裏表の関係にある。Tサイトの種類によって比活性が異なり、ポスト法では比活性の高いTサイトにTiが導入されていると考えるとTi-MWWの酸化活性の差が説明できる。もし、この解釈が正しければ、合成法を変化させた結果として、Tiが導入されている幾何学的位置つまりはTiの配位環境を変化させることができたことになる。未だ、特定の位置に意のままにTiを導入することが可能になった訳ではないが、異なったTサイトにTiが存在する2種のゼオライトを作り分けることができたものといえる。同様なポスト合成チタン導入法によってTi-MCM-68(MSE)の合成も最近達成された。これらは、工業触媒としてのTS-1よりも活性な触媒として、将来性を有している。

首都大学東京の春田らは金を高分散担持すると様々な興味深い触媒特性を示すことを見いだしているが、最近、直径2 nm以下のクラスターとしてTS-1に担持した触媒により、分子状酸素を酸化剤としたプロピレンの

エポキシ化が起こることを報告している。金クラスターの担体との接合界面周縁部の金原子に酸素分子が吸着して、 Au^+-O_2 が生成し、さらに水素が反応して過酸化水素が生成するものと考えられている。

分子状酸素を用いた酸化は工業プロセスとして広く行われて来たが、多くは多成分系の複合酸化物触媒であった。次第にヘテロポリ酸やピロリン酸バナジルなどの結晶性酸化物を用いた触媒プロセスが開発されて来た。旭化成の山松らは Pd_3Pb 金属間化合物がメタクロレインの酸化的エステル化によるメタクリル酸メチル合成の優れた触媒となることを見だし、さらに工業プロセスまで発展させた。最近、北大の上田らは新規 Mo_3VO_x 酸化物を水熱合成により調製した。分子性のポリ酸型ナノクラスターが水熱合成条件で二次元平面クラスター集合体に変化し、さらに積層して三次元固体となったものと考えられ、固体触媒のユニット合成として三次元固体の元素の位置も制御できる可能性を示している。この物質はゼオライトに類似した細孔構造を有し、アクロレインからアクリル酸への選択酸化触媒となる。

ゼオライトのトポロジーは近年爆発的に増加し、2010年1月現在 191 種もの構造が登録されている。このゼオライト構造の爆発的な増加をもたらしたのは SDA (構造規定剤) としての特殊な第四級アンモニウムカチオンの使用によるところが大きい。図3にその例を示す。

RTH 構造のゼオライト SSZ-50 の合成には市販の試薬から6段階の反応を経てようやく得

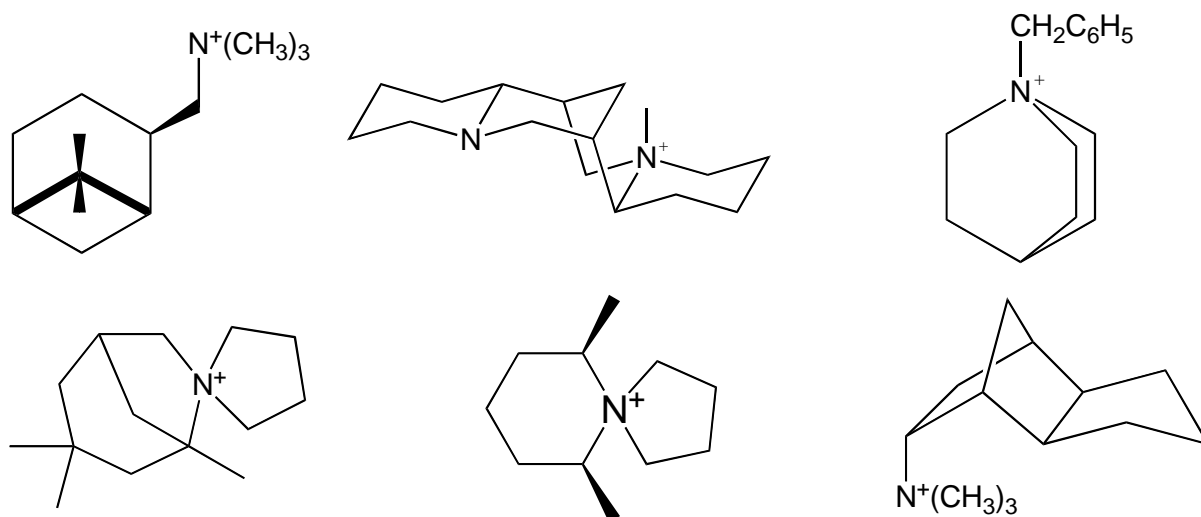


図3 新規なゼオライト構造を可能とした SDA の例

られる第四級アンモニウム塩が必要とされてきた。我々は最近、種結晶 (2 wt%) を加え、NaOH 量、pH、Si/Al 比等を調節することにより、SDA を加えない完全無機条件での **RTH** 型ゼオライトの結晶化に成功した。

もともと有機 SDA が無くとも合成できるゼオライトは存在し、比較的簡単な有機 SDA を用いて合成されてきたゼオライトの有機 SDA フリーでの合成が最近報告されるようになって来た。上述のように、**RTH** 構造が SDA フリーで合成できることが判明し、これまで複雑な SDA を用いてしか合成できなかった各種のゼオライトが SDA フリーで合成できる可能性が大きくなって来た。この際、微量加える種結晶の役割は明らかではないが、種結晶のまわりに新たに加えたケイ素源が結晶を形成していく訳ではない。種結晶は水熱合成条件下で溶解し、ある特定の構造のシリケートオリゴマーを与えるものと想像される。このシリケートオリゴマーはもとのゼオライトの結晶構造の構成要素の構造を保持しているため、新たに加えたケイ素源の自己集積による結晶化を誘導するものと考えられる。

MCM-22(MWW)ゼオライトは合成時には層間に SDA が存在した層状前駆物質 MWW(P)として得られる。

MWW(P)は焼成により縮合し、MWW 構造のゼオライトを与える。我々は $(\text{CH}_3)_2\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_2$ や $(\text{CH}_3)_2\text{SiCl}_2$ などによって MWW(P)をシリル化したところ、層間細孔は、焼成しても保持されることを見いだした。層状物質 MWW(P)とゼオライト MWW の関係と同様な関係を持つ物質群は最近数多く見いだされている。PLS-1 と CDS-1 (CDO)、RUB-39 と RUB-41(RRO)、PREFER とフェリエライト(FER)などは同様な対応関係を持つ。我々は、さまざまな層状前駆体をナノパーツとし、これにシリカ源などの無機元素化合物を反応させることによって、新たなゼオライト構造をつくりあげることができることを見だし、Interlayer-expanded zeolites (IEZ)と命名した。

12員環大細孔を有する Ga-IEZ-MWW は、Ga-MWW 触媒に比べて、過酸化水素を酸化剤としたシクロヘキサンの Baeyer-Villiger 酸化に対してはるかに高い活性を示した。生成物のカプロラク톤の分子サイズが 10 員環細孔には大きすぎため細孔拡大が効果的に働いたものと解釈できる。同様に Al-IEZ-MWW はアニソールのアシル化反応に活性な触媒となる。

PLS-1 を $(\text{CH}_3)_2\text{SiCl}_2$ と処理することによって、 $-(\text{CH}_3)_2\text{Si}$ -ジメチルシリレンが挿入した 10 員環細孔を持つ有機無機ハイブリッドゼオライト IEZ-1 が得られる。IEZ-1 は 500°Cで焼成することにより、 $-\text{Si}(\text{OH})_2-$ を持つ完全無機ゼオライト IEZ-2 に転化する。ベンゼンが IEZ-1 のマイクロ孔に吸着できるのに対し、IEZ-2 には吸着しない。これは通常分子ふるい的なサイズによる排除機構ではなく、ベンゼンの吸着が起こるか否かが親/疎水性によって支配されていることを示唆している。

3. 今後の発展

触媒活性・選択性の向上、触媒の長寿命化などの触媒としての高機能化のためには構造を自在に作り込む必要がある。上記にその一例を示したように構造の精密制御を通じて触媒機能を制御する手法が様々な発達している。言うまでもなく、低環境負荷型触媒プロセスとして結実するまでにクリアすべき課題は多いが、プロセスのコアとなるのは触媒であり、広い意味での分子技術の貢献は大きいものと期待している。

