

るように思いますが、実験に関わるような技術や手法という観点ではまだまだこれからのような気がします。装置のリユース化や拠点型の共通利用化の考え方が進んで、分子研のような先端研究所を中心に、研究者の育てた新し

い発想をもとにした新しい実験手法や測定技術をいかに共有できるかたちで社会還元していくかということが出来てくればと思います。技術者レベルでの人的なネットワークづくりが進んでいくことは確実にこのようなことの後

押しになると考えます。是非、そうした活動の中心に分子研の装置開発室が関わって頂けると有り難く思います。

関連学協会等との連携

新学術領域研究「発動分子科学」について

金原 数 東京工業大学生命理工学院 教授

ナノスケールで機械のように動く分子すなわち「分子機械」は、1960年代にFeynmanがその概念を提唱して以来、ナノテクノロジーの究極の目標とされてきました。2016年のノーベル化学賞では「分子機械の設計と合成」に関する先駆的研究が受賞対象となりましたが、半世紀を経てようやく合成分子に機械的な動きを起こさせる手法が確立した、と言えます。しかしながら、分子機械が実際に何の役に立つのか、ということはFeynman自身も示しておらず、これまで開発された人工分子機械も、「動く」というコンセプトの実現に焦点が当てられておりました。一方、分子生物学や生物物理学の発展に伴い、我々の体の中には機械的な動きを起こす「生体分子機械」と呼ばれるタンパク質が多数存在し、生命活動の多くがこれらの分子の機械的な動きにより支えられていることが明らかになってきました。これらは主にATPというエネルギー物質の加水分解反応を利用して分子の機械的な動きを誘起し、それを利用して別の形のエネルギーに変換する動きを担っています。すなわ

ち、「分子の機械的な動き」により「エネルギー変換」という機能を実現していると言えます。さらに、生体系ではATP等の加水分解エネルギーを非常に高効率で他のエネルギーに変換していることが分かっています。本新学術領域「発動分子科学」(2018~2022年度)では、人工分子機械と生体分子機械を概念的に融合し、エネルギー変換素子として「発動分子(molecular engine)」という新しい共通概念を提案し、これを構築するための学理を創出することを目指しています。この目的のため、これまで異分野として独自に活動してきた合成化学、分子生物学、生物物理学、ソフトマター物理学、計測科学等の専門家を集めてスタート致しました。分子研からは計画研究に飯野亮太教授、古賀信康准教授、小杉貴洋助教、中村彰彦助教の各先生方に加わっていただいております。領域発足直後の昨年8月31日~9月2日の3日間にわたり、キックオフミーティングという位置づけも兼ねて、飯野教授と小職を世話人として第79回岡崎コンファレンス「Synthetic, Biological,

and Hybrid Molecular Engines」を開催させていただきました。9名のKeynote Speakerと23名のInvited Speakerにご講演いただきましたが、専門分野の異なる研究者の間で発動分子に関する活発なディスカッションがなされ、非常に内容の濃い充実した会議となりました。冒頭のご挨拶では川合所長からは暖かい励ましのお言葉もいただき、大変感謝申し上げます。

本領域では、「発動分子科学」の概念を確立するために、比較的単純な構造の小分子、タンパク質のような高次構造形成可能な高分子、これらを集積化した分子集合体、というスケールの異なるそれぞれの階層において、機械的な動きを介したエネルギー変換、すなわち「発動」を実現するための論理の構築を目指しています。この目的のため、A01:エネルギー変換分子素子の合理的設計、B01:エネルギー変換機能を有する分子集団運動の設計、C01:発動分子の精密分析、C02:発動分子の理論解析の4つの研究項目を設定しました。A01は合成化学によるボトムアップ構築、遺伝子工学的手法による

