

戦略的創造研究推進事業(CREST)における 研究領域「単一分子・原子レベルの反応制御」追跡評価報告書

1. 総合所見

CREST 研究領域「単一分子・原子レベルの反応制御」は、山本明夫研究総括の明確な視点と当該分野の近未来の展開を見越した適切な課題設定のもとに、当時、化学分野では唯一の研究領域として 19 名の中堅と若手研究者を研究代表者を選抜し、1995 年から 2002 年まで推進されたものである。期間中はもとより、終了後も研究活動が活発に行われており、着実な成果が挙げられている。また、本 CREST のスタート時期が STM, ATM, HR-TEM などの一分子・原子の観察に適した機器の発展期と重なったのも幸運であった。それらの研究は、CREST 期間中に挙げられた成果を発展させた研究と、成果を新たな方向に展開した研究、およびその一部の実用化や試薬の上市などからなっており、いずれにおいても注目すべきものがある。とくに、多数の共同研究者を育成し、また一般性の高い成果が世界各地での多数の波及的研究を誘発、研究開発動向に影響を与えた点が顕著である。

発展研究：本領域研究の期間中に得られた成果に基づいて、あるいはそれからの新しい発想によって、各研究グループにおいて着実に研究が発展的に展開されている。高分子担持触媒、新規有機触媒、完全フォトニック結晶、フォトメカニカル結晶、高分子ゲル内包触媒、遷移金属配位結合による自己組織化ナノ空間構築、迅速 X 線構造解析装置開発など、本領域研究で発見、開発、確立された数々の成果が新たな方向へと進展しつつある。

波及効果：本領域の成果は、多くが独創的で一般的意味を持ち、そのために世界各地でこれらに触発された多くの関連研究が行われるようになった。特許の出願数が 5 年間で総数 300 件強、外国出願 90 件余の内、実施ライセンスなどに至っているものが 60 件、ベンチャーも 4 件開始された。新規超強酸化合物、キラル配位子、エステル脱水縮合触媒、高分子担持型有機合成触媒、フォトクロミック分子ジアリールエテンなどに加えて、迅速 X 線構造解析装置やコールドスプレーイオン化法質量分析計などが実用化されている。企業 4 社が参画する経産省のグリーン・サステイナブルケミカル (G S C) プロセス基盤技術開発プロジェクトでのクリーンな化学プロセス技術や自己組織化集合分子による燃料電池電解膜など複数企業との共同研究が進行中である。

人材育成：数多くの将来性のある若手研究者が共同研究者として本 CREST に参画し、その経験と実績により、昇任や転出して独立した研究グループを形成している。また、「さきがけ」研究などの競争的助成に採択されている。このように本領域研究は、人材育成においても顕著な成果を挙げていると評価される。研究期間終了後に、研究者の多くが国内外の重要な顕彰を受けていることも特筆すべき事項である。

基盤構築：新たな研究領域を形成して、学術に貢献すると共に、国内外の多数の研究グループとの共同研究ネットワークの形成にも貢献した。事後においてもそのネットワークによる研究基盤の強化に貢献している。

以上から、本 CREST で培われた成果に基づいて、着実な事後研究が行われると共に、人材育成、波及効果と実用化への展開の両面においても十分な展開が進んでいると高く評価され、多額の資金を投下した果実が得られたと結論できる。

2. 研究成果の発展状況や活用状況

本 CREST 領域「単一分子・原子レベルの反応制御」は、当該分野の近未来の展開を見

越した適切な課題設定のもとに、19名の当時の中堅と若手研究者を研究代表者として選抜して1995年から2002年まで推進されたものであり、期間中はもとより、終了後も各構成員の研究活動が活発に行われており、事後においても着実な成果が挙げられている。それらの研究は、CREST期間中に挙げられた成果を発展させた研究と、成果を新たな方向に展開した研究、およびその一部の実用化や試薬の上市などからなっている。関連した業績での受賞や大規模研究資金の獲得も数多い。これに伴って、当時の共同研究者から多数の有能な人材が育成され、「さきがけ」研究員への採用や昇任なども実現している。多額の資金を投下した果実が得られたと結論できる。期間後の発展状況の代表的な成果を下記に例示する。