汎用新バイオ技術の開発と創薬への期待

東京大学先端科学技術研究センター 教授 菅 裕明

1. はじめに—セッション俯瞰

「分子技術」というワードは、広範な視点から研究分野を捉えることのできるワードとして非常に優れている。本講演では、バイオ研究分野の視点から「分子技術」を捉え、且つそれに化学的な技術と方法論を融合することで、バイオ研究を「分子」として科学し、技術開発へと展開する可能性を、当研究室の研究事例を紹介しながら議論したい。

2. 概要

2009年のノーベル化学賞は、リボソームの X 線 3 次元構造解析を成し得た生化学者3人に与えられた。生体内で蛋白質合成の翻訳を触媒するリボソームは、RNA と蛋白質の複合体で、生体内触媒としては最大且つ複雑な分子である。しかし、翻訳系そのものは、リボソームだけでなく、アミノシル tRNA 合成酵素や翻訳開始・伸長因子といった 30 を超える数の蛋白質が関与し、構成される。これら個々の分子が協調的に機能することにより、翻訳は効率よく進行するのである。蛋白質発現は、バイオテクノロジーの中樞を担ってきた技術であるが、それは遺伝子の制御に関わる分子生物学的なアプローチで主体であり、細胞という一種のブラックボックスでの翻訳に依存している点からすると、「分子技術」という視点からは若干離れたところに位置する。一方で、上記の翻訳因子あるいはリボソームの生化学的、構造的解析による知見の積み重ねにより、現在では翻訳系そのものの分子機構の理解も進んだ。しかし、翻訳因子やリボソームを人工的に改変し、一般的な蛋白質あるいはペプチド合成以外の目的に利用することは、機構が判った現在でも容易なことではない。しかし、mRNA にコードされた蛋白質あるいはペプチド配列を、化学合成的に容易な核酸配列の配列情報を変えるだけで自由自在に変更できる翻訳系は、「分子技術」の視点からみると非常に魅力的であることは間違いない。

例えば、遺伝暗号表のコードンでアサインされている20種類の蛋白質性アミノ酸(これまでは天然アミノ酸としばしば呼ばれてきたが、実際は天然にも 20 種類以上のアミノ酸が存在しているため、ここでは蛋白質性アミノ酸と呼ぶことにする)を遺伝暗号表から消し去り、その空コードンあるいはコードンボックスに非蛋白質性アミノ酸をはめ込むことが容易にできれば、翻訳系を用いてあたかも天然物として単離される「特殊ペプチド」が合成できる可能性が拓ける。(ここでいう「特殊ペプチド」とは、非蛋白質性側鎖をもったアミノ酸のみならず、N メチル化主骨格やマクロ環状骨格をもつ通常のペプチドとは一線を画す特殊な構造をもったペプチドのことを指す。この種のペプチドは、非リボソームペプチド合成系、NRPS と呼ばれる複雑且つ多様な機構で生合成される。それ故、特殊ペプチドの配列あるいは構造変更には、NRPS の人工改変を達成しなければならず、その複雑さ故、困難を極めているのが現状である。)

遺伝暗号のリプログラミング、すなわち蛋白質性アミノ酸から非蛋白質性アミノ酸へのリアサインメントには、対応するアシル化 tRNA の合成、空コードンの作製、使用可能な非蛋白質性アミノ酸の同定、さらには環状化技術の開発等、「分子技術」としての障害は多い。当研究室では、それらひとつひとつの問題点を、10年を超える歳月をかけて解決し、最適化することで達成してきた。すなわち、アシル化 tRNA 合成には汎用性の高い tRNA アシル化触媒(Flexible tRNA acylation ribozyme; Flexizyme)を開発し、空きコードンの作製には因子やアミノ酸を抜いた不完全再構築大腸菌無細胞翻訳系(wPURE システム)を適応させた(図 1)。また、これらの技

術を駆使し、導入可能な非蛋白質性アミノ酸を網羅的に調べ、Nメチルアミノ酸やDアミノ酸等の選択肢を絞り込んだ。さらに、生体安定性を考慮したチオエーテル環状化技術の開発を行った。また、近年それらの技術を全て統合した上で、無細胞ペプチドディスプレイ法と組み合わせることで、 10^{12} に及ぶ高い多様性をもったランダム配列ライブラリーから選択・淘汰・活性種濃縮を達成する RaPID (Random Peptide Integrated Discovery) ディスプレイの開発に至った(図 2)。この汎用新バイオ分子技術を駆使することで、これまでは天然物としてしか入手できなかった環状特殊ペプチドの薬剤探索の可能性を大きく広げ、様々な疾患標的に対する創薬への道が拓かれつつある。

本講演では、これらの技術開発に至った背景、方法論、最近の展開を実例と共に紹介する。

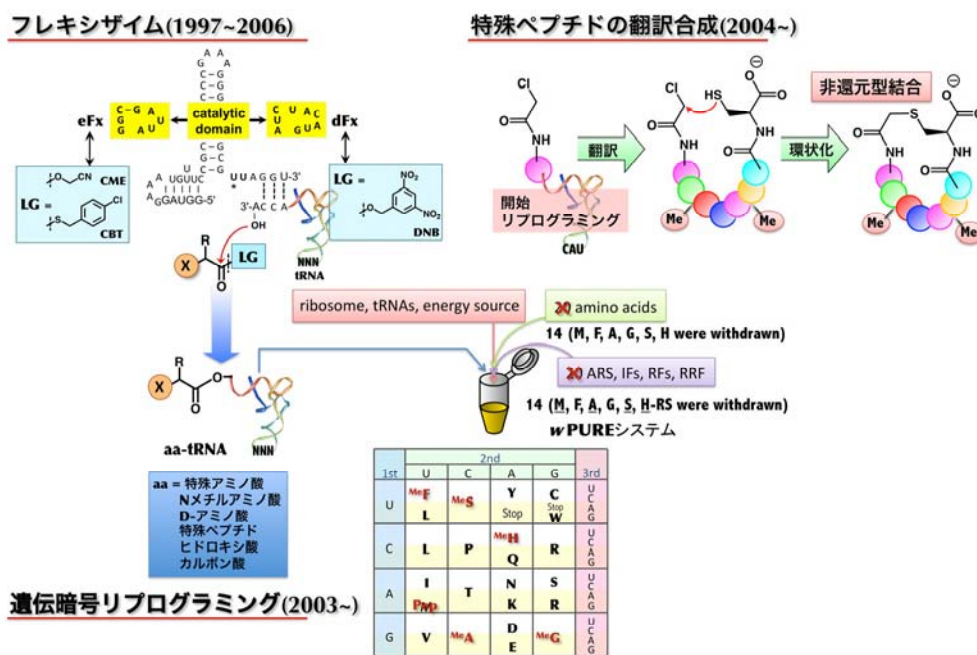


図 1 翻訳系「分子技術」開発の主要技術 フレキシザイム(1997~2006)は、RNA 酵素(リボザイム)で、その 3'末端の塩基が tRNA の 3'末端配列 CCA と塩基対を形成することで tRNA に結合する。フレキシザイムには、アミノ酸基質の選択性によって2種類 eFx と dFx がある。eFx は、アミノ酸にシアノメチルエステル(CME)あるいは4-クロロベンジルチオエステル(CBT)を有するアミノ酸に触媒活性を示すリボザイムである。一般的には、フェニルアラニン類似体のような芳香環を有する基質に対しては CME を、高いアルキル側鎖をもつアミノ酸には CBT を対応させる。dFx は、アミノ酸に 3,5-ジニトロベンジルエステルでアシル化した基質に触媒活性を示し、eFx より広範囲な側鎖に対応できるフレキシザイムで、一般的には dFx を用いてアシル化 tRNA を合成する。遺伝暗号リプログラミング(2003-)は、フレキシザイム技術に不完全再構成無細胞翻訳系を組み合わせることで、空コドンに非蛋白質性アミノ酸をアサインし、遺伝暗号表を人工的に作製する技術である。特殊ペプチドの翻訳合成(2004-)は、開始コドンに N-(2-クロロアセチル)-アミノ酸、伸長コドンに複数の N-メチルアミノ酸をアサインすることで、生体内で安定な非還元型チオエーテル結合を有する大環状特殊ペプチドを翻訳合成する技術である。

