

## 科学研究費補助金研究成果報告書

平成 24 年 5 月 31 日現在

機関番号：12608 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 Masaaki) 東京工業大学・ソリューション研究機構・教授 研究者番号：60181319
--

### 研究成果の概要（和文）：

計画班と公募班が一体となった研究推進の支援を図り、従来の研究分野間の垣根を取り払うことに成功した。実際、A01 班（分子高次班）と A03 班（生体高次班）の間の共同研究など、従来では考えられなかった連携による新規な計測手法開発、研究が成果を挙げた。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、若手研究者を含めた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ることに成功した。

### 研究成果の概要（英文）：

The efforts for progress of collaborations succeeded to achieve a breakthrough in the barrier between traditional research areas. For example, several collaborative works between A01 (gas phase) and A03 (biological) groups, which had little interaction before, have generated innovations on technologies and research works. The priority area opened a new world of the molecular science for supra functional systems to shed light on mechanism that controls systematically organized molecular systems like organisms.

### 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合 計
2007 年度	6,600,000	0	6,600,000
2008 年度	11,000,000	0	11,000,000
2009 年度	13,200,000	0	13,200,000
2010 年度	9,700,000	0	9,700,000
2011 年度	12,900,000	0	12,900,000
総 計	53,400,000	0	53,400,000

研究分野：分子分光學

科研費の分科・細目：基礎科学・物理化学

キーワード：高次分子系、先端計測法、分子科学、ニュースレター、ミニシンポジウム

#### 1. 研究開始当初の背景

精緻に働く生体機能に代表されるような高度にシステム化された反応系の制御メカニズムの理解は 21 世紀の分子科学の大きな命題の一つである。これらの系は非常に高度

に組織化されており、複数の分子素過程が協調的に連動することで発現する。しかし、そのあまりの高度な複合性のために既存の方法では発現の本質を捉えることが困難であり、全貌が理解されていない。しかし、その

機能の根元的な問題は、本来、分子科学の問題に帰着できる。このことは 20 世紀における様々な科学研究により各反応ステップを個別に追跡することで明らかとなってきた。そしてそれぞれの反応については多くの専門的な研究の対象となってきた。例えば、たんぱくの機能発現に本質的とされる構造揺らぎは分子科学で言うところの大振幅振動の問題に他ならず、生体内のプロトン移動を考える際に重要な水素結合ネットワークの問題は、気相のクラスター研究と密接に関連している。しかし、現在のところ、これらの個別のテーマは基本的には独立に研究がおこなわれてきており、それらを組み合わせた分子系においてどのような連携が働き高次機能へと結びついていくのかについてはほとんど手付かずの状態になっていた。このように自然に結びつくべき重要な問題が分子科学者によって未だ十分研究されていない理由の一つは、分子科学の分野が細分化されすぎ、ともすれば硬直化している点にあったと言わざるを得ない。このような状況を打破し、生体分子に代表される複雑系における機能解明という大きな命題を分子科学の問題として正面からとらえるためには、生体分子の研究者、凝縮相の研究者、界面・表面の研究者、気相・クラスターの研究者が一同に会し議論し、狭い分野の垣根を取り払った連携を図ることが必須であった。

## 2. 研究の目的

このような考えに立脚し、本特定領域研究では、まず分子間相互作用とその関連ダイナミクスについて焦点を当て、気相、溶液、界面、生体など多岐にわたる研究対象に対して独自の方法論を開発してそれぞれの分野をリードしてきた研究者を融合する組織的研究チームを結成する。これにより周波数領域と時間領域の分光、および理論計算からも研究を押し進め、精緻な方法論と論理的な考察を得意とする分子科学研究に生体機能のように分子と分子が協調的に連動して初めて実現される高次な機能を理解するための先端的計測方法論を開拓する。さらにそれらを駆使して高次複合過程を分子論的理解に新たな道を開くことを目標とした。

総括班では、このような研究者間の有機的連携を円滑に進め、さらに、得られた結果を他のメンバーにも周知しさらなる研究の進

展を推進すること、および得られた成果を広く公表し高次系機能解明の重要性について認知させることを主たる目的とした。

## 3. 研究の方法

総括班は、4 人の研究計画実施グループと、国内評価委員 6 名、海外評価委員 6 名の計 12 名からなる評価グループを構成した。実施グループは、事務作業・運営はもとより、最新の計測技術あるいは多様な反応系を比較・検討し、班内あるいは班間の共同研究を積極的にアレンジし、また自らもそれを担うことで運営を行なった。また評価グループには、研究の国際性、グローバルな広がり、さらには生体分子に関する先端計測の国際競争力強化の観点から本特定領域研究の成果について厳しく評価して頂いた。このような体制で研究を推進することで、世界に通用する新しい研究分野の創出を実施した。

