

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 5 月 24 日現在

機関番号：82401

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2013～2017

課題番号：25104001

研究課題名(和文)理論と実験の協奏による柔らかな分子系の機能の科学

研究課題名(英文) Studying the Function of Soft Molecular Systems by Concerted Use of Theory and Experiment

研究代表者

田原 太平 (TAHARA, Tahei)

国立研究開発法人理化学研究所・田原分子分光研究室・主任研究員

研究者番号：60217164

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 88,800,000円

研究成果の概要(和文)：「柔らかな分子系」では計1066報の論文発表に代表される大変高い研究成果があがった。この内56報は共同研究の成果であり、様々な企画を通じて行った努力によって理論、計測、創成を融合した研究が実現できた。国際学会で班員による13の基調講演を含む456もの招待講演が行われ、英国王立化学会の学術雑誌、Phys. Chem. Chem. Phys. に複雑分子系研究に関する特集号を発刊し、強力な国際発信ができた。若手研究者の育成を行い、大学の教授、准教授、助教を始めとした職に73名がついた。これらによって複雑系の分子科学の新しい学術領域と分野横断的研究ネットワークを予想を超えた高いレベルで創造できた。

研究成果の概要(英文)：The "soft molecular systems" project produced very high research results, represented by 1066 publications of papers. Of these, 56 are the papers about the result of joint research, which manifests that we could realize the research combining theory, measurement and creation through the efforts like science camps, workshop etc. The project members gave 456 invited talks including 13 plenary lectures in the International conferences, and we organized a special issue on complex molecular systems research in Phys. Chem. Chem. Phys. that is a top journal published by Royal Society of Chemistry, which demonstrates our strong appeals in international community. We trained young researchers, and 73 people got jobs including university professors, associate professors and assistant professors. Through these, we have created a new scientific field of molecular science of complex systems and cross-disciplinary research networks at a high level exceeding expectations.

研究分野：物理化学

キーワード：分子複雑系 理論・計算 先端計測 機能創成 分子科学

1. 研究開始当初の背景

物質科学は20世紀において驚異的な進歩を遂げ、われわれの生活は前世紀とは比較にならないほど豊かになった。その一方で、人類の活動の急速な増大によって多くの資源がきわめて速い速度で消費されるようになり、現在の水準を保ったまま、持続可能な社会を実現することが急務となっている。その意味でこれまでの物質科学はその限界を見せ始めている。一方、分子生物学の誕生によって始まった生命科学の革新は、生物学を多様な生物を整理する博物学から、生命活動を分子現象として理解しようとする先端科学へと変貌させた。これによって、生命を複雑かつ驚異的な機能を実現する多数の分子からなる一つの系として理解しようとする視点が形成されたが、これは、原子・分子単体の理解からボトムアップ的に発展してきた物質科学にも大きな刺激を与えることになった。なぜなら、生命活動あるいはその要素現象は極めて複雑にも関わらず、常温下で大きなエネルギーも必要とせず、極めて特異的に進行する究極の効率を持った分子過程であるからである。つまり、物質科学の一つの究極の目標として、生命に象徴されるような複雑系の理解、制御、利用の重要性が意識されるようになった。

こういった状況を背景に、分子科学とその関連分野を統合した複雑系研究(複雑分子系の科学)推進の必要性が高まっていた。物質は単一の分子から細胞に至る階層構造を成しているが、これに対応して21世紀の化学のフロンティアは複雑系の機能の解明と創出にあると言える。生体分子系に代表される高い機能を有する複雑系の本質は系が必要に応じて柔軟に変化し最適な機能を発現できるという点であるが、このような分子系の「柔らかさ」に基づく物質研究は未開拓であり、従来のカテゴリーに縛られたアプローチでは解明できない。そこで分子科学、生物物理学、合成化学、理論・計算科学の叢智を集め、革新的な分子理論による理解と予測、最先端計測による現象観測、合成化学や遺伝子工学を駆使した機能変換・創成研究の3つを協奏的に行い、理論と実験を融合させた新しい学術領域を創出するため、新学術領域研究「柔らかな分子系の科学」を推進することとなった。

