

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名:北川 宏

所属・職:京都大学大学院理学研究科・教授

区分:化学専門調査班 主任研究員

調査研究題目:「化学分野に関する学術研究動向及び学術振興方策」—物質化学分野における新たな潮流と展開—

キーワード:材料化学、錯体化学、ナノ物質化学

本研究担当者は、京都大学学術研究展開センター(KURA)の協力の下、多岐にわたる学術分野の動向分析を行って来た実績がある。また、現在、科学技術振興機構(JST)プログラムオフィサー(CREST「未踏物質探索」及び創発的研究支援事業「材料分野」)として、国内外の科学技術政策及び研究開発の動向等についての調査・分析等に関する定点観測業務を行っている。さらに、錯体化学会の会長の立場から、錯体化学の動向を常にウォッチしている。この実績を元に、特に、以下の点に着目して調査を行った。

- ・聴衆の反応が良いセッション(または講演)
- ・近年盛り上がった／重点化されたセッション
- ・上記を通じて得た研究動向(新興領域／上昇領域／最盛期の領域)

対象の国際会議は、大規模な年次総会(例:ACS National Meeting)や、各分野が2~3年に1回開催するようなものを対象とした。特に本課題申請者がこれまで継続的に参加してきた会議をベースに、新たに参加する会議も対象とした。ただし、「国際会議」という名称でも、対象トピックスが狭すぎる会議もあるため、参加・調査する国際会議は慎重に判断した。

重点的に対象とした分野は「材料化学」として、申請者がこれまで継続的に参加している「触媒化学」や「錯体化学」、「ナノ材料化学」も含めて、動向調査を行った。以下、概要を記す。

- 1) 客員教授を務めるミュンヘン工科大(TUM)をオンライン訪問し、材料化学分野の動向調査を行った。旧知の仲であるRoland Fischer教授は、ドイツ研究振興協会(DFG)の元副理事長も務めており、材料化学分野の学術動向について広く意見交換を行った。
- 2) 韓国の国立大学院大学のUNIST(国立蔚山科学技術大学)を訪問し、韓国における新興領域／上昇領域／最盛期の領域に分けて調査を行った。
- 3) アジア結晶学会(韓国済州島にて開催)に参加して、アジアの当該分野のトレンドを調査するとともに、基調講演を行った。
- 4) 第4回イオン結合性金属錯体の国際会議に参加し、ナノ物質化学分野、錯体化学分野での展開に注目して動向調査を行うと共に、新興領域であるプロセス・インフォマティクスに関する研究開発の動向調査を行った。
- 5) その他、国内外のワークショップにも参加し、更なる学術動向の把握に努めた。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名:野崎 京子

所属・職:東京大学大学院工学系研究科・教授

区分:化学専門調査班 主任研究員

調査研究題目:化学分野に関する学術研究動向及び学術振興方策—持続可能社会実現に向けた研究の潮流と展開

キーワード:持続可能社会実現、環境問題、国際交流、有機金属化学分野での新潮流

2021年4月にアメリカ芸術科学アカデミー国際名誉会員に選出されたことを受け、9月にボストンで開催されたアカデミー新会員交流会に参加し、米国における学術振興方策についての調査をおこなった。新会員歓迎レセプションでは、舞台上で弁護士 David M. Rubenstein 氏とチェロ奏者 Yo-Yo Ma 氏が繰り広げる会話を聴講した。何気ない世間話や各々の生い立ちなどの自己紹介から始まり、科学と芸術の深淵な思想まで、時にユーモアを交えつつ 30 分余りにわたって自然に話が展開していく様子が披露され、500 人を超える聴衆はその軽妙なテンポと会話の深さに魅了された。専門領域のとらわれず、学術と芸術の哲学が交わる姿は圧巻であり、学術振興会が目指す姿を垣間見たように思う。翌日はアカデミーを訪問し、社会的課題の解決や、初等、中等、高等教育のための取り組みについて学んだ。いずれも科学者や芸術家が、アカデミーの場を有効に活用し、分野横断型に協力して推進している。

