H25年度採択

自己組織化技術に立脚した革新的分子構造解析

X線構造解析のボトルネックを解決、100年ぶりの革新

私たちの生活は、新しい物質の誕生で便利になってきました。新しい物質を特定するためには、分子構造を解析する必要があります。「X線回折法*」は信頼度の高い解析法ですが、試料の結晶化が必要で、多量の試料と膨大な時間を要していました。

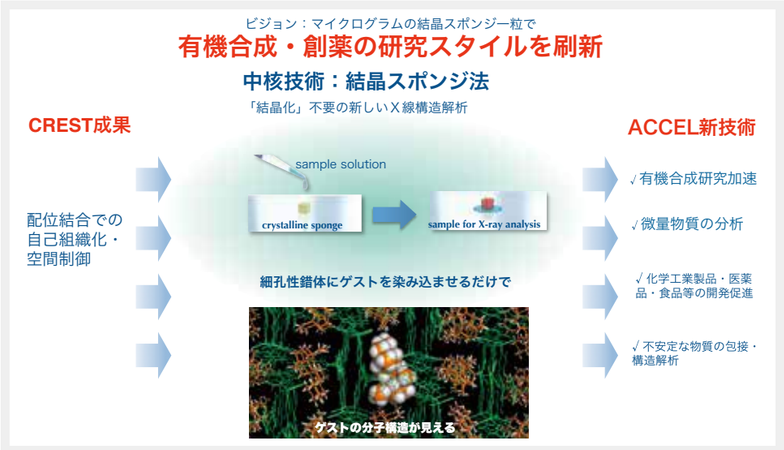
ですがこの度、試料の結晶化が不要な「結晶スポンジ法」を開発したことで、長年に及ぶ課題を解決しました。結晶スポンジ法を用いれば常温・液体の化合物でも解析できる上、従来の約1000分の1の量、約5マイクログラムで解析が可能です。これまでに、動植物から抽出される微量な成分の分子構造を分析する画期的な「LC-SCD法」を開発したほか、100種類以上の化合物の構造決定に成功しています。

*分子が規則正しく並んだ構造（周期配列）を、X線の回り込んで伝わる性質を利用して解析する手法。巨大な分子でも観察可能で、立体構造を視覚的に得られる。

より多様な物質を分析できるようにするための研究が進行中

ACCELではこれまでの研究の成果をもとに、結晶スポンジ法を実用化するための道筋を探っています。数種類の結晶スポンジを開発し、有機分子全体の2～3割には対応できていると推定しています。今後は分析できる分子の範囲を広げるとともに、特定の希少な分子をつかまえることに特化した結晶スポンジの開発も行っていきます。

結晶スポンジが社会に普及すれば、新薬開発の期間短縮など創薬をはじめ化学品や食品などの多様な分野でイノベーションに寄与できます。実用化に関わる人たちの力を借りながら、社会貢献を実現していきます。



結晶スポンジ法

結晶スポンジとは中空の化合物で、直径およそ0.5から1ナノメートルの細かい孔が無数に開いたカゴのような構造をしています。液体状の試料を結晶スポンジに含ませると、このカゴの中に分子が取り込まれて自動的に規則正しく配列されて安定になることで試料を結晶化することなくX線で構造を解析できます。

研究代表者

藤田　誠

東京大学　卓越教授、
自然科学研究機構 分子科学研究所　卓越教授

私は若いころは有機合成を専門に研究しており、一時期は無機材料を扱う部門も経験したことで、今の研究につながる分野横断的な発想の広がりを得られたのだと思います。X線構造解析を研究するきっかけは、有機分子と金属イオンを混ぜることで、今までにない構造が自然に組み上がる「自己組織化」を発見したことでした。その構造が分子構造の解析に使えるのではと閃いたことが、積年の課題解決につながりました。

ACCELでは、研究者が不得手な実用化について江崎PMに教わりながら、どのような仕組みを社会に提供するか構想中です。さまざまなタイプの結晶スポンジを開発し、分析できる分子の種類を増やすことが当面の課題で、現在の水と混ざりにくい分子の分析に向いたタイプ以外に、親水性の分子向け、酸性の分子向けなどのタイプも作成中です。

プログラムマネージャー

江崎　敦雄

科学技術振興機構 ACCELプログラムマネージャー

私は企業で製品開発や事業化を担当した経験があり、アカデミアのいい研究を実用化して産業界へ展開し、社会貢献をしたいという思いがありました。基礎研究はサイエンスとしての純度が高く、実用化につなげるまでには距離があります。そこに苦労もありますが、日々課題を解決していくことにやりがいと面白みを感じています。

この研究に興味のある企業の方々と数多く対話し、それぞれの企業でどのような社会貢献を目指しているかを伺っています。本プログラムを通じて企業・大学・関係機関のエコシステム全体で、「社会価値に貢献できる技術」に磨き上げて行きます。革新的な基礎研究成果をステークホルダーの方々と一緒に、社会実装可能な形に近づけていきたいと思っています。

基礎研究とはチャレンジングなもの。始めてから四半世紀でようやく応用に結びつこうとしており、何とか形にしたいと思っています。

PMとして、サイエンスとテクノロジーの両輪をつなぐ「車軸」をつくり、本研究を社会貢献というゴールへ走らせていきたいです。

PROFILE　MAKOTO FUJITA

1982年、千葉大学大学院工学研究科修士課程修了。同年、（財）相模中央化学研究所に入所。千葉大学、分子科学研究所、名古屋大学を経て、2002年より東京大学教授、2018年より分子科学研究所卓越教授併任。専門は分子の自己組織化に関する研究。工学博士。

PROFILE　ATSUO EZAKI

1980年、東京都立大学大学院工学研究科修士課程修了。同年、小西六写真工業（株）（現：コニカミノルタ（株））に入社。写真感光材料開発やインクジェット及び有機EL事業立ち上げを通じて、製品技術開発や事業スタートアップ、技術戦略推進などに従事。