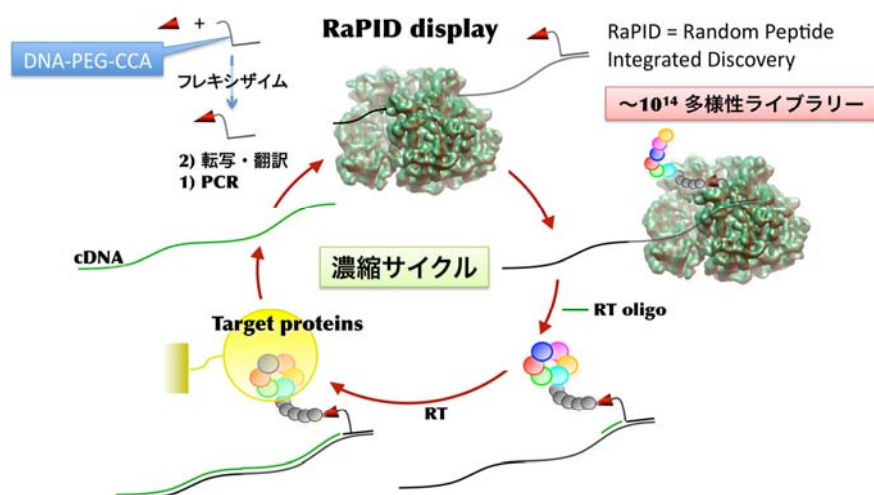


図 2 RaPID ディスプレイ 本技術は図 1 で記載した遺伝暗号リプログラミング技術を駆使し、mRNA 上に環状特殊ペプチドを提示する技術である。一連の濃縮サイクルを繰り返すことで、高多様性ライブラリーから疾患標的蛋白質へ結合する環状特殊ペプチドを迅速に濃縮することができ、濃縮された cDNA の配列を解析することで容易に活性種となった配列の同定が可能となる。迅速さ、容易さ、低コスト等を達成した次世代薬剤候補スクリーニング技術といえる。

3. 今後の展開

本講演で紹介した技術は、翻訳系を化学合成の視点から捉えることで、従来のバイオ技術とは異なる切り口をもった汎用性の高い「分子技術」の創出に至った例である。既に、RaPID ディスプレイで単離された数 nM〜サブ nM レンジの Kd を有する環状特殊ペプチドの発見が、様々な疾患標的蛋白質に対し達成されている。まさしく抗体に勝るとも劣らない結合能をもつ天然物ライクな低分子の人工創製といえる。今後は、創出された特殊ペプチドの薬剤としての経口性・効用の検証等、実用面での多くの課題をひとつひとつ解決していかねばならないだろう。最も重要なことは、ここで紹介した技術がバイオに化学を融合することで生まれる新「分子技術」の創出の一例に過ぎないことである。今後も、斬新な発想から生まれる「バイオ分子技術」に期待したい。

さらなる期待を集める膜技術

東レ株式会社・地球環境研究所 所長 辺見 昌弘

1. はじめに

分離膜には、水などの液体を分離するものと酸素、窒素や二酸化炭素などを分離するものがあり、現時点では水処理用分離膜が広く使われている。素材としては、高分子からなる有機膜とセラミックスや金属からなる無機膜がある。いずれの場合も、化学構造やマイクロからナノレベルの形態を制御して、細孔(隙間)や溶解と拡散によって分離を行う。水処理用分離膜においては、化学構造の設計だけでなく、重合や相分離によって形態を制御することが、分離性能に大きく影響する。本発表では、逆浸透膜(RO膜)のナノ構造に関する最新の解析技術を元に、「分子技術」を議論したい。

2. 概要

2.1. 世界の水問題と膜利用水処理技術

地球は「水の惑星」と言われ豊富な「水」で覆われているが、その約 97.5%は海水であり、河川・湖沼等の淡水はわずか 0.01%程度である。産業革命以降の人口増加と急激な工業化によって、水資源の不足と水源水質の悪化が起り、十分な水源を確保しにくくなっている。そのため、水源を河川や湖沼の表流水・地下水から、海水、さらには下廃水に求めることが必要となってくる。

これまで、砂ろ過や微生物による浄水処理、排水処理が行われてきたが、このような従来の浄化技術では清浄な水を安価に得ることが難しくなり、高速で適度なコストで水を浄化できる「膜利用水処理技術」が注目されるようになった。

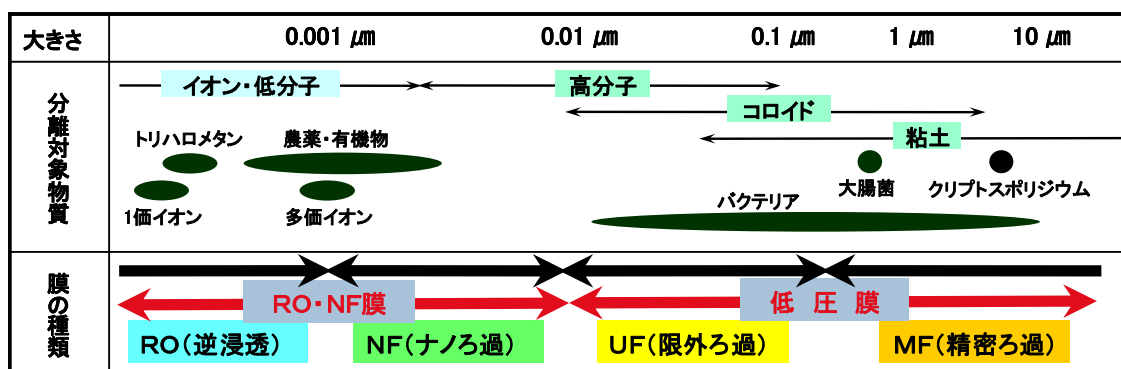


図1 水処理用分離膜の種類と分離対象

水処理用の分離膜はその平均孔径と分離対象によって逆浸透(RO)膜、ナノろ過(NF)膜、限外ろ過(UF)膜および精密濾過(MF)膜に分類される。UF膜とMF膜は、細孔の大きさと分離を行う。現在では、除濁・除菌用途中心に、浄水から下水まで幅広い分野で用いられている。RO膜とNF膜は、溶解しているイオンや有機物を効率よく除去できるため、用途に合った水を低コストで得ることが可能である。本報では、RO膜の最先端技術について述べる。

2.2. RO 膜の原理

半透膜(この場合は RO 膜)を介した濃度の異なる溶液が平衡に達しようとして、希薄溶液の溶媒(水)が濃厚溶液側へ移動することを「浸透」と言い、濃度が平衡に達したとき、両液間に生じる圧力差を「浸透圧」と言う。「浸透圧」よりも大きな圧力を濃厚溶液(海水)側に加えると、溶媒(水)が希薄溶液側へ移動する現象を、「逆浸透」と言う。RO 膜を用いると溶解塩や低分子量有機物まで除去できるため、海水淡水化、かん水淡水化などの脱塩分野、超純水製造、有価物回収や廃水処理など、様々な水処理プロセスで使用されている。

2.3. 架橋芳香族ポリアミド系複合膜

RO 膜は、まず酢酸セルロース膜が開発され、続いて 1970 年代にポリアミド系の複合膜が開発された(図 2)。以来、水質向上と省エネルギー・低コスト化を目標に、塩排除率を高め、高造水量化を図ることによって、現在では架橋芳香族ポリアミド系複合膜が主流となっている。

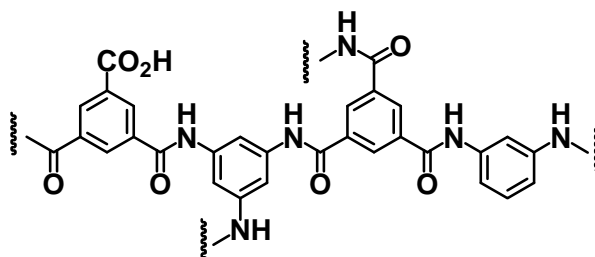


図 2 架橋芳香族ポリアミドの推定化学構造

RO 膜は浸透圧よりも高圧で運転することが必須のため、高圧に耐えるように、基材、ポリスルホン(PS)支持膜、架橋芳香族ポリアミド系分離機能層の 3 層構造になっている。分離性能と透水性能を支配する架橋芳香族ポリアミド層は、芳香族ポリアミンと芳香族酸塩化物の界面重縮合という方法で形成する。ポリアミドの分子設計が重要であることは勿論、薄膜を形成する界面重縮合技術も高性能化を実現するための重要な要素である¹⁾。

