

平成22年4月15日現在

研究種目：特定領域研究

研究期間：2007～2011

課題番号：19056014

研究課題名（和文） 分子高次系機能解明のための分子科学-先端計測法の開拓による素過程的理解

研究課題名（英文） Molecular Science for Supra Functional Systems - Development of Advanced Methods for Exploring Elementary Processes

研究代表者

藤井 正明 (FUJII MASAOKI)

東京工業大学・資源化学研究所・教授

研究者番号：60181319

研究代表者の専門分野：分子分光学

科研費の分科・細目：基礎科学・物理化学

キーワード：分子システム、分子間相互作用、界面分子分光、分子クラスター、反応ダイナミクス、超高速分光、時空間分解分光学、タンパク質ダイナミクス

1. 研究計画の概要

20世紀の分子科学は単純化、理想化、精密化の研究の時代であり、分子線中のクラスター構造とダイナミクスの研究、フェムト秒を切る勢いで発展している超高速レーザーとそれを用いた分光、さらに生体分子に対する共鳴ラマン分光など、様々な方法が開発され、分子科学の基本分野において、個々の分子やクラスターに対する素過程的理解は極めて深まってきた。一方、生体機能に代表されるような実在分子高次系における分子の働きは複数の過程により実現され、協調的に連動することで極めて効率よく精緻に機能している。この精緻な協調的連動を素過程に分解して理解することは、21世紀の分子科学に課せられた大きな命題であり、生命科学、材料科学、ナノサイエンス、など様々な実在分子高次系に対する科学の知的基盤を提供する。そこで、本領域「高次系分子科学（略称）」では分子科学とその関連分野で発達した計測技術と素過程的理解を融合し、新たな先端計測方法論を創出しつつ実在分子高次系の分子論的理解を目指す。気相クラスター、凝縮相、生体分子研究など、従来は個別に発展してきた領域の研究者が分野の垣根を超えて緊密に連携することにより分子科学に新しい潮流をつくり、高次複合性に対する分子論的理解を目指す。本特定領域で創出される新たな研究手法は、これら高次な分子相互作用で成り立つ現象を理解するツールとして、化学のみならず生命からナノ・材料まで広い領域の学術研究に対して貢献することが期待される。

2. 研究の進捗状況

気相分光、凝縮相超高速ダイナミクス、生体分子科学領域で平均年齢41歳の若手研究者を結集し、分子システムの連動性を階層的に研究した。例えば気相から生体分子へのアプローチに成功し、凝縮相、生体分子研究と連携できる基礎手法を作り上げた。生体関連分子を気相生成させる新規な蒸発源の開発と神経伝達物質への応用、分子の協調的連動である多重プロトン移動の発見、水200量体という凝縮相へブリッジする巨大クラスターの構造研究などに成功した。凝縮相の基本分子内の高次的な連動性に関しては、光異性化反応における分子の連続的構造変化を実測し、その多次元反応座標を解明した。不均一系に於いては酸化物表面の局所的仕事関数をケルビンプローブ顕微鏡により計測すると共に、電極近傍の疎水性水和殻の変化を初めて明らかにした。光合成のタンパク質複合体モデルを人工的に構築し、基板上での組織化に世界に先駆けて成功した。さらに、生体系で重要なタンパク質に関して新規計測手法を開発し連動性機構の解明を進めた。分子センサー及び光センサータンパク質の機能発現機構、タンパク質内低障壁水素結合、ドメイン運動と水和構造の連動的運動の発見、プロトンポンプに関する新たなモデルなど、生体水素結合ネットワークに関する研究が著しく進展し、新規一分子分光法、非染色分光イメージング、in-cell NMR法など、独創的新規計測手法も開発した。

3. 現在までの達成度

①当初の計画以上に進展している。

(理由)

領域を超えた共同研究が多数始まり、班員の受賞も40件を数えた。国内評価委員、外国人評価委員からも「国際的にも最高水準」、「若手の高い研究能力と情報発信力」「化学の潮流を変えるポテンシャルがある」と高い評価を頂いた。以上の様に本領域は高次機能分子に対して気相、凝縮相、生体分子研究者の共同研究を可能とし、若手研究者による領域を超えた新たな分子科学の創成として大きなインパクトを与えている。

さらに、平成21年度の間評価は既に行われており、

評価結果:A(現行のまま推進すればよい)

を頂いている。

4. 今後の研究の推進方策

中間評価において頂戴した意見は「本研究領域では、気相クラスター・界面・生体分子の研究者が現実系の分子システムの理解に向けて新たな実験手法を開発することで、水素結合ネットワークを核として既に優れた幾つかの研究成果をあげており、その実績は高い評価に値する。また、若手研究者を積極的に研究グループに加えている点や、研究課題間の有機的な連携・共同研究が活発に行われている点も高く評価する。多くの学術論文の発表、国内及び国際研究集会の開催、研究成果の公開・情報発信等も積極的に行われており、その点も申し分ない。今後の推進方策も適切であり、分子システムの理解に最終目標を設定した上で理論も系も含めて厳選された公募研究を補強しなから引き続き戦略的に共同研究を展開し、更にインテグレートして全体像の確立に向けて研究を推進することを期待する。」というものである。これを反映し、以下の推進方策で進める。

計画班と公募班が一体となった研究推進によって、従来のクラスター研究、凝縮相研究、生体分子研究の分野間の垣根が取り払われ、新しい高次系分子科学研究を強力に推進できるようになった。当初、計画班には比較的少数だった理論研究者も公募班の参加によって充実し、討論や共同研究を通じて実験と理論の連携が進んでいる。また、先端計測法の観点からもX線、中性子散乱、蛍光相関分光など幅広い手法を用いる研究者が集い、レーザー蒸発イオン化用の無機ナノ構造基板など方法論を広げる材料、物質も豊富である。さらに研究対象もナノケージ、包摂化合物、タンパク質と水の相互作用など大きい広がりを見せている。きわめて高いレベルにあ

る班員の個々の研究活動を推進するとともに、共同研究を推進することは本研究領域にとって極めて重要であり、合同班会議等によって相互理解に努めている。実際、従来では考えられなかった組み合わせによる連携研究も既に成果を挙げはじめており、本研究領域は大きな成功を収めつつある。基本的にはこれまでに推し進めてきた方策をさらに強力に推し進めるとともに、理論系を含め領域を超えた高次系分子科学に資する新たな公募班を厳選して選定し、さらなる活性化を図り、班内および班間共同研究を積極的に推進する。

このために、総括班では領域全体会議、総括班会議、評価会議等の開催を主催する。評価には欧米の研究者(外国人評価委員)にも加わって頂く。具体的には、年に1回ずつの公開シンポジウムおよび合同班会議を開催する予定である。このうち公開シンポジウムの一部を国際シンポジウム(平成23年度)として開催する予定である。これらの全班員が集う研究集会に加えて、特定のトピックスに集中したミニ公開シンポジウムを積極的に開催する。

領域をいっそう発展させるために、中間評価以降には可能ならば共同研究を予算面からも推し進めたいと考えている。例えば、領域内で共同研究のために機動的に運用できる予算があるならば極めて効果的であり、実現を願っている。それがかなわないまでも、共同研究の核を形成する研究集会などに積極的な旅費支給を行い、領域を超えた共同研究の推進と高次系分子科学という新たな分野の創出を強力に推進する。

5. 代表的な研究成果

総括班は研究領域の運営を使命としており、予算は研究に直接使用することができないため、本項目はそもそも該当しない。