

1. 研究実施計画

課 題 名：計算化学的手法を活用した精密機能材料の創製技術の開発
研究機関名：独立行政法人 産業技術総合研究所
任期付研究員氏名：松村 一成

研究の意義・目的・必要性

生体系に見られるように構成要素分子が3次元的に規則性をもって配向・配列した分子集合体を創製すること、並びにそのような分子集合体の機能とその構造との関係を明らかにすることは、生体内に見られるような高度な効率と選択性を有する機能素子を人工的に実現する上で不可欠な要素技術である。さらにこれらの要素技術の確立は、高度な効率と選択性を有する様々な機能性材料を創製することに繋がる。すなわち、構成要素である分子の3次元的な配列を制御することによって精密機能材料の高度化が可能となるが、精密機能材料の創製全般に関わる総括的な要素技術の確立には未だ至っていない。

本研究では、精密機能材料の創製のための要素技術を確立することを目指す。計算化学的手法によって、分子内および分子間相互作用を評価、分子集合体における構成分子の3次元配向・配列を予測・設計するための手法を確立し、分子集合体の機能とその構成要素の配列構造の相関を予測する。そして、これら計算化学的手法を用いる予測・設計技術の開発と実験的検証研究を連携して行うことにより、高次構造、並びに機能の予測・設計技術の確立を目指す。

機能の発現が、構成要素である分子及びその集合体の構成要素分子の配列が精緻に制御されていることに根ざす機能性材料（精密機能材料）の創製は、21世紀に向けて各種技術分野における基礎技術として、ますますその重要性を増している。