英国ブリストル大学では多様な国籍をもつ学生の学びについて調査した。英語国であるため欧州各大学から多くの大学院生を受け入れており、留学生と受け入れ教員の双方を大学として支援するきめ細やかな体制が整っていることが、研究推進の大きな力になっている。国籍の多様性が確保されることで、常に多様性を意識した運営が可能になっている。

また、欧州で開催された3件の国際会議に出席し、化学の新潮流を調査した。有機金属化学分野では、典型元素化学と遷移金属化学の融合を目指す研究が多く報告された。一方、グリーンケミストリー分野では、地球温暖化問題を踏まえ、資源の有効利用を目指す化学についての様々なアプローチが展開されていた。廃プラスチック問題に焦点を当てた樹脂分解の研究が新たに始まっている。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名: 中井 浩巳

所属・職: 早稲田大学理工学術院・教授

区分: 化学専門調査班 主任研究員

調査研究題目: 化学分野に関する学術研究動向及び学術振興方策

キーワード: 量子化学計算、量子コンピュータ、機械学習

本報告書は、本研究担当者による国内学会・国際会議への参加、スクール・ワークショップの開催・参加、学会誌記事の閲覧等により、物理化学(主に理論・計算化学)分野における研究動向を調査した結果をまとめたものである。

理論化学は1990年代以降、スーパーコンピュータの目覚ましい進歩にも支えられ、計算化学という側面で大いに発展した。実際、計算化学に関する業績で1998年と2013年にノーベル化学賞が授与された。計算化学プログラムのブラックボックス化が進み、非専門家でも理論計算を容易に実行できるようになった。このような背景のもと、物理化学分野の国内学会においても、理論・計算化学のセッションとは別に、実験化学が主体のセッションでも多くの計算化学研究の成果が報告されるようになった。企業の研究開発においても、計算化学の導入が加速している。

2010年代以降、理論・計算化学の分野においても機械学習をはじめとする人工知能(AI)技術が活用されるようになった。マテリアルズ・インフォマティクス(MI)やプロセス・インフォマティクス(PI)に必要なハイスループット・シミュレーションも盛んに行われている。最近では、機械学習に基づくニューラルネットワーク型ポテンシャルを利用したソフトウェアの開発が世界的に注目されている。これらのソフトウェアは、本来、量子化学計算・第一原理計算により基礎方程式の解として得られる演繹的な結果を、多くの学習データから高速に見積ることができるという特徴がある。実用的な観点では機械学習・AI技術の貢献は大きいですが、演繹的な理論・計算化学が帰納的な機械学習・AI技術により代替されると、化学・物理・生物現象を律する原理・法則への関心が希薄になるという問題点も指摘されている。

2020年代に入って、理論・計算化学の分野においても量子コンピュータの活用が検討されるようになった。量子ビット数の限られた現状のNISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum device)においては、量子コンピュータと古典コンピュータをハイブリッドで用いる方式が主体であり、量子化学計算においてはVQE(Variational Quantum Eigensolver)アルゴリズムが注目されている。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名:長田 実

所属・職:東海国立大学機構名古屋大学未来材料・システム研究所・教授

区分:化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目:無機物質および無機材料化学分野に関する学術研究動向—無機ナノ物質およびその周辺分野における新たな潮流と展開—

キーワード:2次元ナノ物質、無機ナノシート、グラフェン、モアレ物質

本調査研究では、近年進展著しい無機系2次元ナノ物質およびその周辺分野における新たな潮流と展開についての調査を行った。

原子数個の厚みを有する2次元ナノ物質(ナノシート)は、グラフェンの報告以降、材料科学の重要なターゲットとして注目されており、精力的な研究が世界中で行われている。中でも、酸化物、水酸化物に代表される無機ナノシートは究極の2次元性と共に、グラフェンにはない組成、構造、機能の多様性を具備しており、グラフェンを凌駕する機能の開拓を目指そうとする「ポストグラフェン」研究の重要なターゲットとなっている。