2. 研究の目的

分子科学とその関連分野を統合した複雑系研究である「柔らかな分子系」を推進するためには、広い時間スケールと異なる空間階層構造を縦断する研究アプローチを連結すると同時に、理論、計測、創成という異なる研究分野を集約させる必要がある。本新学術領域ではこれを、複雑系の本質を理論・計算化学を用いて解析する「(A01) 柔らかな分子系解析」、複雑系の挙動を先端的計

測法を用いて計測する「(A02) 柔らかな分子系計測」、遺伝子操作や物質合成を駆使して複雑系の新しい機能を創る「(A03) 柔らかな分子系創成」という3つの研究項目を立てて、これらを有機的に結合にすることによって実現する。すなわち、各研究項目での強力な研究推進・共同研究はもちろんのこと、これまで別々の分野として縦割りに分断されていた理論、計測、創成研究の間の垣根を取り払い、真の分野融合と深い相互理解に基づいた新しい研究協力体制を構築する必要がある。そこで本研究では、これを実現するために本新学術領域研究の総括班活動を行い、これによって「柔らかさ」をキーワードにした、新しい、複雑系の分子科学の学術領域を創造することを目的とした。

3. 研究の方法

総括班は、3つの研究項目が分野の垣根を取り払い、それらが緊密に連携して研究できる環境を構築することでこの新学術領域研究をガイドした。即ち、本領域の研究方針策定を行い、研究項目間の調整・サポート・総括を行った。この総括班は、実際の運営に当たる実行グループと評価グループの2つによって構成した。このうち、実行グループは全体の研究方針を策定し、研究を推進するための支援活動を行い、さらに領域内の共同研究を促進するための研究支援、領域内の研究者によって提案されるワークショップの開催支援、若手研究者の海外派遣等を行った。また年度ごとに泊まり込みで全体合宿会議を行って領域内での研究成果を共有すると共に、ニュースレターやホームページを通じて情報交換を促進し、共同研究の醸成をはかった。さらに社会還元としての情報発信を進めるために毎年一回公開シンポジウムを開催した。得られた研究成果は、ホームページにより内外に広く発信すると共に、国際研究集会の開催や海外の学術誌での特集号の発刊など、我が国で始まったこの複雑分子系研究の新しい流れを強く国際発信した。これらの活動に対して評価グループは俯瞰的な立場から、領域全般の研究について世界的な動向をも含めた評価や提言を行った。

4. 研究成果

新学術領域研究「柔らかな分子系」では5年間の研究活動において、いわゆるハイ・インパクトジャーナルに掲載されたものを多数含む計1066報(国際雑誌論文985報、国内雑誌論文81報)の論文を発表するなど、予想を超える大変高い研究成果があがった。特に上記の発表論文の中で56報は本新学術領域によって推進された共同研究に基づく論文であり、本領域で理論、計測、創成を融合した研究活動が実現したことを端的に示している。また、班員によって海外開催

を含めて43にのぼる国際研究集会が開催され、国際学会では13の基調講演を含む456にもものぼる招待講演が行われ、さらには英国王立化学会 Royal Society of Chemistry の学術雑誌、Physical Chemistry Chemical Physics に本研究の代表者と分担者である総括班実行グループ5名がゲストエディターとなった特集号が2018年に発刊されるなど、強力な国際発信ができた。これらの研究活動を通して若手研究者の育成を行い、大学の教授、准教授、助教を始めとした職に73名の若手研究者がついた。これによって「柔らかかさ」をキーワードにした、新しい、複雑系の分子科学の学術領域と分野を横断した研究ネットワークを、予想を超えた高いレベルで創造することができた。