2.4. 海水淡水化用 RO 膜技術の進歩

海水淡水化において RO 膜の課題は、①高品位の透過水を、②省エネルギー・低コストで得ることである。1969 年に中空糸ポリアミド膜エレメントが開発された。3.5%海水から真水を約 15%回収できるものであった。すなわち、RO 膜の造水量が低く耐圧性が不十分であるため、85%は濃縮水として海水に戻されることを示している。従って、海水淡水化 RO 膜エレメントの目標は、脱塩率を高く、造水量を大きくしながら、耐圧性を高めることであった。1980 年前後には架橋芳香族ポリアミド複合膜スパイラルエレメントが開発され、回収率 40%を達成した²⁾。

現在、RO 膜による海水淡水化で難しい問題とされている成分がホウ素である。ホウ素は、ホウ酸の形で海水中に 4~7 (mg/l)含まれ、植物の生育への悪影響、不妊症などの問題が指摘されており、WHO が 0.5 (mg/l)以下の飲料水ガイドラインを設けている。RO 膜のホウ素除去率が不十分なのは、海水中のように中性付近では水和が起こらず、分子直径が約 0.4 nm と小さいからである。一方、ナトリウムイオンは水和しているため約 1 nm の大きさであり、RO 膜で効率的に除去可能である。

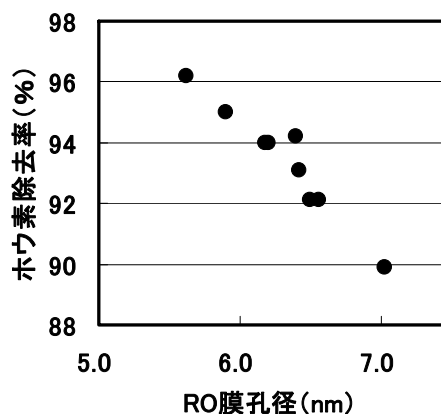


図 3 RO 膜の孔径とホウ素除去率

ホウ素を効率的に除去する RO 膜を開発するため、陽電子消滅寿命測定法(PALS)というナノレベルの非破

壊分析技術に着目した。この分析によって、これまで測定することができなかった RO 膜の孔径を測定でき、平均孔径とホウ素除去率との間に相関関係があることがわかった(図 3)。さらに固体 ^{13}C -NMR(核磁気共鳴)法により、ポリアミド分子の単位構造モデルを推定してモデル分子を構築した。このモデル分子と水分子の関係を分子動力学(MD)シミュレーションで最適化し、孔径が 0.6~0.8 nm であると推定された。これらの知見を活用することによって、優れたホウ素除去性能を有するための孔径を規定し、RO 膜の分子設計を行い、ホウ素除去性能の高い海水淡水化用 RO 膜を開発した³⁾。すなわち、目標とする孔径を有する新しい RO 膜の組成をシミュレーションによってある程度絞込み、形成した RO 膜の性能だけでなく、PALS による孔径解析で実証することができるようになった。

3. 今後の発展

RO 膜を使用した水処理プラントでは、膜性能の向上に加え、エネルギー回収技術、前処理技術、洗浄・殺菌技術などの発達によって、より高品位の水を低コスト・低消費エネルギーで供給できるようになった。今後も水源水質は悪化し、水需要は拡大するため、さらなる①水質向上、②低消費エネルギーの実現が求められている。

RO 膜の性能を決める重要な要素として、膜の形態が挙げられる。SEM や TEM 観察から、RO 膜は高さ 200 nm 程度の突起状構造を有し、その大きさが性能に影響することがわかっている。最新の TEM 技術によって、突起の内部は空洞であり、膜の真の厚みはわずか 20 nm 程度であることがわかった。すなわち、厚み方向の芳香族ポリアミドの繰り返し単位は数十個と推定され、わずかな数の分子によって水とイオンの透過をコントロールしていることになる。

今後、圧力への耐久性とイオンの除去性能を維持して膜の厚みをさらに薄くできれば、消費エネルギーの画期的な削減が実現できる。それは、芳香族ポリアミドの架橋構造及び膜の厚みをコントロールする技術確立することによって可能になると考えられる。

引用文献

- 1) 栗原, 植村, 姫島, 上野, 梅林寺, 日本化学会誌, 1994 (2), 97-107.
- 2) 浄水膜編集委員会(1版):浄水膜, 東京, 技報堂, 2003, 140~143.
- 3) 富岡他, 日本膜学会第28年会予稿集, p.33 (2006).

超高速計算機がもたらす分子技術の革新

理研次世代分子理論ユニット 平尾 公彦

わたしたちは何十万、何百万という種類の分子がお互いに作用しあい、反応している世界に住んでいる。わたしたちの体だけを考えてみても、分子の世界の豊かさ精妙さに驚かされる。この分子の世界を解き明かし、物質を自由自在にデザインしたいというのが科学者の限らない夢である。分子の世界を支配する原理は量子論であり、量子化学は分子の実体をとらえる学問である。1929年に量子論の創設者の一人であるポール・ディラックは「量子力学の出現で、化学の問題の解決に必要な基礎的物理学法則は全て分かった。困難は、ただ、これらの法則を厳密に適用すると複雑すぎて解ける望みのない方程式に行きついてしまうことである」と述べている。量子論誕生以来、理論化学者は複雑すぎて解ける望みのない方程式をいかに化学的精度で解くかという課題に挑戦してきた。物理学者とは異なるセンスで、しかし同じような細心さで内容を分析し、理論を作り上げてきた。今日の理論化学、計算化学の成功は Dirac の予想をはるかに超えるものであると思われる。Dirac が考え及ばなかった最大の要素はコンピュータの驚異的な発達である。コンピュータは数学の脆弱性を補ってくれる。

コンピュータはこれまで指数関数的にその演算速度を延ばしてきた。演算速度は 10 年で 1000 倍のスピードアップである。現在わが国最速のコンピュータは地球シミュレータ(ES2)で 122 テラフロップスである。1秒間に四則演算を 10^{14} 回実行できる速さである。理研は次世代スパコンプロジェクトを進めており、2012年には地球シミュレータの 100 倍の演算能力をもつ 10 ペタフロップス(10^{16})のスパコンが登場する。

コンピュータ・シミュレーションは従来の理論、実験とは異なる新しい研究手法を実現し、科学にブレークスルーをもたらすものとして期待されている。シミュレーションは容易に時空間を超越することができる。測定不能、実現不能な時間や空間の場でのシミュレーションを行うことにより、科学事象の解明と予測に大きな役割を果たすことができる。スパコンという基盤技術を利用してニューフロンティアへの挑戦が始まっている。人類は新しい認識を獲得する強力なツールを手にしたといえる。気象予測、地震予測、経済予測など様々な分野でシミュレーションの威力が発揮されている。CO₂ の増加が環境に与える影響が重大であることが世界の人々に広く認識されたのは、スパコンによるシミュレーションと可視化によるところが大きい。コンピュータ・シミュレーションは科学的信頼性にに基づく予測の技術であり、予測の科学を確立する。

われわれの分野でのシミュレーションはどうか？量子論に基づく分子系のシミュレーションは科学の発展に多大の貢献をした。化学の内容を豊かにしてきた。はっきり定義された問題を解く腕っぷしにかけては実験に決して劣るものではない。しかし自然の懐は深い。物質を自由自在にデザインし、化学反応を自在にコントロールするという分子技術の立場からはまだまだかもしれない。ただコンピュータ・シミュレーションは物質探索の設計空間を飛躍的に拡大し、新しい可能性を拓いている。実験先導型から予測先導型へのパラダイム変換が静かに、しかし着実に進行している。思考実験 (Gedankenexperiment) という言葉がある。創造的な実験の着想の始まりに必ずある、いわば無意識な理論的、模型的想像の過程である。シミュレーションは思考実験を意識的に定量化、具体化する役割を担っている。

これまでのシミュレーションはコンピュータの性能の制限からシステム全体をシミュレートするのではなく、システムの部分を切り出してシミュレートする、いわゆる部分シミュレーションに限られていた。解きたい問題の本質的な部分を取り出し、モデル化してシミュレーションを行ってきた。部分シミュレーションは個別現象や事象の物

理的機構を再現、解明することに威力を発揮するがシステム全体の理解には必ずしもつながらない。システム全体は部分からなる。しかしシステム全体は部分の総和以上である。部分の和とシステム全体とは質的に異なる。分子技術にとって重要なのは部分シミュレーションではなく、本来のシステム全体のシミュレーション「丸ごとシミュレーション」である。システム全体の定量的なシミュレーション、時間発展、ダイナミクスの実現は、システムの未来発展を科学的に予測する。分子や分子集合体を科学的信頼度で設計・開発できることを意味している。