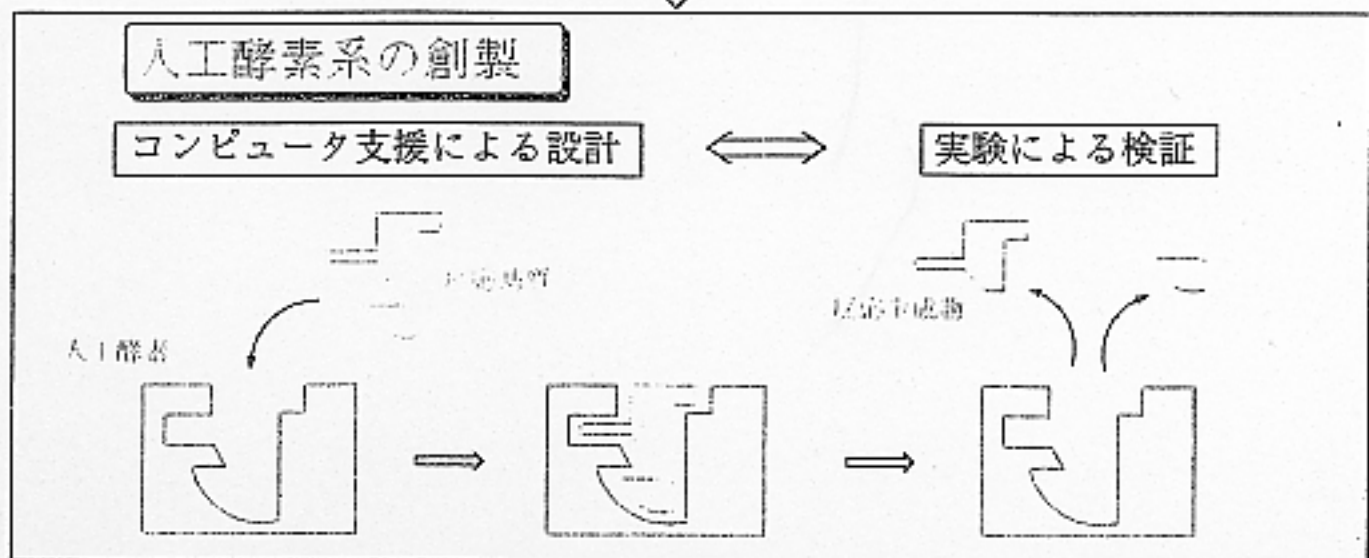
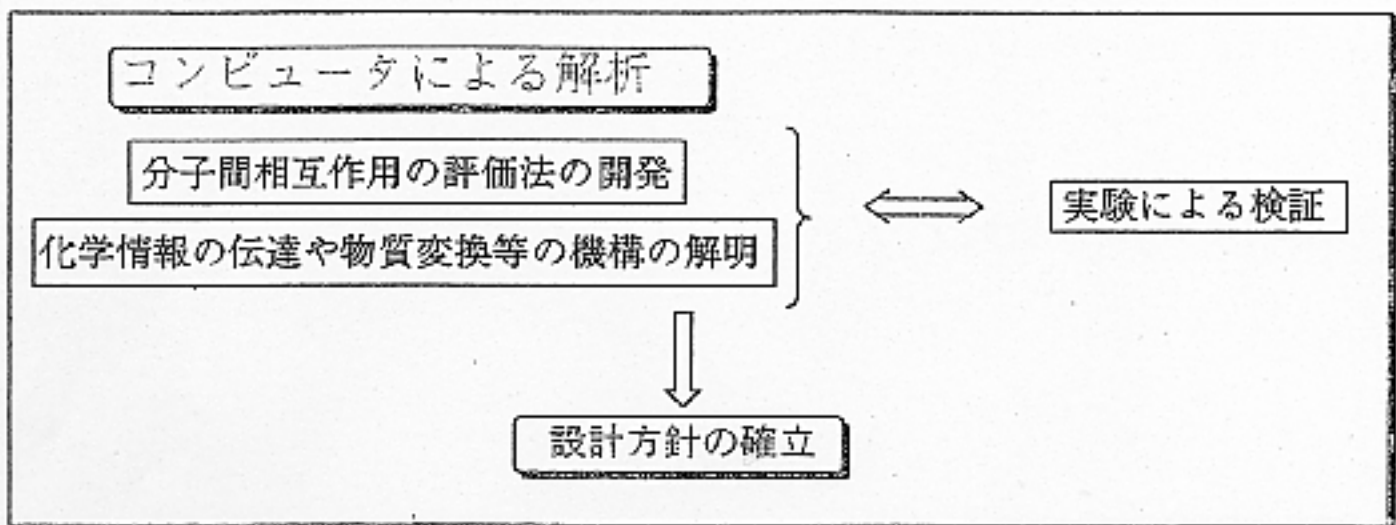
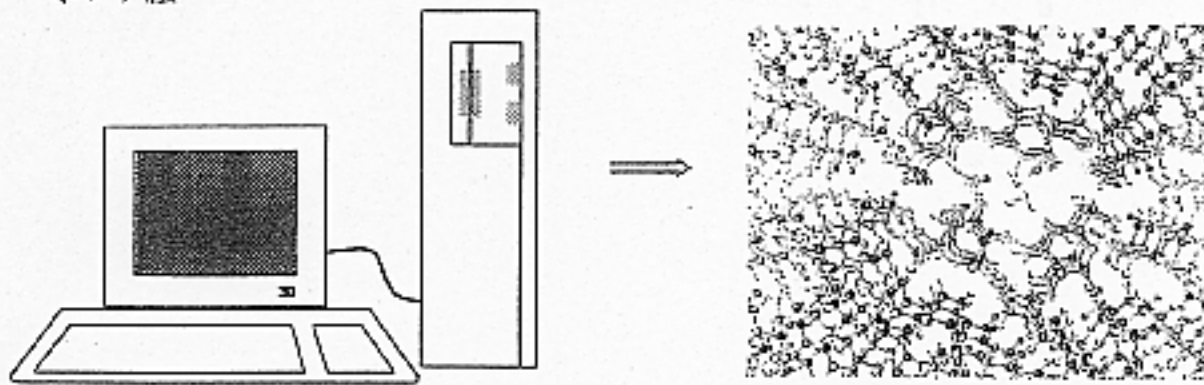
研究の概要