以下、個別に本研究として行った新学術領域研究「柔らかな分子系」の総括班活動について述べる。これらの実行にあたって、総括班実行グループの5名(田原、北尾、水谷、神取、藤井)は緊密に連絡を取り合うと共に頻りに総括班会議を開催して密に議論し、それを元に公平性と透明性をもった運営を行うよう、最大限の努力を行った。

(1) 公開シンポジウム

研究活動を広く公開するために年一回開催した。この公開シンポジウムには国内評価委員を招待して同時に総括班会議を開催し、本新学術領域研究の運営と研究について評価と助言をもらった。特に平成26年度および平成29年度に開催した第三回、第五回は国際シンポジウムとし、国内評価委員に加えて国際評価委員を招待して基調講演をしてもらうとともに班員の発表もすべて英語で行った。国際評価委員には班員全員が行った研究発表を元に国際的見地からの評価と助言をもらった。各年度に開催した公開シンポジウムの詳細は以下の通り。

第1回公開シンポジウム：平成25年10月5日 キャンパスイノベーションセンター(東京都港区) 参加者152名。

第2回公開シンポジウム：平成26年11月28-29日 大阪大学会館(大阪府豊中市) 参加者121名。

第3回公開シンポジウム(国際)：平成27年7月9-11日 未来館ホール(東京都江東区) 参加者145名。

第4回公開シンポジウム：平成28年10月27-28日 名古屋工業大学(愛知県名古屋市) 参加者132名。

第5回公開シンポジウム(国際)：平成29年6月26-28日 ロイトン札幌(北海道札幌市) 参加者105名。

(2) 全体会議並びに全体合宿会議

領域の全研究グループの間の相互理解・信頼を深め、新たな連携・共同研究を促進するために領域メンバーが一同に集まる全体会議を開催した。第二回全体会議からは

泊まり込みで徹底した議論を行う全体合宿会議とし、これを年一回開催した。

第1回全体会議：平成25年10月5日、東京都港区(計画班員のみで開催)。

第2回全体合宿会議：平成25年12月5日~7日、滋賀県長浜(計画班員のみで開催)。

第3回全体合宿会議：平成26年6月3日~5日、山梨県北杜市、参加者112名。

第4回全体合宿会議：平成27年11月24-26日、福岡県北九州市、参加者88名。

第5回全体合宿会議：平成28年5月30日-6月1日、新潟県十日町市、参加者116名。

第6回全体合宿会議：平成29年12月12-14日、沖縄県中頭郡、参加者109名。

(3) ワークショップ

特定のトピックスについて集中した議論を行うため、班員の発案による10~30人規模のワークショップを以下のように5年間で28回開催した。このうち年1回は若手研究者がオーガナイズする若手ワークショップとして開催した。

平成25年度

・国際ワークショップ “What is soft molecular system?” 長野県上諏訪市、平成26年3月10-11日、

・若手ワークショップ「若手研究者の考える柔らかな分子系」愛知県名古屋市、平成26年3月26日、の2回開催。

平成26年度

・国際ワークショップ “Over the Barriers of Transition Paths: Dynamical Processes in Proteins and Complex Molecular Systems,” 神奈川県横浜市、平成27年6月28日、