無機ナノシートの多くは、層状化合物の機械的剥離あるいは化学的剥離により合成されており、酸化物、水酸化物、六方晶窒化ホウ素 (h-BN)、遷移金属カルコゲナイド、炭化チタン系、遷移金属カーバイドなどの報告がある。これらのナノシートでは、電子材料、二次電池、太陽電池など様々な応用展開が進んでおり、その応用に向け簡便・大量合成法、大面積結晶成長法などの進展が目覚ましい。また、ナノシートの新物質開拓の新しいアプローチとして、ボトムアップ手法によるナノシート合成の進展が目覚ましい。従来の剥離手法は、層状化合物の利用が前提にあり、多彩な機能を有し、応用上重要である非層状構造の合成には適用できず、得られる材料、機能のライブラリーは限定されていた。それに対して、ボトムアップ手法では、自在な組成、構造設計が可能であり、非層状の金属酸化物や金属ナノシートの合成も可能となる。これまでに合成されているナノシートとしては、貴金属(Au, Pd, Rhなど)、酸化物(TiO_2 , WO_3 , CeO_2 , In_2O_3 , SnO_2 , Fe_2O_3 など)、金属カルコゲナイド(PbS , CuS , CuSe , SnSe , ZnSe , ZnS , CdSe など)があり、パルスレーザー蒸着法、化学気相堆積法、気液界面合成法、界面活性剤やグラファイトの層間をテンプレートとする方法、オストワルト熟成によりナノ粒子の異方的成長を促進する方法などが利用されている。また、簡便かつ汎用性の高い手法として、非層状化合物の機械的剥離法、熔融析出法、液体金属法が開発され、単一元素だけでなく、多元系の層状、非層状化合物を含め 100 種類以上のナノシート合成が実現し、金属、半導体性、磁性、超伝導性、強誘電性などの機能が実証されている。さらに、ハイエントロピー原子膜などの新展開も見られており、様々な物質系への適用による今後の研究展開が期待される。

ナノシートは高キャリア移動度、低抵抗性、柔軟性、透明性、高耐熱等など、従来のバルク、薄膜とは異なる機能の発現が期待され、次世代の電子材料、環境・エネルギー材料への応用が期待されている。中でも注目されているのが、「モアレ物質」を利用した電子機能の設計、量子マテリアルへの応用である。モアレ物質の可能性は、ねじれ2層グラフェンにおける超伝導の発見以降、電子相制御、新材料開発の新しい手法として注目され、2次元物質分野の一大トピックスとして展開している。モアレ物質は遷移金属カルコゲナイドなどの無機系でも注目を集めており、遷移金属カルコゲナイドをベースとしたモアレ物質では、偏光・磁気秩序を電流制御、磁気相-超伝導相の転移、励起子物性の電場制御など、バレー自由度に起因した特異な物性を示し、量子デバイスへの応用が期待されている。

さらに、応用面での大きな流れが、次世代半導体への応用展開である。国際半導体技術ロードマップ (ITRS) で2次元物質の採用が記載され、次世代半導体応用に向けた研究開発が世界規模で活性化している。我が国でも、「新たな半導体デバイス構造に向けた低次元マテリアルの活用基盤技術」が戦略目標に選定されており、ナノシートの効率的作製技術の確立、界面制御の学理・技術の確立、新しいデバイス構造の開発など、分野横断的な多角的な研究展開が期待される。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名: 佃 達哉

所属・職: 東京大学大学院理学系研究科・教授

区分: 化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目: 物理化学、機能物性化学分野に関する学術研究動向-ナノ物質化学における新たな潮流と展開-