精密機能材料の創製に向けて、必要とされる要素技術について研究開発を行う。分子間に働く相互作用を検討し、分子集合体における分子の3次元的な配列構造を予測すること、また生体系で見られる分子内、分子間もしくは分子集合体間における化学情報の伝達や物質の変換等の機構を明らかにすることを、計算化学的手法によって行う。これらによって得られた知見を組み合わせることで、人工酵素系あるいは人工的な化学情報の伝達系を設計し、その構造と機能を実験的に検証する。

研究目標

計算化学的手法により、分子集合体における分子の3次元的な配列構造、あるいは新たな分子集合体が示す機能と分子の配列構造の相関を検討する。この予測・設計技術を新たな人工酵素系の創製に応用し、実験的な検証を行うことにより、新規材料創製のための計算化学的手法の確立を目指す。

ボンチ絵



精密機能材料創製に関する要素技術の確立

2. 研究成果の概要

①研究成果

生体系で見られる重要な分子間相互作用、例えば水素結合やスタッキング効果についてモデル化合物を選び、高精度の分子軌道計算によって、その相互作用について解析を行った。様々な分子軌道計算手法それぞれについて、分子間相互作用に関する計算値と実測値を比較する、あるいは計算値相互の比較を行うことによって、水素結合やスタッキング効果の大きさを的確に見積もるための分子軌道計算手法を確立した。また、その手法に基づいて、実測値の報告例がない系における水素結合やスタッキング効果の大きさを見積もった。これは、計算化学分野の研究としても価値の高い研究成果であるばかりでなく、実験系研究者にとっても貴重な示唆を与える結果であると考えられる。

また、核酸合成・切断の鍵ステップであるリン酸ジエステルの加水分解反応の機構に関して計算化学的手法を用いて解析を行い、その反応経路を明らかにし、反応中間体の構造や安定性を見積もった。この解析結果を含めてリン酸ジエステルおよびその反応に関する計算化学的解析結果は、本研究で人工酵素系の基本設計を考える際の重要な基礎を与えるものとなった。

これらの結果に基づき、リン酸ジエステルの生成・切断反応に対して触媒能を有する人工酵素系の基本設計を行った。さらに、計算化学的手法による触媒系の分子構造予測と、実際に合成した化合物に関する機器分析結果を相互に比較することによって基本設計を具体化し、その構築に向けて種々検討を行った。構築された酵素モデルについて、その触媒活性を実験的に詳細に調べたところ、ほぼ予期した触媒活性を示すことが確かめられた。これは、これまでに報告された人工系のリン酸ジエステルの加水分解酵素と比較しても、最も触媒活性が高いものの一つに入る。さらに、本研究で合成した触媒系は、キラル認識能を有する点で初めての例である。これらの点で本研究において構築した人工触媒系は興味深い。

以上の研究成果は、「生体機能関連シンポジウム」等の国内の学会他、米国化学会において口頭で発表するとともに、米国化学会や米国物理学会等が発行する一流国際学術雑誌に掲載された。

②波及効果、発展方向、改善点等

本研究では、計算化学的手法を活用しながら人工酵素系を設計し、その触媒能を実験的に検証するという、研究の目標を達成することができた。構築した人工触媒系の触媒能は、基本設計からほぼ予想される通りに制御できることが示された。こ

の過程で培われた計算化学的手法に関する知見や、合成した個々の触媒モデルに関する知見は、精密機能材料の創製という方向でも生かすことができるものと思われる。その点で、本研究の成果には、今後の発展が期待される部分が少なくない。

また一方、本研究では、計算化学的手法を用いた解析的な研究と実験的な手法による実証研究の間の連携が必ずしも充分とは言えない部分が残った。今後、両者がより緊密に連携していくための手だてを考えていくべきである。