・ワークショップ「やわらか光受容分子の理解と利用に迫るブレインストーミング研究会」長野県上諏訪市、平成28年1月24-25日、

他、全7回開催。

平成27年度

・ワークショップ「光駆動ナトリウムポンプからタンパク質の柔らかさと機能のつながりを考える」愛知県犬山市、平成27年10月28-29日、

・ワークショップ「ダイナミクス観測からタンパク質の「柔らかさ」を観る」大阪府池田市、平成28年3月1-2日、

他、全6回開催。

平成28年度

・ワークショップ「和周波分光の進展」東京都文京区、平成28年6月10-11日、

・ワークショップ「構造変化で操る分子の機能」東京都文京区、平成29年1月21日、

他、全6回開催。

平成29年度

・ワークショップ「氷の分子科学」埼玉県さいたま市、平成29年5月13日、

・若手ワークショップ「若手研究者が描く

分子理論の未来」宮城県仙台市、平成 29 年 9 月 14 日、
他、全 7 回開催。

(4) 若手研究者の海外派遣

国際感覚をもった若手研究者を育成するために「柔らかな分子系」の開始から 3 年間、若手研究者の海外渡航を総括班の活動として援助した。国際活動支援班の設置が認められた平成 27 年度の途中からはこのプログラムの推進は国際活動支援班に移管した。

平成 25 年度：11 名（大学院生 7、博士研究員 4）。派遣先：アメリカ合衆国、ドイツ、イギリス、オーストラリア、シンガポール、台湾。

平成 26 年度：11 名（大学院生 8、博士研究員 3）。派遣先：アメリカ合衆国、アルゼンチン、ドイツ、フランス、オランダ、ベルギー、ニュージーランド。

平成 27 年度：9 名（大学院生 4、博士研究員 4、助教 1）。派遣先：アメリカ合衆国、インド、チェコ、スペイン、フランス、韓国。平成 27 年度はこれに加えてさらに 4 名の若手研究者を新たに設置された国際活動支援班の活動として海外に派遣した。したがって本領域としては平成 27 年度に全部で 13 名を海外派遣した。

(5) 共同研究推進

領域内で進行する共同研究を促進するために研究経費を総括班経費から援助した。

平成 25 年度：

2 研究グループ、計 1,500 千円。

平成 26 年度：

3 研究グループ、計 1,800 千円。

平成 27 年度：

2 研究グループ、計 1,500 千円。

平成 28 年度：

6 研究グループ、計 5,800 千円。

平成 29 年度は最終年度のため実行しなかった。

(6) ニュースレター

班員の活動を領域内に周知して情報共有をはかるため、発表論文の内容解説、領域行事報告、若手研究者の海外派遣報告、受賞報告などを記事としたニュースレターを平成 25 年 9 月より毎月発行した。5 年間の研究期間中に計 55 号、合計 523 ページを発行した。

(7) アウトリーチ活動

領域全体のアウトリーチ活動として以下にあげる 5 回のアウトリーチ活動を行った。中でも第 4 回アウトリーチ活動は、我が国に女性研究者が著しく少ないことを受けて、女性班員が自発的に企画したものである。また、これに加えて班員がそれぞれ所属する大学、研究機関で柔らかな分子系とタイアップしたアウトリーチ活動を行った。こ

らアウトリーチ活動に関して、総括班ではコンピュータグラフィックスを実際に触ったかのように感じることでできる仮想現実デバイスである Haptic デバイスを購入した。これを領域全体のアウトリーチ活動で用いる他、各地でアウトリーチ活動を企画する班員に貸し出し、活用してもらった。

本領域全体として企画・実行したアウトリーチ活動の詳細は以下の通り：

第 1 回アウトリーチ活動：「柔らかな分子ってどんなもの？」、大阪大学（大阪府豊中市）平成 26 年 11 月 29 日。

第 2 回アウトリーチ活動：「高校生のためのサイエンス体験：柔らかな分子を観察しよう」、日本科学未来館（東京都江東区）平成 27 年 7 月 11 日。

第 3 回アウトリーチ活動：「高校生のためのサイエンス体験：『光といのち』を支えるタンパク質というマテリアル」、名古屋工業大学（愛知県名古屋市）平成 28 年 7 月 26 日。

第 4 回アウトリーチ活動：「女子中高生のためのアウトリーチ活動：サイエンスが好きです - 私たちのオンとオフ」、キャンパスイノベーションセンター東京（東京都港区）平成 28 年 11 月 19 日。

