


動的要素効果デザインによる未踏分子機能の探究

	研究代表者	名古屋大学・物質科学国際研究センター(WPI)・教授 山口 茂弘 (やまぐち しげひろ) 研究者番号：60260618
	研究課題情報	課題番号：22K21346 研究期間：2022年度～2028年度 キーワード：元素効果、触媒、機能マテリアル、バイオ機能

この国際共同研究の重要性・面白さは何か（研究の目的と意義）

●元素の個性を生かしたトータルデザインにより分子の機能を追求

この国際共同研究では、現代社会の持続的な発展への化学からの貢献を目的に、有用物質の高効率合成を実現する触媒の開発、材料科学や生命科学に革新をもたらす機能マテリアルの創製、さらには生体分子システムの機能制御を標的に掲げる。本研究の面白さ・強みは、元素の個性に着目した高度な分子デザインにある。元素の個性を決定づける種々の要素（元素効果）が、機能の発現が求められる環境やエネルギー状態において、どのように変化し、相互に関わりあって分子の機能につながるのかをトータルに理解することは、化学の本質的な課題である。本研究では、元素効果のダイナミックな変化と分子機能との関わりを深く理解し、その変化を統合的に考える「動的要素効果デザイン」をもとにした学際的融合研究により、触媒、機能マテリアル、バイオ機能の追求に挑む。

●三つの空間／エネルギー状態を対象に、新分子技術の創出に挑戦

鍵となる元素効果のダイナミックな変化の様相は、標的とする分子機能により異なる。触媒機能の追求では、遷移状態での反応活性空間が対象となる。その精密設計をもとに、高活性触媒の創出に挑む。特に光の活用に取り組み、光で駆動される革新的な有機触媒や光半導体触媒の開発により、カーボンニュートラルの達成へ貢献する。また、機能マテリアルの開発では、分子機能の中でも特に光機能に焦点をあてる。鍵となる励起状態空間での元素効果を最先端の量子化学計算により理解するとともに、合成化学を組み合わせたアプローチにより、秀逸な光機能分子を創出する。ここでの重点課題は、多様な元素を組み込んだヘテロ電子系の開発である。得られる分子を、有機発光デバイスや蛍光イメージングへ応用し、その有用性を実証する。さらに、従来材料では実現できない分子機能の獲得を目指し、特異なナノ空間の活用に取り組む。その対象として、金属-有機格子（MOF）や、タンパク質の疎水ポケットに着目し、新たな機能の付与や制御を目指す。

●学際的なアプローチによる分子デザインの学理構築

本研究は、前人未踏の物質変換や、細胞内現象の超高精度可視化、生体機能の人工制御等を可能にする点で先端性を有する。加えて、対象となる空間やエネルギー状態に個別的な、そして究極的には、それらを超えた「動的要素効果デザイン」の学理の確立を目指す。このアプローチの実現には、物質創製の土台となる合成化学と、深い理解を与える高精度量子化学計算に加え、新たな分子機能を生み出すために触媒、光化学、材料化学、タンパク工学、生物化学などの多分野の学際的な組み合わせが必要であり、これらの広範な領域をカバーした研究チームを組織した。本研究では、各々の分野で世界を牽引する研究グループが、若手研究者が介在する形で融合に取り組むことにより、この統合的な研究課題の達成に挑む。