「丸ごとシミュレーション」が可能になれば、ぜひやってみみたいものがある。ソフトマテリアルである。21世紀はソフトマテリアルの時代であると言われている。ソフトマテリアルには化学のすべてが詰まっている。ソフトマテリアルの究極は生体システムである。柔らかく、水素結合のような弱い相互作用の集積による高度に組織化された生体システム、その発現する機能は驚くばかりである。その精妙さに一步でも近づきたい。ダイナミクスが機能を決めており、シミュレーションの威力が発揮される分野である。

10ペタフロップス次世代コンピュータによるシミュレーションは分子科学そのものを大きく変える可能性がある。ソフトマテリアルに限らず、コンピュータが発達したおかげで可能となるサイエンスを大切にしたい。より大きな系とか、より精密な計算も重要だが、ペタコンでしか達成できない世界がもっと重要である。シミュレーションはランダムな振る舞いやカオス的な振る舞いの裏にも数値計算で表せる法則があり、解析不可能と思われていた領域にも科学的にアプローチできる可能性を示唆している。シミュレーションから新しい論理、概念形成に努めたい。

独創的な科学技術は深い学問的素地から生まれる。研究者の興味本位ではなく、自然の本質に迫る基礎研究を大事にすべきである。そのためにも分子科学としては、分子系のシミュレーションの基盤となるサイエンス、理論をしっかりと発展させることがこれまで以上に求められている。それが分子技術確立への近道である。「分子レベル、電子レベルでの制御により、有用な物質を安全に効率よく、ねらい通りに創造する分子技術」にとってスパコンによるシミュレーションは不可欠の要素技術であり、新たな可能性を拓くものである。

今、前世紀に解決できなかった問題が山積している。環境・エネルギー、気候変動、資源・食糧、南北問題等である。これが解決できなければ、次世代への引継ぎはできない。人類社会の目標は、肥大化した人間圏を地球と共生しうる持続的なシステムとして再構築すること、一方で多様な価値観を有する人々に、健康で快適な生活と安全で安心な社会を保証することである。われわれは地球規模で解決すべき環境や資源エネルギーなどの深刻化問題を共有しつつ、文化的な生活、福祉、倫理、個人の尊厳などをいかに担保するかについても解決を迫られている。われわれに課せられた課題は重い。

分子性、合成分子技術、分子技術イニシャティブ

奈良先端大 村井 眞二、東大理 中村 栄一

1. 「分子技術イニシャティブ」の目標および目標を達成するための道筋

1-1 目標

米国はバイオ技術が強い。情報技術でも米国は強いが中国の猛追がある。我が国は材料技術が強く、なにかんづく分子技術が強い。このような状況を将来にわたり確固たるものにすることが、このイニシャティブの目標となる。国家の基幹技術の育成を目指す。

強いとは産業と技術と科学が世界を先導していることをいう。

分子技術を鍵とする高付加価値産業が我が国の経済を支えるとともに、世界における環境・エネルギー・食糧の保全と健全な生活維持への広い貢献が期待される。

1-2 目標へ至る道筋

幅と厚みの獲得がなによりも重要である。分子技術はいくつかの巨峰を目指す型ではなく、様々なピークを持つ連峰の山塊を目指すものである。富士山型ではなくヒマラヤ山系型を目指す。分子が持つ特徴の最たるものが多様性である。多様な技術と多様な製品が育つための国策が重要である。ディスプレイ製品の中には数十種もの分子性物質が用いられ、そのいずれにおいても我が国のシェアが圧倒的である。ファンディング、評価、投資、税制、研究システム、社会システムなどあらゆる面での総がかりともいべき育成策が求められている。

1-3 キュリオシティードリブンとニーズドリブン

両者ともに重要。とくに種々のレベルと種の時間軸のニーズを見定め開発システムの構築が必要。いわゆる、ゼロ、ゼロ新、ピカ新、いずれもが実は分子技術の広い発展には重要である。

2. 分子性……分子技術の源泉

2-1 分子は他の物質にはない種々の際立った特長を持つ

1) メタンから遺伝子までの多様性

現在約 3,000 万種の分子が既知であり、しかも設計により無限の種類分子が入手可能である。合目的物質の入手が可能。

2) ある分子はどれも同じという均質性

メタンガスを1リットル採ると、その中のメタン分子はどれも同じ分子である。事象の真実性、デバイスの信頼性、物質として物性のぶれのなさをもたらす。

3) 分子用相互作用の型が豊富で、物性の設計が可能

同一分子間の相互作用(結晶成長、液晶が示す物性)

異分子異物質との相互作用(溶ける溶けない現象の本質や、液晶分子の並び方)

創薬、ケミカルバイオロジー、遺伝情報の伝達まで多様な相互作用)

- 4) 電子的性質・光学的性質を設計可能
分子エレクトロニクス、
分子フォトニクス、
分子イメージング
- 5) 単独分子あるいは分子集合体の形状が多彩で物性を設計可能
ドナー・レセプター型の薬効果から生命現象まで
膜、ケージ(MOF)、放射型(dendrimer)、管(カーボンナノチューブなど)
その変化を利用し、記録材料、薬理効果
- 6) 反応により物質そのものが変化できる。必要な物質を創出できる。
合成分子技術(触媒、育分子材料、ファインケミカルズ)
分子の相変化、幾何異性化、多量化 を電子材料に活用
- 7) 分子性の諸原理は広い適用範囲を持つ。
界面・表面事象の分子レベルでの解析。固体触媒の分子レベルでの理解・設計。

2-2 分子技術は学際性を有し、技術の融合を促進する

- 1) 基盤とする数学、物理学、化学、生物学など多くの分野の発展をうながし、また支えられている。
- 2) 鍵となる技術を形成するとともに、多くの他技術との複合・融合により製品を形づくる。

3. 今後の展望

3-1 多方面にわたる課題

いくつかの課題を例示する(時間軸・組織・金額など多様であることを示す)

- 発光照明と光発電を可能にする高分子フィルム
- 1000ドルゲノム時代の個人用製薬を可能にする分子プロセス
- 表面界面の分子レベル解析による材料設計指針
- 非効率な現状合成手法の飛躍的革新
- 金属材料の有機系材料での代替グリーン技術
- 低炭素社会の鍵を提供する分子技術
- 3次元空間、チューブ、シートなど多様な現状物質の創成
- 印刷手法で大量生産可能な有機トランジスタ・・・
など、一様ではない課題解決システムが必要。

3-2 前進を

時間軸 (今、明日、いつファンディングが必要か)

組織 学際、融合、システム

国際競争力 リスクを採る課題を

非連続性 ロードマップに合う場合、ロードマップが無力の場合

プレイヤー 産・官・学・人材育成（大学カリキュラムの革新も）

- . . .
- . . .

4. おわりに

現時点で「分子技術」というくくりを国力の源泉とする考え方はまだ他国にはない。チャンスである。

（参考：山本尚論説「化学と工業」3月号。コピーを巻末に重要旨集収録）



国際化する化学—我が国の取るべき戦略は？

The internationalization of chemistry: What strategy should Japan take?