第 5 回アウトリーチ活動：「高校生のためのサイエンス体験：柔らかな分子ってなんだろう」、東工大蔵前会館（東京都目黒区）平成 29 年 11 月 19 日。

(8) ホームページ、Facebook、Twitter

ホームページを日本語、英語で開設するとともに、フェイスブック、ツイッターも活用して本領域の活動を広く一般に周知した。

(9) 国際発信

国際研究集会の開催

(1) で述べたように、公開シンポジウムの第 2 回と第 5 回を国際シンポジウムとして開催して国際発信に努めた。また著名な外国人研究者が来日した際には積極的に国際ワークショップの開催を援助して班員による国際発信を支援した。また各班員も積極的に国際研究集会をオーガナイズした。特に 2015 年の 12 月に米国ハワイで開催された環太平洋国際化学会議（Pacifichem 2015）では班員がオーガナイザーとなった以下の 5 つのシンポジウムが開催された（カッコ内はオーガナイザーとなった班員とその研究項目）：

- ・ Interplay Between Chemistry and Dynamics in Biomolecular Machines
北尾 (A01), 林 (A01).
- ・ Recent Experimental and Theoretical Advances in Studies of Liquid Interfaces
田原 (A02), 森田 (A01), 山口 (A02).
- ・ Developments in Spectroscopic Investigation of Intermolecular

Interactions and Dynamics of Molecular Clusters

藤井 (A02), 関谷 (A02) .

・ Chemical Imaging: Frontiers of Spatio-Temporal Resolution

藤井 (A02), 酒井 (A02) .

・ Chemistry and Applications of Retinal Proteins: From Microbes to Humans

神取 (A03) .

国際学術誌における特集号の発刊

英国王立化学協会 Royal Society of Chemistry の学術誌 Chemical Physics Physical Chemistry に、本研究の研究代表者と分担者である総括班実行グループ 5 名 (田原、北尾、水谷、神取、藤井) がゲストエディターとなって複雑分子系研究の特集号 “ Themed issue: Complex molecular systems: supramolecules, biomolecules and interfaces ” を 2018 年 2 月に発刊した。この特集号には本新学術領域の班員はもちろん、領域外の世界各地の強力な研究者からも論文が投稿され、特集号としては異例とも言える 51 にものぼる多数の論文 (その一つはゲストエディターである総括班実行グループが共著で書いた巻頭言) が掲載された。またこの特集号の 4 つのカバー論文には、すべて本新学術領域研究で行われた班員間の共同研究の成果についての論文が選ばれた。本領域で興した新しい複雑分子系研究の流れを世界の潮流にするべく、この特集号の発刊時期は本領域の終了時期に合わせ、これによって本領域の成果を世界に強力に発信した。

5 . 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 1 件)

T. Tahara, A. Kitao, Y. Mizutani, H. Kandori and M. Fujii, Complex molecular systems: a frontier of molecular science (複雑分子系に関する特集号の巻頭言), Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 2945-2946 (2018), 査読無.

DOI: 10.1039/c8cp90010h

[その他]

ホームページ :

<http://yawaraka.org/>

フェイスブック :

<https://www.facebook.com/soft.molecular.systems>

ツイッター :

<https://twitter.com/softmolsys>

6 . 研究組織

(1) 研究代表者

田原 太平 (TAHARA, Tahei)

国立研究開発法人理化学研究所・田原分子分光研究室・主任研究員

研究者番号 : 60217164

(2) 研究分担者

藤井 正明 (FUJII, Masaaki)

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授

研究者番号 : 60181319

北尾 彰朗 (KITAO, Akio)

東京工業大学・生命理工学院・教授

研究者番号 : 30252422

水谷 泰久 (MIZUTANI, Yasuhisa)

大阪大学・理学研究科・教授

研究者番号 : 60270469

神取 秀樹 (KANDORI, Hideki)

名古屋工業大学・工学 (系) 研究科 (研究院) ・教授

研究者番号 : 70202033