「X線解析による分子の励起構造の解明」(大橋裕二)では、迅速X線解析装置を開発し、これを基に結晶中分子の光励起時間分解構造解析への道を開いた。

「次世代精密分子制御法の開発」(山本尚)では、フッ素を含む新規のプロトン酸型超強酸、金属を含まない有機酸触媒、高分子担持触媒などの開発を行い、これらに基づいて、とくに不斉有機合成反応へ展開した。

「完全フォトクロミック反応系の構築」(入江正浩)では、本事業の前後に発見された一連のジアリールエテン誘導体が固体結晶状態で光照射により可逆的に発色すること(フォトクオロミズム)、および分子内の開環・閉環にともない力が発生すること(フォトメカニカル機能)に基づいて、光スイッチ、蛍光スイッチなどの分子エレクトロニクス素子と次世代高密度メモリー、分子アクチュエーターの実証などの成果を挙げている。

「多種類化合物群の効率的合成を指向した分子レベルの反応開発」(小林修)では、希土類塩の特性を生かした水中でのルイス酸触媒、金触媒などを高分子に担持した固体触媒、およびこれらを架橋ゲルに封じた触媒カプセルなどの開発に止まらず、水中での金属インジウム触媒反応の革新的発見にまで至っている。

「遷移金属を活用した自己組織性精密分子システム」(藤田誠)では、遷移金属塩の配位結合に基づく自己組織化によるナノ空間および種々の形態の組織体の構築、これらの内部空間で化学反応を進行させる単結晶フラスコ、金属棒状クラスターの合成などが行われている。

この他、斎藤のDNA操作などを含めて、本CRESTを契機として、物性・機能のメカニズムを単一分子・原子にまで遡って解明するスタンスが新たな展開、ブレークスルーをもたらしたと言えよう。

19件中の多くの課題がさらに次の大型プロジェクトに引き継がれたばかりか、更に次の段階に進んでいる。小林のERATOへの継続、次いで経産省グリーン・サステイナブルケミカル(GSC)プロセス基盤技術開発プロジェクトへの発展がその好例である。この他、研究分担者も含めて延べ17名が新たなJSTプログラムの研究代表者を務めている。

このように、本CRESTで培われた成果に基づいて、着実な事後研究が行われると共に、後述のように、波及効果と実用化への展開の両面においても十分な展開が進んでいると高く評価される。

3. 研究成果から生み出された科学技術的、社会的及び経済的な効果・効用及び波及効果

3.1. 研究成果の科学技術の進歩への貢献

本CREST領域「単一分子・原子レベルの反応制御」では、適切な領域課題の設定、実

績と評価の高い研究代表者の採択などにより、着実に優れた成果が挙げられ、これらに基づいて事後においても、数々の発展研究が展開されている。これに伴い、当然のことではあるが、期間中に挙げられた成果は国内外の多くの研究者の注目の集めるところとなり、その波及効果は明確である。

掲載論文誌の社会的名声と個々の論文引用数は、個人のひとつ一つの科学研究を評価する指標としては必ずしも役に立たない。しかし、ある分野に限ってグループ全体の傾向を評価するための客観指標としては有用である。実際、CREST 終了後も継続的に研究資金を得ているグループは論文引用も高い傾向があるように見られる。一方個々の論文に注目すれば、鯉沼のフェロ磁性論文の年 130~160 回、入江のフォトクロミズム論文の年 30~50 回の引用のインパクトには目を見張るものがある。今回の調査によれば本事業で生産した論文のなかに高いインパクトのあるものや継続的なインパクトのあるものが多く見られ、高いレベルでの国際競争に生き残っている研究者が選抜されていることを示す客観指標となっている。