Hisashi YAMAMOTO 山本 尚 シカゴ大学 教授

「コラボレーション」が進む米国の化学産業

数年来、先進国の多くの製造業が急速に中国やインドにシフトしている。化学工業もまた、同じ道を歩んでいるように見受けられる。

米国の製薬企業における「コラボレーション」は、あつという間に全米に広がってきた。大企業に限ることなく、中小やベンチャーにおいてすら、コラボレーションは、いまや企業の研究所の合い言葉で、会社によっては、米国内の研究に対して、中国やインドへの依頼研究、共同研究がここ1~2年で数倍以上になっているケースも多い。コラボレーションは、始めのうちこそ化合物の依頼合成にとどまっていたが、最近では分子設計や企業の将来にかかわる研究計画すら依頼している。こうした傾向に首をかしげるのは私だけだろうか。もちろん、現在でもこうしたコラボレーション型の研究の中核を担う研究者は、米国在住の中堅化学者であり、非常に有能な彼らが研究全体の舵を取り、頻繁にアジアに出張し、研究の進展を見守ったり、指導したりしている。少なくとも現状ではシステムは非常にうまく機能しているのである。

しかし、この現状は、将来の大きな科学技術中心の変動を予見させる。科学技術の国際化は予想を遥かに超えたスピードで進行し、いつの間にか軒先を貸して母屋になるだろう。それは時代の流れであり、これまで、米国、日本、ヨーロッパが担っていた科学技術社会の中心は、早晚アジアに移動すると予想されている。さて、米国がそれに対してどう対処しようとしているか、そして我が国のとるべきスタンスは何であろうか。

将来に向けてそれほど悲観的でない米国

米国はこの状況に、それほど悲観的ではない。科学

技術のフロンティアとしての米国の立場は、将来にわたっても確保できると考えているようだ。この楽観論の根拠は、第一に、これらの共同研究においても、米国側からの利益追求に向けての周到な権利上の防衛が張り巡らされているからだという。いわゆる *export-protection* である。しかし、末端の技術の移行は当面は押さえられたにしても、核となる科学技術の中核が緩やかに、しかし確実にアジアに移動していった時、アメリカはそう簡単に全世界の科学技術のポリシー・ホルダーの地位を守れるだろうか。これに不安を感じている人たちは確かに存在する。真に先進の科学技術を核とする産業は、学問の中核が国内にあってこそ実現できると考えてよいからである。

歴史的に米国は必要なときに必要な人材を、国外から欲しだけ導入してきた。アメリカにはそうするだけの力があつた。また、移民に対する寛容な国民性と、限りなく豊かで魅力ある国土がこれを可能にしている。こうした背景で将来に向けて楽観的な意見を述べる人が多い。しかし、アジアの数カ国では、米国に匹敵する、あるいはそれ以上の好条件で人材の確保を始めていることにも注目すべきである。英語が国際語になった現在では、もはや語学の障壁も少ない。最近の我が国の素晴らしい化学者が、中国、台湾、シンガポールに移動することは象徴的である。また、米国在住の最優秀の中国系科学技術者が続々と中国に帰ってきている。これまでのように、米国が最優秀なアジアの科学技術者をいつでも輸入できるとは限らない。

米国の楽観的な考え方の最も重要な根拠は、米国の化学に対する考え方が、非常に柔軟であることである。アメリカの若者は、科学技術の基礎を大切にすることは、最低限守るにしても、基本的には新規で目新しい変化を望んでいる。アメリカの健康な開拓者精神は未だに根強い。「未知の場所に行って未知の仕事

英訳版は 268 ページをご参照下さい。

することこそ人生だ！」と思っている人は多い。科学技術の基礎部分はアジアに移動するのは、やむを得ないと考えているふしもあるが、「新規で総合的応用の分野」「複雑性に関わる分野」は米国が先導すべきと考えている。常に新規なものを開発しようとするフロンティア精神がある限り、米国は次世代でも科学技術における、ある程度のイニシアティブを保てるだろう。NIH, NSF, DOE 等の米国における研究費の配分、特に大型研究費になればなるほど、非常に戦略的である。今後どの分野で国際競争してゆくかの明確なイメージと、また投入する資金に対する効果への綿密な計算がある。

急がれる我が国の対応

これまでも他国の世界戦略に、我が国は幾度か苦渋の選択を迫られてきたように思う。しかし、アジアの持つ膨大な人口から判断すれば、今回の科学技術の変動は以前より遥かに急速で大規模で、その全容は未だに十分には見えてこない。また、中国の国益に対する戦略的な態度から考えて、状況は必ずしも我が国に対して好意的に展開するとは限らない。米国と新進の中国、インドに挟まれて、今後米国、中国やインドの世界戦略はどうなるかは、我が国の科学技術のあり方に、大きな影響を持つのである。来るべき科学技術における国際化の嵐に、我が国はどのように対処するかを十分に考える必要がある。アメリカの移民政策、開拓者精神、あるいは鳥瞰的な国際戦略に対して、我が国らしさを保ちつつ、国際的に一定のイニシアティブを確保する方策を、今から用意しておく必要があるだろう。科学技術に対する国益にそった、独自の長期的国際戦略の確立こそ肝要である。

具体的には、絶え間ない新規研究分野の創出が、今後これまで以上に重要となるだろう。そのためには、将来の瑞々しい新規分野の開発を担う、若い日本人研究者の育成を急ぐべきである。米国における大学院学生に向けての国費による奨学金申請資格が、米国市民に厳しく限られていることに、もっと注目してほしい。米国でも各種私的財団等の奨学金で、留学生への給付は可能であるが、その数は極めて限られている。わが国の国費による留学生への奨学金は、もっと日本国籍を持つ若者に振り向けられてもよいのではないだろうか。米国の科学技術の先端を走る一握りの大学では、理科系大学院学生の受け入れは、まずアメリカ市民からの申請を優先し、留学生は定員の補充と、大学の多様性を保つために限られている。

一方、アメリカが基礎の分野をなおざりにするのであれば、これは我が国にとって学術の足下を固める絶好の機会かもしれない。その場合でも、総花的でなく焦点を絞った将来の発展を見据えた基幹分野の選択が必要である。なかでも「分子技術」が、将来の科学技術の大きな核の一つとなると思われる。日本化学会は積極的に我が国のこの分野の発展を先導する役割を担っている。日本の国益に合った科学技術の国際戦略に対する活発な議論を通して、日本化学会が広い意味での「分子技術」の展開を積極的に先導することを期待したい。

Copyright

ここに載せた論説は、日本化学会の論説委員の執筆によるもので、文責は基本的には執筆者にあります。日本化学会では、この内容が当会にとって重要な意見として認め掲載するものです。ご意見、ご感想を下記へお寄せ下さい。
論説委員会 E-mail: ronsetsu@chemistry.or.jp

参考資料 2. 科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」概要（JST-CRDS H21/12/17 開催）

（独）科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）では、本シンポジウムに先がけて平成 21 年 12 月 17 日に、『科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」』を開催している（コーディネーター 中村栄一 東京大学教授）。ワークショップでは、「分子技術」を数学・物理学・化学などの分子基盤科学の知見を基に、分子を設計・合成・操作・制御・集積することによって、分子の特性を活かしながら所望の機能を創出するための一連の技術と定義し、「分子技術」が今後の基幹的な技術になり得るかどうかを専門家間の集中議論によって検証すると共に、今後の方向性や具体的な研究開発課題を抽出する目的で開催された。

分子基盤科学は、実用に供されつつある有機 EL、分子標的薬、近年の研究開発が盛んな有機太陽電池、有機エレクトロニクス等で既に大きなポテンシャルを示している。今後はさらに、医療、情報通信、環境・エネルギーなど幅広い応用分野からの要請が高まる中であって、それらに的確に応えていける「分子技術」の体系を構築し、要素となる技術や有効な分子材料の設計指針を取り揃えておくことが、関連産業の国際的優位性を構築し、持続可能な社会を両立していく上で重用と考えられる。またそのためには、化学、物理学、数学、生物学、情報学、工学など、学術分野・技術分野間の連携・融合が必須であり、その象徴ともいえるナノテクノロジーの進化が重要と考えられる。これがワークショップの参加者間で共有された認識である。ワークショップでは、「分子技術」を「設計・創成」、「電子状態制御」、「集合体・複合体」、「形状・構造制御」、「変換・プロセス」及び「物質輸送」の 6 つに分類し、それぞれについて議論がなされ、以下の仮説を検証することが試みられた。

<仮説 1> 所望の機能を持つ材料やデバイス・プロセス等が、「分子技術」をベースにすることで数多く実現できるようになる。

<仮説 2> 「分子技術」を取り上げて、国家的に大きく推進するだけの科学的・技術的諸条件は整ってきたといえる。

<仮説 3> 20 世紀は半導体技術などの産業を牽引した基幹技術があったが、分子技術は 21 世紀を代表する基幹技術に成り得る。

ワークショップでは各「分子技術」ごとに二人ないし三人の有識者が発表し、議論を深めた。また、個々の事象や物質ではなく、分析法・設計法・製造法などのような「技術プラットフォームの形成」を目標とすべきであることが提案された。分子技術を推進する上では、基礎研究に重点をおいた研究投資をおこなうべきであり、分子基盤科学に造詣の深い研究者を育成し社会との接点を誘導することが重要であることも確認された。更に、過去の事例を分析した上で未来予測を行い、一過的ではない継続的な研究推進が求められることも合意された。「分子技術」は、このように広い範囲の科学が関係するため、関係諸学会の連携が必須となる。日本化学会を中心に、応用物理学会や物理学会などが連携し、横断的な取組みによって異分野の研究者が参加することが望まれる。CRDS では、ワークショップでの議論を踏まえ、今後国として重点的に推進すべき研究領域、課題などについて検討し、別途提言書「戦略イニシアティブ 分子技術」を発行している。