異種分子間の部品交換やキメラ化、進化分子工学、計算科学による合理設計などにより、多様なエネルギー源を別のエネルギー形態に変換する分子素子の構築を目指しています。B01においては結晶、液晶、高分子フィルムなどによる、人工分子、生体分子、ハイブリッド分子の集積化及び集団運動を利用したエネルギー変換を目指しています。C01では高速AFM、光学顕微鏡1分子計測、X線結晶構造解析、物理化学解析による発動分子の精密解析か

ら、分子素子や分子の集団運動によるエネルギー変換機構の理解及び細胞外での応用を容易にする耐熱化予測技術などの開発を行なっています。C02は計算科学や物理学的手法により、分子素子及び分子の集団運動におけるエネルギー変換メカニズムを解明し、発動分子のde novo設計への道筋を開くことを目指しています。

領域の活動としては、化学、生物、物理等の異分野の研究者による連携研究を支援するための「発動分子ハブ」

を設置しました。また、国際シンポジウムやレクチャーツアーなどの国際連携活動や若手支援も積極的に推進しております。また、本領域の特徴的な取り組みとして、産官学の研究者が参加する「産官学連携イノベーションスクール」を開催し、企業研究者と膝をつき合わせた意見交換を積極的に行っております。本年4月からは公募研究も加わり、総数50名のグループとして研究を進めております。皆様のご支援をどうぞよろしくお願い申し上げます。



第二回領域会議の参加者（最前列右から4番目が筆者）

関連学協会等との連携

新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」について

折茂 慎一 東北大学材料科学高等研究所 副所長 教授

水素は、「もっとも変幻自在な元素」といえます。1千万倍以上の極めて広い濃度範囲で材料中に存在し、周囲の環境に応じて、原子状態 H^0 、共有結合性 H^{COV} 、イオン性（しかもプロトン H^+ とヒドリド H^- の両極性）、そしてそれらの中間状態にもなり、さらには各状態で水素自体の大きさも劇的に変化します（図1中央）。

2018（平成30）年度に設置された私たちの新学術領域“ハイドロジェノミクス：高次水素機能による革新的材料・デバイス・反応プロセスの創成”は、そのような変幻自在な水素がもつさまざまな物性・機能性の研究を進めることで、水素を高度に“使いこなす”ための新たな指導原理、すなわちハイドロジェノミクス(hydrogen-omics(学

術体系))の構築を目指します。これは世界でも類を見ない初めての挑戦です。

“ハイドロジェノミクス”は、A01～A05の5つの多彩な計画研究で構成されています（図1）。

A01「高密度水素による超機能材料の合成（代表 東北大学 折茂）」では、水素をできるだけたくさん材料中に詰めることで、画期的な機能をもつ材料

を創成します。たとえば、合成プロセスの高度化により、遷移金属の周囲に9つもの水素を結合させることも可能となるので、高速でのイオン伝導性や高い温度での超伝導、そしてもちろん高密度での水素貯蔵などの機能発現が期待されます。

A02「局在水素によるヘテロ界面機能の強化（代表 東京工業大学 一杉太郎教授）」とは、水素を材料界面にしっかり留めることで電子的機能や力学特性を強化する研究で、太陽電池や鉄鋼材料の研究者との連携も進めます。

A03「高速移動水素による次世代創蓄電デバイスの設計（代表 山梨大学 宮武健治教授）」と「高速・局所移動水素と電子とのカップリングによる新発想デバイスの設計（代表 東京大学 森初果教授）」では、水素をすばやく動かすことや電子と強くカップリングさせることで、次世代燃料電池やヒドリドを駆使した新たなデバイスを開発します。

この計画研究A03の研究分担者として分子科学研究所の小林玄器准教授が、無機物質中のヒドリドH⁻の振る舞いを研究しています。特定の無機物質中では、水素がヒドリドのまま移動することができるため、適切な電極と電解質の組み合わせを見つけることで、水素ガスをヒドリドに変換し、反応場となる電極表面に供給することが可能になります。電極表面では、ヒドリドが電子と乖離してプロトンまたは分子中の水素となることが予想され、このデバイス反応では様々な化学反応が促進できると期待できます。