キーワード: 原子精度合成、ナノ物質化学、

ナノ物質化学という新たな潮流の調査を目的として、本年度は下記の活動・企画を行なった。

1. *Gordon Research Conference "Atomically Precise Nanochemistry"* を 2022 年 10 月に議長 (Cathleen Crudden 教授が共同議長) として開催した。この会合では、ナノ粒子合成・触媒化学・表面化学・炭素材料・先端計測技術・ナノバイオ応用・理論計算など多岐にわたる分野のトップ研究者が「原子精度でのナノ化学」を共通認識として議論する場を提供した。出席者からは、テーマの多様性、若手研究者の育成、異分野交流の促進という観点から好評を得た。
2. 国際会議やセミナーで講演を行うことで成果を発信し、国際的なトップレベルの研究者と情報交換や人的ネットワークを構築した。
3. 日本化学会第 103 春季年会、ナノ学会第 20 回大会、第 16 回分子科学討論会、第 131 回触媒討論会などの国内学会に参加し、情報収集および交換を行った。
4. 来日中の海外研究者を講師として招待し、セミナーを開催するとともに、共同研究の可能性について議論した。

上記の活動を通して、「原子精度のナノ化学」という新しい研究分野の潮流を感じた。例えば、多様な構造を持つ金属クラスターを原子精度で合成し、その物性・機能を評価することが可能である。これらの取り組みを通して、金属クラスターの構造と物性・機能の相関に関する理解が深まり、触媒・光学応用・イメージングなどさまざまな分野での応用に繋がりがつある。また、データ科学の手法を駆使した構造・物性の予測も目覚ましい発展を遂げている。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名:友岡 克彦

所属・職:九州大学先導物質化学研究所・教授

区分:化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目:有機合成化学関連分野に関する学術研究動向 ー新反応と新分子の開発と
応用の動向ー

キーワード:反応開発, 立体化学制御, 全合成, キラル分子

有機合成化学は有機分子を自在に創り出す学問・技術であり, 現代文明社会に不可欠である。本調査研究では, 有機合成化学の研究動向を明らかにするために, 関連する複数の学会に参加して調査を行った。有機合成化学関連で重要な第38回有機合成化学セミナー(2022年9月28日~30日, 北九州市)においては, 多様な反応の開発, 不斉合成を含む立体化学制御法の開発, 天然物の全合成など多岐に渡る課題に関して高水準の研究成果が多数報告された。また関連分野の学会として, The Cutting Edge of Organic Synthesis 2022(2022年6月18日, 京都市), 菅敏幸教授追悼記念シンポジウム(2022年7月16日, 静岡市), 日本化学会第103春季年会(2023)(2023年3月22日~25日, 野田市)などに参加し, それぞれ, 多様な有機合成化学, 不斉合成法, 構造有機化学, 種々のキラル分子に関する研究などに関する研究動向の知見を得た。また, 国内の複数の研究者を招聘して学術研究動向聴取を行い, 有機化学の研究傾向を調査した。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名:江原 正博

所属・職:自然科学研究機構分子科学研究所・教授

区分:化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目:基礎物理化学関連分野に関する学術研究動向ー複雑系の理論・計算科学の新たな潮流と展開ー

キーワード:理論・計算科学、複雑電子状態、機械学習、量子コンピューター

近年、基礎物理化学分野では、エネルギー分野やバイオ分野との境界領域の基礎研究が進展している。また、今年度からデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業が本格的に始動し、理論・計算科学分野においても機械学習や人工知能を導入した研究が展開している。さらに、ポスト「富岳」時代の次世代計算基盤の調査研究も進められており、計算物質科学分野の方法論やソフトの検討が益々重要となっている。このような背景があり、令和4年度は、複雑電子状態の理論・計算分子科学および機械学習や量子コンピューターを中心とした研究動向調査を実施した。