ワークショップ参加者一覧（敬称略）

◎:コーディネーター ○:副コーディネーター *:コメンテーター σ:コーディネーター補佐

- ◎ 中村 栄一 東京大学大学院理学系研究科 教授
○ 魚崎 浩平 北海道大学大学院理学研究院 教授
○ 笠原 二郎 北海道大学触媒化学研究センター 特任教授
相田 卓三 東京大学大学院工学系研究科 教授
安達 千波矢 九州大学未来化学創造センター 教授
岩澤 康裕 電気通信大学電気通信学部 教授
* 北川 進 京都大学大学院工学研究科 教授
菅 裕明 東京大学先端科学技術研究センター 教授
* 瀬戸山 亨 株式会社三菱化学科学技術研究センター R&D 部門合成技術研究所 所長
中條 善樹 京都大学大学院工学研究科 教授
塚越 一仁 (独) 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクニクス研究拠点 主任研究者
* 筒井 哲夫 (独) 科学技術振興機構 さきがけ「物質と光作用」領域 研究総括
* 長洲 毅志 エーザイ株式会社 理事・CSO 付担当部長
永瀬 茂 自然科学研究機構分子科学研究所 教授
長野 哲雄 東京大学大学院薬学系研究科 教授
* 錦谷 禎範 新日本石油株式会社 研究開発本部中央技術研究所 副所長
橋田 充 京都大学大学院薬学研究科 教授
平本 昌宏 自然科学研究機構分子科学研究所 教授
福岡 淳 北海道大学触媒化学研究センター 教授
福山 秀敏 東京理科大学理学部 教授
辺見 昌弘 東レ株式会社地球環境研究所 所長
村井 眞二 奈良先端科学技術大学院大学 理事・副学長
σ 唯 美津木 自然科学研究機構分子科学研究所 准教授
σ 田中 一生 京都大学大学院工学研究科 助教
σ 辻 勇人 東京大学大学院理学系研究科 准教授
σ 森田 靖 大阪大学大学院理学研究科 准教授
曾根 純一 (独) 科学技術振興機構 研究開発戦略センター シニアフェロー

報告書:『科学技術未来戦略ワークショップ「分子技術」』

2010年3月発行 科学技術振興機構研究開発戦略センター CRDS-FY2008-WR-07

提言書:『戦略イニシアティブ「分子技術」』

2010年3月発行 科学技術振興機構研究開発戦略センター CRDS-FY2009-SP-06

それぞれ CRDS ホームページからダウンロード可 <http://crds.jst.go.jp/output/index.html>

【氏名】曾根 純一 (そね じゅんいち)

【所属機関・職】日本電気株式会社 中央研究所 支配人。科学技術振興機構 研究開発戦略センター シニアフェロー／ナノテクユニット長、CREST「ナノシステム創製」研究総括

【連絡先】〒102-0084 東京都千代田区二番町3番地

Phone:03-5214-7483, Fax: 03-5214-7385. e-mail: j2sone@jst.go.jp

【専門】物性物理

【略歴】1975年4月日本電気株式会社 中央研究所、1999年7月同基礎研究所長、2004年1月同基礎・環境研究所長、2007年-同中央研究所 支配人、2008年4月-科学技術振興機構 CREST「ナノシステム創製」研究総括、2009年4月-科学技術振興機構研究開発戦略センター シニアフェロー／ナノテクユニット長

【受賞】2008年10月応用物理学会フェロー表彰

【氏名】中村 栄一 (なかむら えいいち)

【所属機関・職】東京大学大学院理学系研究科化学専攻・教授

【連絡先】〒113-0033 文京区本郷7-3-1

Phone:03-5841-4356, Fax:03-5800-6889, e-mail: nakamura@chem.s.u-tokyo.ac.jp

【専門】有機化学 (有機合成化学, 有機金属化学, ナノ科学)

【略歴】1978年米国コロンビア大学化学科博士研究員、1980年東京工業大学理学部化学科助手、1984年同助教授、1993年同教授、1995年-：東京大学大学院理学系研究科化学専攻教授、2004-2010年：科学技術振興機構 ERATO「中村活性炭素クラスター」研究総括
2007-2012年：「理工連携による化学イノベーション」グローバルCOE拠点リーダー

【受賞】日本化学会進歩賞 (1984年), 日本IBM科学賞 (1992年), 日本化学会賞 (2002年), 英国王立化学会フェロー(2005年), フンボルト研究賞(2006年), アメリカ芸術科学アカデミー外国人名誉会員(2008年), ACS 2010 Arthur C. Cope Scholar Awards (米国化学会) (2009年), 紫綬褒章 (2009年)

【Editorial Service】

Associate Editor: *Journal of Synthetic Organic Chemistry Japan* (1986-88 and 1998-2000); *Chemistry Letters* (1992-98); *Organic Letters* (2000-2005); *Journal of the American Chemical Society* (2009-)

【氏名】相田 卓三 (あいだ たくぞう)

【所属機関・職】東京大学大学院工学系研究科・教授

【連絡先】〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

Phone: 03-5841-7251, Fax: 03-5841-7310. e-mail: aida@macro.t.u-tokyo.ac.jp

【専門】高分子化学

【略歴】1984年東京大学工学部助手、1985年米国 IBM Almaden Research Center 客員研究員、1989年東京大学工学部講師、1991年東京大学工学部助教授、1996年～東京大学大学院教授。2000-2005年 JST ERATO “ナノ空間プロジェクト” (2006年 ERATO-SORST に引継ぎ) プロジェクトリーダー、2009年理化学研究所グループディレクター

【受賞】日本化学会進歩賞 (1988年)、高分子学会賞 (1993年)、高分子学会 Wiley 賞 (1999年)、日本 IBM 化学賞 (1999年)、名古屋メダルセミナーシルバーメダル (2000年)、東京テクノフォーラムゴールドメダル賞 (2001年)、アメリカ化学会 Arthur K.Doolittle 賞 (PMSE) (2005年)、井上學術賞 (2005年)、モレキュラーキラリティーアワード (2008年)、錯体化学会貢献賞 (2008年)、アメリカ化学会賞 (高分子化学) (2009年)、日本化学会賞 (2009年)

【氏名】長野 哲雄 (ながの てつお)

【所属機関・職】東京大学大学院薬学系研究科・教授

東京大学 生物機能制御化合物ライブラリー機構・機構長

【連絡先】〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1

Phone:03-5841-4850, Fax: 03-5841-4855 e-mail: tlong@mol.f.u-tokyo.ac.jp

【専門】ケミカルバイオロジー、創薬化学

【略歴】1972年3月東京大学薬学部卒業、1977年3月東京大学薬学系大学院博士課程修了、1977年12月東京大学薬学部助手、1983年8月米国デューク大学医学部 Research Associate、1986年4月東京大学薬学部助教授、1996年5月東京大学薬学部教授、1997年4月東京大学大学院薬学系研究科教授 (大学重点化)、2006年8月東京大学生物機能制御化合物ライブラリー機構長 (兼任)

【著書】「創薬化学」(長野、夏苺、原 編著、東京化学同人) (2004年)、「NO ー化学と生物ー」(学会出版センター)、「マクマリー生化学反応機構ーケミカルバイオロジーの理解のためにー」(長野哲雄 監訳) (2007年)、「ケミカルバイオロジー」蛋白質核酸酵素増刊号 (2007年)、「新版 錯体化学」(講談社サイエンティフィック) 等

【受賞】日本薬学会奨励賞 (1990年)、市村學術賞 (1999年)、持田記念學術賞 (2000年)、山崎貞一賞 (2002年)、基礎錯体工学研究会技術賞 (2003年)、上原賞 (2004年)、島津賞 (2005年)、日本薬学会賞 (2006年)、紫綬褒章 (2006年)、日本酸化ストレス学会賞 (2008年)

【氏名】北川 進 (きたがわ すすむ)