A04「高活性水素の精密制御による新規反応プロセスの創出（代表 九州大学 山内美穂教授）」とは、水素の高活性化によりいろいろな物質に変わる効



第3回領域会議の参加者（2019年5月17日-18日 東工大にて、最前列右から5番目が筆者）

果を高めることで、医薬品や燃料などの有用物質をつくるための新たな反応プロセスを創出する研究です。

そして、A05「水素の先端計測による水素機能の高精度解析（代表 東京大学 福谷克之教授）」と「水素の先端計測による水素機能の高精度予測（代表 東京大学 常行真司教授）」では、材料中の水素をくわしく計測・計算することで、革新的材料・デバイス・反応プロセスの創成の効率化を目指します。特に、先端計測によって得られたデータを「データ同化」と呼ばれる手法を用いてシミュレーションに適用、材料中の水素の解析・予測精度を高めます。

新学術領域研究としての重要な観点は、これらの5つの計画研究の有機的な連携を積極的に進めることにより、

材料中の水素が示すさまざまな機能の相乗効果（高次水素機能）を誘起することです。これこそが、水素を“使いこなす”ことに繋がります。ほとんどすべての材料中に存在する元素である水素を高度に“使いこなす”ことができれば、身近な環境や安全安心、さらには有用物質合成プロセスや地球規模でのエネルギー問題などに対して、極めて大きな貢献ができます。

私たちは、水素を“使いこなす”ための指導原理となる新たな水素科学“ハイドロジェノミクス”の構築を目指して、新学術領域内外の多くの研究者と連携して、5年間真剣に水素の研究に取り組みます。今後ともご指導とご支援を賜りますよう、どうぞよろしくお願い申し上げます。

A05-2 水素の先端計算による水素機能の高精度予測
 代表 常行 真司 (東大)
 分担 濱田 幾太郎 (阪大)
 分担 志賀 基之 (原子力機構)
 分担 杉野 修 (東大)
 協力 有田 亮太郎 (東大)

A05-1 水素の先端計測による水素機能の高精度解析
 代表 福谷 克之 (東大)
 分担 大友 李哉 (高エネルギー機構)
 分担 明田 晃彦 (産研機構)
 分担 幾原 雄一 (東大)
 分担 下村 浩一郎 (高エネルギー機構)

A02 局在水素によるヘテロ界面機能の強化
 代表 一杉 太郎 (東工大)
 分担 宇佐美 徳隆 (名大)
 分担 秋山 英二 (東北大)
 分担 長田 実 (名大)
 協力 北野 政明 (東工大)

A04 高活性水素の精密制御による新規反応プロセスの創出
 代表 山内 美穂 (九大)
 分担 吉信 淳 (東大)
 分担 張 浩徽 (中央大)
 分担 島 隆則 (理研)
 分担 藤田 健一 (京大)
 分担 永岡 勝俊 (名大)

A01 高密度水素による超機能材料の合成
 代表 折茂 慎一 (東北大)
 分担 山室 修 (東大)
 分担 齋藤 寛之 (産研機構)
 分担 清水 克哉 (阪大)
 分担 亀川 厚則 (東工大)
 分担 中村 優美子 (産総研)

A03-2 高速・局所移動水素と電子とのカップリングによる新発想デバイスの設計
 代表 森 初果 (東大)
 分担 小林 玄器 (分子研)
 分担 樋口 芳樹 (兵庫県)
 分担 西村 睦 (物材機構)

A03-1 高速移動水素による次世代創蓄電デバイスの設計
 代表 宮武 健治 (山梨大)
 分担 福井 賢一 (阪大)
 分担 小柳 研一 (早大)
 分担 湯川 宏 (名大)

図1 新学術領域研究“ハイドロジェノミクス”の計画研究。2019（令和元）年度には19件の公募研究が決定、水素科学分野での新たな有機的連携の展開されている。中央は、「もっとも変幻自在な元素」の特徴を示すモデル図。