このような「波及効果」の最も顕著な例は、入江の「完全フォトクロミック反応系の構築」において認められる。入江らが綿密な研究により到達したジアリールエテン誘導体は、巧みで論理的な分子設計により、結晶状態での紫外光照射により可逆的発色を示し、おそらくこれまで開発された一連の化合物の中で、結晶状態の保持、発色の明確さ、化合物の安定性、分子構造による色調の制御などの諸点において、ほぼ完全なフォトクロミック分子と評価されている。これに伴って、これらを組み込んだ機能性高分子の合成など多数の関連研究が誘発され、同時に蛍光スイッチ、光スイッチ、磁気スイッチなどの分子素子あるいは高密度光メモリーの開発が行われている。もう一つの成果であるジアリールエテン誘導体の開環・閉環に伴うフォトメカニカル機能の成果は、高速で変形し、明確な力を発生するなどの点で、真のアクチュエーターの可能性を示し、この分野の新たな進歩を促した。さらに、ジアリールエテン誘導体の設計と機能だけを課題とする国際会議が続けて開催されるまでに至っている。

山本および小林の触媒反応はグリーンケミストリーや原子エコノミーに立脚した新規化学プロセスの開発に成功した実例として、環境・資源戦略の観点からも科学技術の進歩に大きく貢献するものとして特筆に値する。

さらに、「逆転の発想」がいくつも見られることも強調したい。例えば、脱水系の反応を水中に持ち込む（小林）、静的な X 線構造解析を動的にする（大橋）、ソフトマテリアルでのみ可能と考えられていた構造異性をハードマテリアル（結晶）に持ち込む（入江）、ゼオライトを有機物で作る（青山）など。これらは、いくつかのブレークスルーを化学分野にもたらし、単一分子・原子の機作を理解することの重要性を強くアピールすることになった。

研究期間終了後に、研究者の多くが国内外の重要な顕彰を受けていることも特筆すべき事項である。19 名の研究代表者の内の 6 名もが、本 CREST 研究に直接関係する日本化学会から日本化学会賞を得、さらに研究分担者 4 名を含む 8 名が 45 歳以下の科学者の登竜門である日本 IBM 科学賞を得ていることは驚くべきことである。日本化学会賞と IBM 科学賞は対象年齢が実質的に異なるので、19 名中 10 名がトップの研究者としての顕彰を受けたことになる。学士院賞、紫綬褒章、フンボルト賞、アメリカ化学会賞、米国科学振興協会フェロー、など国内外の重要な賞を獲得したものも多い。

3.2. 研究成果の応用に向けての発展

特許の出願数が 5 年間で総数 300 件強、外国出願 90 件余の内、実施ライセンスなどに至っているものが 60 件を超しているということは精選された特許が出願されたことを意味するものである。ベンチャーも 4 件開始された。

本 CREST の成果の応用・実用化の例は必ずしも多くはないが、これは時間軸の問題と考えることも可能である。本 CREST のようなインパクトの大きな成果は将来必ずどこかで使用される必然性があるからである。もちろん、既に試薬や触媒などが市販されているものや先端計測機器などが実用化されているもの、企業との共同研究が進行中のものも少なくない。

これらの例としては、山本の新規ブレンシュテッド超強酸、新規キラル配位子、エステル脱水縮合触媒、山本・小林の高分子担持型有機合成触媒、および入江のフォトクロミック分子ジアリールエテン 5 種類などが市販されている。これらはもちろん基礎研究促進に止まらず、医薬中間体の工業的製造や分子素子としての企業開発研究にも進展しつつある。

また、大橋の迅速 X 線構造解析装置や藤田・山口のコールドスプレーイオン化法質量分析計などが実用化されており、これらは従来装置では不可能であった結晶内分子の反応追跡や不安定分子集合体の分子量測定を可能とするなど画期的な技術を提供するものである。両装置とも、わが国の計測機器メーカーへの技術移転と製品化につながったものであり、本 CREST 研究に限られた分野とは言え、わが国の社会経済的インパクトをもたらした好例といえよう。

経産省の G S C プロジェクトには企業 4 社が参画しており、クリーンな化学プロセス技術の実現が期待される。また、藤田の自己組織化プログラム集合分子に関する研究はナノテク関連企業からの期待が大きく、燃料電池電解膜、重合触媒、ドラッグデリバリーなどの実現にむけた複数企業との共同研究が進行中である。