自然科学研究機構 計算科学研究センターでは、「複雑電子状態の理論・計算科学」をテーマとしたワークショップを開催した。大規模系の計算手法が進展しており、人工光合成の半導体表面や有機半導体界面の光物性に関する研究が報告された。また、新型コロナウイルス蛋白質と薬剤分子との結合解析や、電子状態を考慮した凝縮相のダイナミクスの計算が報告された。GPU 等のアクセラレータに対応した国内のソフトの開発も徐々に進展しつつある。また、計算科学研究センターでは、量子化学スクールと分子シミュレーションスクールを関連学会と連携して毎年開催している。最近では、各スクール 400 名程度の参加登録があり、理論・計算科学分野が発展している。令和4年度は、量子化学スクールでは、トピックスとして機械学習と量子コンピューターの講義も含めた。量子コンピューター分野では、量子アニーリング(イジング方式)や量子ゲートを利用した方法が、ともに急速に進展している。国内初の量子コンピューター実機(64量子ビット)も実装された。国内外の多くの学会において、これらの方法を導入した研究が増加しており、国内の多くの企業が量子コンピューターの開発を進めている。今後、データ科学や量子コンピューターの技術は、物質科学や生物科学などの広い分野の研究に応用され、関連したシミュレーション技術が進展することが期待される。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名: 藤本 ゆかり

所属・職: 慶應義塾大学理工学部・教授

区分: 化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目: 生物分子化学分野に関する学術研究動向ー生体複合分子化学の新潮流ー

キーワード: 生物分子化学、複合糖鎖科学、ケミカルバイオロジー

本調査研究では、生物分子化学分野に関する学術研究動向ー生体複合分子化学の新潮流ーについて、特に、生物分子化学関連分野の中でも、糖質を中心にタンパク質・ペプチド、脂質などの生体分子についての有機化学およびその生体関連機能に関わる生物分子化学あるいはケミカルバイオロジー分野についての調査研究を行った。

糖鎖やタンパク質などの種々の生体分子については、有機化学手法の発展とともにケミカルバイオロジー分野の手法開発、生物機能解析、創薬手法への展開が進んでいる。新型コロナウイルス感染症（COVID-19）関連研究についても、生物分子化学分野から多くの貢献があり、感染に関わる分子に関連した解析、感染抑制のための手法、新規ウイルス薬、抗ウイルスワクチンを志向した新規モダリティなど多くの研究が行われた。

また、人工知能(AI)を用いたタンパク質構造予測や有機合成ルート探索等の技術が発展し、研究ツールとして一般の研究者が比較的容易に使用出来る環境が整いつつあり、既に多くの研究で使用されている。今後、関連科学分野に大きな影響を与えられよう。

国内の大型研究プロジェクトとしては、文部科学省における基本構想ロードマップに基づいた「ヒューマングライコムプロジェクト」が本格始動し、国家プロジェクトとしてヒトの網羅的糖鎖情報解析が進む予定である。また、JST・AMED でも糖鎖-タンパク質の細胞での基礎的機能に関わる分野のプロジェクトが進んでおり、今後、日本の科学分野の強みとして関連分野のさらなる発展が期待されている。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名:三浦 佳子

所属・職:九州大学大学院工学研究院・教授

区分:化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目:カーボンニュートラルに寄与する材料化学分野に関する学術研究動向

キーワード:カーボンニュートラル、二酸化炭素、バイオポリマー、グリーンケミストリー

カーボンニュートラルに寄与するための科学技術は現在の科学の潮流であり、材料化学分野も強くその流れを受けている。以下が代表的な研究動向である。

(1) 二酸化炭素に関する研究:CO₂ 分離膜の開発には、アミン水溶液や塩基性水溶液を用いたプラントが試験運転されている一方で、エネルギー効率の悪さが問題視されている。CO₂ 分離材料として、微細孔をもつ高分子膜やゲル膜が開発されており、分圧差のみを駆動力としてCO₂ 分離を成し遂げられるため、エネルギー的な優位性がある。CO₂ 分離膜では、CO₂ に対する選択性・透過性が高く、経時的な安定性や耐久性に優れた材料の開発が求められている。二酸化炭素を利用して作られる高分子や有用材料も注目されており、二酸化炭素を原料として、ポリカーボネートやポリウレタンなどの材料合成が報告されている。