研究評価並びに確実な研究推進のため、領域全体会議、総括班会議、班会議等の開催を主催した。本特定領域の構成要素である 3 つの班 (A01: 分子高次系班、A02: 複合高次系班、A03: 生体高次系班) の各班からの要望に応じて、随時、班別研究会、班間合同研究会の開催の支援を行なった。これにより、A01 から A03 の三つの班が分野の垣根を超えて緊密に連携する環境を整えることを支援した。

さらに、研究経過および成果をまとめ、定期的に情報発信を行うために、毎年 1 回計 6 回の公開シンポジウムを開催した。うち 3 回は外国への発信も目的として国際学会として行った。さらに基本的に本特定領域に参加している研究者全員が合宿形式で一堂に会し、十分に時間をかけて交流を図ることで研究成果の発表や今後の研究方針共同研究の提案などを促すことを目的として、毎年一回、計 6 回の合同班会議の開催を行なった。

さらに、領域研究の活動・成果を積極的に情報発信する手段として Web ホームページを開設し、毎月の更新により領域内の各研究者間での情報交換の場としても利用した。また、世界に通用する新しい研究分野を創出する意気込みをアピールするためにホームページは英語での運営も行なっている。最終的には、研究成果の取りまとめとして、また、海外への情報発信として、英文モノグラムを発行する予定である。

#### 4. 研究成果

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だ。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盤など方法論を広げる材料、物質に対する共同研究を推進することが可能になった。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るに至っている。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、共同研究を推進できたことは大きな成果である。実際、米澤(A01、ナノクラスター)-藤野(A02、凝集相超高速・顕微分光)、須藤(A03、生物物理)-神取(A03、生物物理)-酒井・藤井(A01、気相クラスター分光)、田原(A02、溶液超高速分光)-神取(A03、生体分子研究)など、従来では考えられなかった組み合わせによる連携研究が成果を挙げた。このような共同研究は、全体で実際に報告書の形になったものだけで50件を超え、さらにこれの2倍におよぶアイデアが提出され、一部は実際に共同研究が協議されている。

各公開シンポジウムには一部の国内評価委員の先生にも参加して頂き、研究の進展状況等について評価をお願いした。これらの内3回は、外国への発信も目的として海外評価委員を招待し国際学会として行った。外国人評価委員からは「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。

また、計画班、公募班を問わず研究分担者/連携者も含め本特定領域への参加者が一堂に介する合同班会議を年度ごとに開催し、口頭発表およびポスター発表で研究の進捗/成果発表を行った。この合同班会議は、合宿形式で開催することで、発表の聴講だけで終わらず、十分に交流の時間を確保し、互いの議論の時間を取ることを主たる目的することで研究の進展や共同研究の提案に大きな効果を発揮した。会議には、国内評価委員

の方々にも多くの参加をいただき、研究の進展状況・将来像について評価して頂いた。

このような会議については、上記のような全体で行なう大規模なものに加えて、テーマを限定したミニ公開シンポジウムの開催を奨励した。小規模で機動的に開催できる利点を生かして期間全体で計16回開催された。多くの若手が参加し、忌憚のない討論・意見交換が行われ、将来の高次系分子科学をどう発展させるかの議論も行われた。テーマを絞ることで高頻度に集中的な議論を行なうことが可能であり、評価委員からも高く評価された。班員間の共同研究だけでなく、国際共同研究の起点ともなった点は大きな成果であると考えられる。

本特定領域研究の活動・成果を積極的に情報発信する手段として、ニュースレターの発行およびウェブホームページを利用した。ニュースレターは5年間、毎月欠かさず発行を続け、延べ54号、総248ページを数えた。各号には各班員の最新発表論文の要約を掲載しグループ全体へ成果の発信を進めた。ウェブページは、領域内の各研究者間での情報交換の場としても活用した。世界に通用する新しい研究分野を創出する意気込みをアピールするために、ウェブホームページは英語でも運営し、海外への情報発信を行なっている。

これらの活動を通じて、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、若手研究者を含めた領域を超えた新たな分子科学を成功裏に創出し、生体系に止まらない高次機能過程の制御機構の理解を分子論に立地して行うための新たな道を切り開くことができたと言える。

#### 5. 主な発表論文等

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.res.titech.ac.jp/~kiso/koujikei.html>

#### 6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤井 正明 (FUJII MASA AKI)

東京工業大学・ソリューション研究機構・教授

研究者番号：60181319

(2)研究分担者

関谷 博 (SEKIYA HIROSHI)  
九州大学・理学研究院・教授  
研究者番号：90154658

田原 太平 (TAHARA TAHEI)  
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

水谷 泰久 (MIZUTANI YASUHISA)  
大阪大学・大学院理学研究科・教授  
研究者番号：60270469