【所属機関・職】京都大学 物質-細胞統合システム拠点・副拠点長

【連絡先】〒615-8510 京都市西京区京都大学桂

Phone: 075-383-2733, Fax: 075-383-2732. e-mail: kitagawa@sbchem.kyoto-u.ac.jp

【略歴】昭和49年 京都大学工学部石油化学科卒業、昭和51年 京都大学大学院石油化学専攻修士課程修了、昭和54年 京都大学大学院石油化学専攻博士課程修了、工学博士、昭和54年 近畿大学理工学部助手、昭和58年 近畿大学理工学部講師、昭和62年 Texas A&M大学 Cotton研究室博士研究員、昭和63年 近畿大学理工学部助教授、平成4年 東京都立大学理学部教授、平成10年 京都大学大学院工学研究科教授、平成19年 京都大学物質-細胞統合システム拠点・副拠点長および京都大学大学院工学研究科（兼任）教授、現在に至る

平成16年度~平成19年度 文部科学省科学研究費補助金 特定領域研究「配位空間の化学」領域代表、平成19年度~平成24年度 JST ERATO北川統合細孔プロジェクト研究総括

【専門】錯体化学、特に集積型金属錯体による配位空間の化学

【受賞】第19回日本化学会学術賞（2001）、Earl L. Muetterties Memorial Lectureship (University of California, Berkeley) (2007)、錯体化学会賞（2007）、Humboldt Research Award, Germany (2008)、第61回日本化学会賞（2008）

【氏名】大西 敏博 (おおにし としひろ)

【所属機関・職】住友化学株式会社 筑波研究所 グループマネージャー

【連絡先】〒300-3294 つくば市北原6

Phone: 029-864-4305, Fax: 029-864-4748. e-mail: ohnishit8@sc.sumitomo-chem.co.jp

【専門】物理化学

【略歴】

1978年3月大阪大学大学院基礎工学研究科後期課程修了 工学博士

1978年4月住友化学工業株式会社（当時）入社

1981年次世代産業基盤開発プロジェクト「導電性高分子の研究開発」に従事

2005年住友化学株式会社 筑波研究所 グループマネージャー

【著書】高分子先端材料 One Point 高分子EL材料—光る高分子の開発— 高分子学会編集。

【氏名】時 任 静 士 (ときとう しずお)

【所属機関・職】日本放送協会 (NHK) 放送技術研究所 表示・機能素子研究部 部長

【連絡先】

【専門】導電性高分子、有機EL、有機トランジスタ、フレキシブルディスプレイ

【略歴】1987年九州大学大学院総合理工学研究科博士課程修了、工学博士。同年同大学院助手。1988年カリフォルニア大学博士研究員。1990年豊田中央研究所主任研究員。2001年NHK放送技術研究所主任研究員、2006年同所研究グループリーダー、2009年より現職。東京理科大学大学院客員教授および東京工業大学連携大学院連携教授兼任。

【受賞】2005年映像情報メディア学会藤尾フロンティア賞、IDW'08 Best Paper Award、2009年映像情報メディア学会論文賞

【著書】共著「有機ELディスプレイ」(オーム社)

【氏名】福山 秀敏 (ふくやま ひでとし)

【所属機関・職】東京理科大学 副学長、総合研究機構長、理学部教授。

【連絡先】〒162-8601 新宿区神楽坂 1-3

Phone:03-5228-8742, Fax: 03-3260-4772. e-mail: fukuyama@rs.kagu.tus.ac.jp

【専門】物性理論

【略歴】1970年東京大学理学博士、1970年東北大学理学部助手、1971年ハーバード大学 ポストドク、1973年ベル研究所 研究員、1974年東北大学理学部助教授、1977年東京大学物性研究所助教授、1984年東京大学物性研究所教授、1992年東京大学理学部教授、1999年東京大学物性研究所教授 (1999年—2003年東京大学物性研究所所長、2001年-2002年第61回文部科学省所轄ならびに国立大学附置研究所長会議会長、2002年—2005年国際純粋応用物理学連合 (IUPAP) Vice president、2002年-2007年JST-CREST「ナノ構造材料」研究総括)、2003年東北大学金属材料研究所教授、2004年東北大学金属材料研究所材料科学国際フロンティアセンター長、2004年東京大学名誉教授、2006年東京理科大学理学部教授 (2006年-2007年 Member of Committee on CMMP2010, National Research Council, USA)、2008年東京理科大学総合研究機構長、2010年東京理科大学副学長【著書】「メソスコピック系の物理」編著 (丸善、1996)、大学院物性物理2「超伝導」編著 (講談社、1997)、「物質科学への招待」、「岩波講座—物理の世界」(岩波書店、2003)ほか。【受賞】1985年アメリカ物理学会フェロー、1987年第1回日本IBM科学賞、1998年第3回日本物理学会論文賞、1998年第2回超伝導科学技術賞、2003年紫綬褒章、2004年第9回日本物理学会論文賞。

【氏名】辰巳 敬 (たつみ たかし)

【所属機関・職】東京工業大学資源化学研究所教授

【連絡先】〒226-8503 横浜市緑区長津田町 4259 R1-9

Phone:045-924-5238, Fax: 045-924-5282. e-mail: ttatsumi@cat.res.titech.ac.jp

【専門】触媒化学、ゼオライト科学

【略歴】1974年3月東京大学工学部総合試験所技官、1977年3月東京大学工学部合成化学科助手、1998年10月横浜国立大学工学部教授、2005年4月東京工業大学資源化学研究所教授。2007-2009年ゼオライト学会会長、2008年(社)石油学会副会長、2009年触媒学会会長

【著書】"Fine Chemicals through Heterogeneous Catalysis" Wiley-VCH, Weinheim (2001)他。

【受賞】触媒学会賞(2003年)、文部科学大臣表彰科学技術賞(2005年)、石油学会賞(2006年)、日本化学会賞(2007年)

【氏名】菅 裕明 (すが ひろあき)

【所属機関・職】東京大学先端科学技術研究センター 教授。

【連絡先】〒153-8904 東京都目黒区駒場4丁目6-1

Phone:03-5452-5495, Fax: 03-5452-5495. e-mail: hsuga@rcast.u-tokyo.ac.jp

【専門】生命分子化学・ケミカルバイオロジー・合成生物学

【略歴】1994年2月マサチューセッツ工科大(S. Masamune 研) Ph.D. Chemistry、1994~1997年8月マサチューセッツ総合病院・ハーバード大医学部博士研究員(J.W. Szostak 研)、1997年8月ニューヨーク州立バッファロー大化学科 Assistant Professor、2001年9月同大 Associate Professor (tenured)、2003年4月東京大学先端科学技術研究センター准教授、2005年1月現職。

【著書】「切磋琢磨するアメリカの科学者たち」菅裕明著、2004年共立出版

【氏名】 辺見 昌弘 (へんみ まさひろ)

【所属機関・職】 東レ株式会社 地球環境研究所 所長

【連絡先】 〒520-0842 大津市園山 3-2-1

Phone:077-533-8401, Fax: 077-533-8695. e-mail: Masahiro_Henmi@nts.toray.co.jp

【専門】 高分子化学、分離膜技術

【略歴】 1983年3月東京大学工学系研究科修士終了、1983年4月東レ株式会社繊維研究所、1993-1995年コーネル大学化学科客員研究員、1996年4月高分子研究所主任研究員、2005年10月地球環境研究所所長。2008年より(社)高分子学会関西支部理事。

【受賞】 日本経済新聞地球環境技術賞(2008年)

【氏名】 平尾 公彦 (ひらお きみひこ)

【所属機関・職】 理化学研究所 特任顧問

【連絡先】 〒177 0052 東京都練馬区関町東 1-2-12

Phone: 03-5903-9801, Fax: 03-5903-9801. e-mail: hirao@riken.jp

【専門】 理論化学

【略歴】 1988年4月名古屋大学教養部教授、1993年6月東京大学工学部教授、2009年3月退職。この間、東京大学工学系研究科長・工学部長、東京大学理事・副学長を兼務。2009年4月理化学研究所特任顧問。2006- 国際量子分子科学アカデミー事務局長、2004- アジア・パシフィック理論化学・計算化学会会長。【著書】「分子理論の展開」岩波書店(2002)他。【受賞】日本化学会賞(2005年)、Fukui Medal(2007年)、向井賞(2008年)。

日本化学会・科学技術振興機構合同特別公開シンポジウム

分子技術イニシアティブ

発行日 2010年3月27日

発行元 社団法人日本化学会
〒101-8307 東京都千代田区神田駿河台1-5
[TEL] 03-3292-6163 [FAX] 03-3292-6318
URL: <http://www.csj.jp>

発行人 社団法人日本化学会・独立行政法人科学技術振興機構

編集 日本化学会企画部