(2) 生物学的手法を利用した化学品:カーボンニュートラル達成のための環境に優しい化学手法として、バイオテクノロジーを化学へと活用することも検討されている。例えば、高分子合成として、微生物や植物などの生物に高分子を生成させることが検討されている。ポリヒドロキシアルカン酸(PHA)などの生分解性のある高分子の合成が注目されている。また、天然の高分子物質である、セルロースをナノ化することで成型加工性を高めた新しいセルロース材料の活用も積極的に検討されている。研究レベルでは、ペプチド、DNA といった生体高分子の材料やナノテクノロジーへの展開も検討されている。

(3) 省エネルギーな化学プロセスの検討:従来の化学プロセスの低炭素化、低エネルギー化も進められている。グリーンな原料、溶媒などの諸条件の検討、効率的な触媒の検討など、これまでの化成品についても低炭素化が図られている。また、プロセスとして、伝熱効率や反応制御に優れたフロー反応も積極的に検討されている。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名: 瀧宮 和男

所属・職: 東北大学大学院理学研究科・教授

区分: 化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目: 有機機能材料化学分野に関する学術研究動向 ―有機エネルギーデバイスに関する新潮流―

キーワード: 有機半導体、エネルギーデバイス、分子集合体、

有機材料を用いたエネルギーデバイスの主流である有機薄膜太陽電池を中心に、近年注目され始めている有機熱電変換の調査も併せて実施した。これらのデバイスに利用される材料は、一般的に有機半導体と称され、異なる性質をもつ有機半導体を混合、薄膜化、多層化、そして金属材料などと組み合わせることでデバイスとして用いられる。従って、高性能化のためには新規材料開発とデバイス作製の最適化が必要とされる。また最適な材料を組み合わせるためには、材料特性(固体構造、エネルギーレベルなど)が問題となる。更にデバイス特性と個々の材料物性との相関の理解も研究における重要な観点である。以上のような研究分野の特性に鑑み、新規材料開発に加え、物性の精密評価、固体構造、デバイス作製プロセス、新規デバイス構造、といった異なる観点から調査研究を行った。

有機薄膜太陽電池研究においては、p型とn型半導体材料の組み合わせが特性発現の鍵となり、それぞれの材料のフロンティア軌道のエネルギーレベルを精密に見積もることが重要となる。多数の材料を系統的かつ網羅的に種々の方法により評価し、実デバイスにおける特性と相関により光電子分光法が有効であることが明らかにされ、今後の材料物性評価に指針が与えられた。また、デバイス作製プロセスに結晶化補助剂的に揮発性の第三成分を用いることで、既存材料の潜在的な性能を発揮させ得ることなど、重要な報告がみられた。これらの知見の統合により光電変換効率は20%近くまで向上している。一方、熱電変換デバイスでは、ホストとなるn型半導体高分子とn型ドーパ材料のいずれにおいても改善が見られるなどn型材料の開発に大きく進展した。また、従来、材料のパワーファクターが評価指標となっていたのに対し、プラスチック基板を用いた波型の擬似 π 型素子により薄膜デバイスが試作され、その出力が評価できるようになるなど、重要な進展がみられた。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名:大神田 淳子

所属・職:信州大学学術研究院(農学系)・教授

区分:化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目:ケミカルバイオロジー関連、薬系化学および創薬科学関連分野に関する学術
研究動向 ―細胞応答を司る動的な生体分子間相互作用と創薬の新たな潮流―