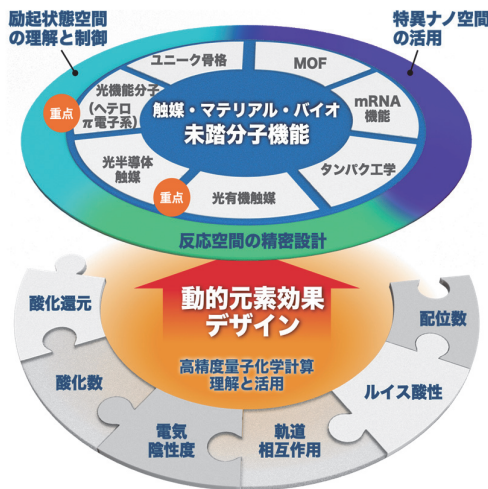


図1 分子特性を決定づける元素効果の動的変化の理解と活用（動的要素効果デザイン）による挑む触媒・マテリアル・バイオ未踏機能の創出

誰がこの国際共同研究を行うのか（優れたグループによる国際共同研究体制）

●歴史と実績に裏付けられ、かつ刷新された研究グループ

本国際共同研究では、名古屋大学の物質機能を基盤とする8研究グループと、ドイツ・ミュンスター大学、スペイン・カタロニア化学研究所（ICIQ）、ドイツ・フランクフルト大学の研究者を結集させ、総勢20グループからなる国際研究体制のもと、「動的要素効果デザイン」という統一的な視点から革新的な機能分子系の創出に挑む。この研究グループの強みは、確固たる連携の歴史に裏付けられている点である。名古屋大学物質科学国際研究センターとミュンスター大学有機化学研究所とは、これまで20年来の強力な連携の実績を築いてきた。ドイツ人学生受入総数70名をはじめとする双方向的な人材交流は、80報近い国際共著論文として結実してきた。この偉大な伝統を引き継ぎつつも、本研究で標的とする触媒・マテリアル・バイオ機能の学際的 pursuit に最適になるように、物質機能研究や理論研究で実績を持つ研究者や新進気鋭の若手女性研究者を加え、メンバーを従来から刷新した。この新陣容は相補性が高く、新骨格創製からその有用性の実証までを含めた融合研究を一気通貫に効果的に展開できる。加えて、光駆動触媒およびヘテロ電子系の創製で世界をリードするICIQの研究者とフランクフルト大の研究者が加わることで、これらの重点課題を強力に推進する体制を整えた。



図2 総勢20グループからなる国際共同研究体制

どのように将来を担う研究者を育成するのか（人材育成計画の内容）

●実践的な国際研究経験をもとにした人材育成

本研究には、常時6名の博士研究員・特任助教と、18名の博士学生が参加する。本経費で雇用する若手研究者は、3,4年の期間を前提に研究テーマを設定し、名古屋大学と相手国とを研究ステージに合わせて1年程度の単位で行き来しながら融合研究を進める。また、博士学生の人材育成では、3ヶ月程度の派遣を博士論文研究の進捗に合わせて実施する。単なる共同研究ではなく、若手研究者や博士学生が名古屋大学／海外機関の両方のグループに属する形で融合研究を進めることが、研究の加速においても、また人材育成の観点でも鍵になる。博士研究員・特任助教3名／年、博士学生6-8名／年の中長期派遣を行う。この研究の実践的推進以外に、以下の取組により、人材育成を支援する。

- 若手共創研究提案の募集：採択者には研究費を支援し、自立性を涵養。
- 日独バディ制度：毎年6名のミュンスター学生が6ヶ月ずつ滞在するという双方向性の交流体制が確立できている。それらの学生と名古屋大学生とがタッグを組んで研究に向かうバディ制度を実施。
- チュートリアルコースの開催：異分野の考え方や課題・手法を学ぶ。
- 海外PIとの1on1ディスカッション：ジョイントシンポジウム時に実施。主体性を育み、融合研究を常に考える機会を提供。

●国内の大学間連携事業とも相乗的に推進する

本国際共同研究は、2022年に名古屋大学に設立した「学際統合物質科学研究機構」の国際連携の中核事業として推進する。この組織は、名古屋大学と、北海道大学触媒科学研究所、京都大学化学研究所附属元素科学国際研究センター、九州大学先導物質化学研究所との連携を加速させることをミッションとしている。この事業と相乗的に進めることにより、研究の学際的展開を強化するとともに、若手人材のより複眼的な育成につなげられる。若手共創ワークショップ等への参加を通して、北海道大学、京都大学、九州大学を含めた4大学の若手研究者と交流・切磋琢磨する機会も提供する。