このように、少なからず基礎研究への助成が応用面でも成果をもたらしており、大きな波及効果をもたらしたと評価できる。

3.3. 参加研究者の活動状況

ここで選ばれた研究代表者はもともと世界のトップだったものも多いが、19 名中 4 名の当時 36-39 歳の研究者は CREST 研究によって大きく世界に羽ばたいた。各課題の研究代表者は将来性のある研究分担者および共同研究者を多数採用あるいは起用しており、本領域の発展にともなって、これらの若手研究者が着実に育成されている。たとえば、多数の関係研究者が所属機関で昇任し、また昇任を伴って転出していること、新たな研究室を持って独立したこと、あるいは、ERATO や新たな CREST、「さきがけ」（若手新進研究者）などの高度に競争的な研究助成に採択されたことなどに現れている。日本の組織の常として、これらの「若手」研究者の成果を、本領域の研究代表者に帰する見解は根強いが、ある意味で意図的に明確に独立した課題に取り組もうとする後進も少なくなく、今後の成長が期待されている。

また、本領域の研究は、その成果の重要性と一般性から国内外の多数の研究グループとの共同研究などにも発展しており、参加研究者の昇任・転出とこれらの共同研究による新たな研究ネットワークが構築され、研究基盤の強化に貢献している。

4. その他

評価委員のいくつかのコメントを列挙しておく。

(1) CREST 制度は、研究総括の下に選定された、実績のある国際的な研究者が、比較的自由的な環境で独自の研究を十分な研究資金を受けて展開できる点で、高く評価されている。自由な環境での研究が真に有効に機能するには、担当各研究代表者の責任の自覚が必要であるが、少なくとも本 CREST 領域に関する限り、適切に時宜を得て採択された

各研究代表者が、期待に応じて十分な成果を期間中にも事後にも挙げており、本制度が有効に機能していると判断される。

(2) 直接的な波及効果ではないかもしれないが、本 CREST の終了後に JST において開始された「さきがけ」などの領域設定において、分子・原子レベルでの反応制御、これに伴う機能分子設計などが相次いで採用されており、化学全般の一般的傾向とはいえ、本領域の課題設定の先見性と波及効果の一端を表していると言えよう。

(3) 本 CREST 発足当時、化学系領域は本領域のみであったので、本領域の研究代表者に選抜された研究者が世界的に高レベルなのは当然ともいえる。一方で、JST の戦略目標が日本の強い分野をのばすという目標設定になっていなかったことを示しているようにも思われる。研究領域設定は JST 本体の責任であることを考えると、今後は、戦略目標設定法に関する第三者評価が必要である。

(4) その一方で、当時の領域設定が広い分野をカバーするものであったことが物理、化学、生物にまたがる新たな地平を開く多大の成果を挙げえたものと判断される。その意味において、最近の CREST の狭い限られた範囲の領域設定には再考が望まれる。

(5) 研究の結果として人材が育成されている、という受動的政策を見直すためにも、CREST 事業の人材育成へのインパクトについて、JST は調査を行うべきであろう。

(6) 技術参事の役割の重要性は、研究領域終了時における研究総括の自己評価書など、各所に指摘されているにもかかわらず、今回の評価用資料では、どこにも技術参事の氏名もその貢献内容も記載がないのはいかがなものか。今後の追跡調査においては改善すべきことと思われる。

(7) さきがけが人材育成の要因が含んでいるのに対し、CREST は ERATO と並んで世界的なリーダーを育てる制度だと理解している。実際に、現在、世界の檜舞台で活躍している人の多くが、これらの JST プロジェクトの関係者である。言い換えると、JST プロジェクトがないと、日本人研究者は世界的には one of them に埋没する危険性がある。その意味では JST/CREST に最大限の賞賛を与えたい。

(8) CREST の目的の中での応用／実用化の評価の位置付けが曖昧である。研究領域の性格による多様性を考慮しつつも、評価項目としての位置付けを議論すべきであろう。

(9) CREST 事業は高く評価できるが、一方で、近年の CREST の運営の現状については、関係者から問題点も指摘されている。例えば、昨今特に増加する傾向にある提出書類については、より簡潔なやり方が望まれる。また、特許に関しては、バйдール法が導入される中、大学と JST とのより一層の有機的連携が必要であろう。

以上