キーワード:創薬ケミカルバイオロジー、天然変性たんぱく質、翻訳後修飾、相分離、ストレス
応答

ケミカルバイオロジーは現代医療の発展に欠かせない学問分野である。2022年はノーベル化学賞の授賞によりその重要性が社会的に強く認識された年でもあった。本調査研究では、国内外のケミカルバイオロジーと薬系化学および創薬科学関連分野に関する研究動向に関する知見を得るために、関連する学会と専門雑誌の分析により調査を行った。日本ケミカルバイオロジー学会第16回年会(2022年5月30日～6月1日、富山)では、生理活性物質の探索・合成と創薬、作用機構と標的分子同定、プローブ設計、イメージングならびに相互作用解析技術、等に関して口頭発表45件、ポスター発表58件があり、脂質や金属イオン代謝、分子間相互作用の網羅的解析技術に関して活発な議論がなされていた。また、第64回天然物有機化合物討論会(2022年9月7日～9日、静岡)では、口頭発表43件、ポスター発表56件が行われ、新規生理活性天然物の単離・構造決定、生理活性物質の作用機序解析、生合成経路の解明等のケミカルバイオロジーに関連したトピックスが増えている傾向が認められた。海外では、11th Annual Conference of the International Chemical Biology Society(2022年12月4日～7日、Brisbane, Australia)において創薬ケミカルバイオロジー研究にフォーカスした研究発表が行われ、エピジェネシス制御、脂質代謝、薬剤排出ポンプの機能解析と新しい抗菌剤開発などのトピックスについて活発な議論がなされていた。国内と比較して、バイオロジーの解明に踏み込んだ研究がやや多い傾向が認められた。論文調査では、細胞応答を担う動的な生体機能の理解に向けて天然変性たんぱく質の翻訳後修飾と相分離に関する論文の増加傾向にあり、関連分野の研究が活発化している傾向が伺えた。例えば、最近のNature 姉妹誌では相分離の特集号が発刊され、相分離に関する多くの新しい研究手法が紹介された。また、2023年のBreakthrough Prizes in Life Sciencesは相分離研究の先駆的研究者に贈られることが発表されている。この分野の重要性が国際的に認知され研究が益々加速すると予想される。

令和4(2022)年度調査研究実績報告書

研究担当者名: 林 高史

所属・職: 大阪大学大学院工学研究科・教授

区分: 化学専門調査班 専門研究員

調査研究題目: 無機・錯体化学関連および生体関連化学分野に関する学術研究動向—応用生物無機化学の学際領域における国内外の展望—

キーワード: 生物無機化学、金属タンパク質、ヘム、人工金属酵素

化学の中でも特に化学とバイオの学際領域における最近の発展はめざましく、国内外の動向は目が離せない。本専門研究員は、有機化学、物理化学、高分子化学、分析化学、無機化学のそれぞれの立場から、化学のツールを用いて、どのようにバイオの領域に参入できるのか、その点に特に焦点をあてて、国内外の研究動向を調査した。具体的には、上記の学際領域の中でも、特に応用生物無機化学の新分野である生体分子と金属錯体・金属イオンとの複合化による新しい触媒(人工金属酵素)の創製について着目した。

近年、生体内で見られない化学反応を、人工の金属錯体とタンパク質の組み合わせによる複合体を生体触媒とする新しい人工金属酵素を用いて達成する試みが欧米で盛んに始まっている。いわゆるこの応用生物無機化学の一領域は、我が国では非常に研究者が少なく、今後の欧米との競争や共同研究が重要になると考えている。そこで、当該年度は、この領域の発表や研究討議が多く含まれる以下の国内外の国際会議に参加して、動向調査を行った。

7月にマドリッドで開催されたポルフィリン・フタロシアニン国際会議(ICPP12)では、ヘムタンパク質のセッションを主催し、ヘムタンパク質の改変の研究者を集め、久しぶりの対面での研究討議を行った。また8月末にイタリアリミニで開催された錯体化学国際会議(ICCC44)では、人工金属酵素の講演を行い、有意義な議論を実施した。さらに12月に神戸で開催されたアジア生物無機化学国際会議(AsBIC10)では、タンパク質工学の立場からの生体触媒の開発のセッションを主催し、当該分野の演者を招へいし、海外の第一線の成果や今後の課題の認識に努めた。

以上の活動を通じ、当該領域が特に欧米で大きく進んでいることを感じた。特に、生体反応では見られない炭素—炭素結合の生成や高難度物質変換反応を、金属錯体とタンパク質反応場を介して巧みに達成する例が多く見られた。この領域では、金属錯体の適した設計と共に、タンパク質反応場の改変や指向性進化手法を駆使することにより、有機合成と錯体化学、そしてタンパク質工学の共同研究を通じて、さらなる活性の高い人工金属酵素が次々に報告されるものと予想される。