

【学術変革領域研究（A）】

重水素学 2.0：情報・理論・実験の融合で挑む重水素学の確立



研究代表者	京都大学・薬学研究科・准教授 中 寛史（なか ひろし）	研究者番号：70431517
研究課題 情報	課題番号：26A403 キーワード：重水素、重水素化物質、重医薬品、同位体効果	研究期間：2026年度～2030年度

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

重水素（deuterium, ^2H , D）は軽水素（ ^1H ）の安定同位体の一つであり、トリチウム（ ^3H ）とは異なって放射性を持たない。自然界の水にもわずかに含まれる身近な存在である。多くの場合、重水素は軽水素と類似した性質を示すが、軽水素と比べて物性を大きく変化させることがある。こうした顕著な物性変化に着目し、近年では、重水素導入によって安全性や安定性を高めた医薬品（重医薬品）や、発光効率・耐久性を向上させた有機EL材料（重OLED）が実用化され、重水素化物質の設計と応用は国際的に活発化している。多くの物質に水素が含まれることから、水素を重水素へ合理的に置換する分子設計「デュー・スイッチ」により、従来の限界を超える物質と材料の高度化が期待される。こうした観点から、同位体は「構造」や「元素」に続く、物質設計の新たな指針として注目されている。

そこで本研究領域では、学術変革領域研究（B）「重水素学」での活動を起点として情報科学・理論科学・実験科学を融合して重水素の特性を理解し、応用技術を体系化することで、新たな研究領域「重水素学」を確立することを目的とする（図1）。

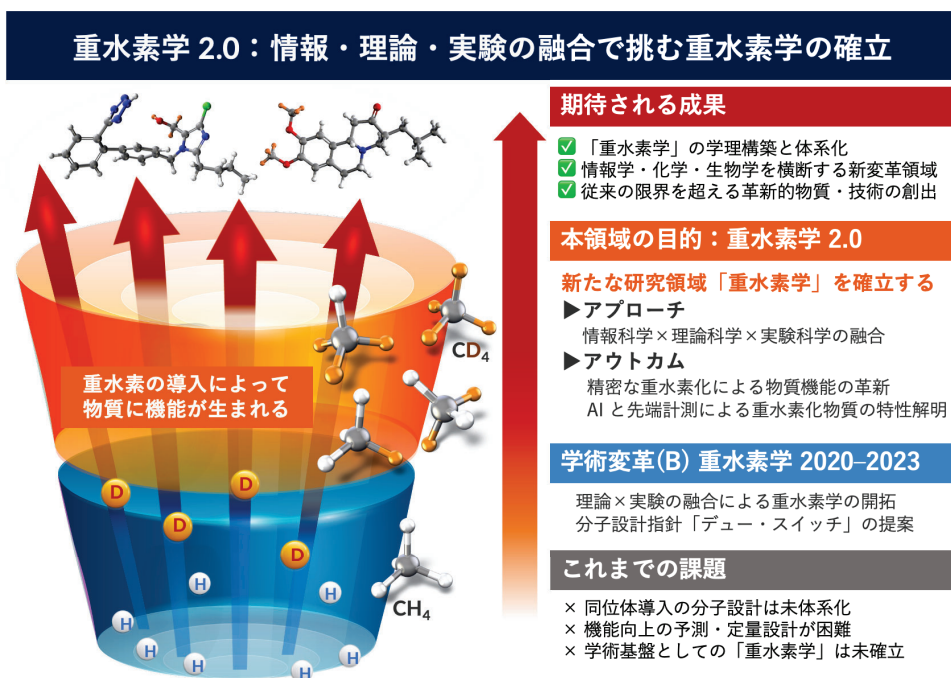


図1 研究領域の全体像

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

本研究領域では、[A01] えらぶ（応用情報学）、[A02] わかる（量子力学）、[A03] つくる（合成化学）、[A04] はかる（先端計測）の4分野が連携して研究を推進する。これらを統合的に展開することで、従来の学術的知見では予測が困難であった重水素化物質の特性を解明し、新たな学理「重水素学」の構築を目指す（図2）。さらに、本研究領域における共同研究を通じて、重水素化物質に関する基礎学理に基づき、副作用を抑えた医薬品設計や、高輝度・高耐久性発光材料、生体イメージング用高感度分子プローブ等の新規量子材料など、持続可能な社会の実現に資する革新的物質・技術の創出を図る。

A01 えらぶ（設計・予測、応用情報学、インフォマティクス、機械学習、人工知能）

重水素化物質に関する情報を統合し、物質機能を予測・設計する新たな方法論を確立する。具体的には、A02～A04で得られたデータをデータベース化し、それを基盤として物性の理解と予測手法を開発する。さらに、データ駆動型アプローチにより分子や反応の設計を行い、その有効性を検証する。

A02 わかる（理論構築、量子力学・理論化学、シミュレーション、インシリコデザイン）

重水素化物質の性質理解に向けた基礎理論を構築する。重水素が示す核の量子効果を考慮した量子化学計算（non-BO 法）を、実現象のシミュレーションに適した各手法（QM/MM法やCPLB法など）と組み合わせた新手法を開発し、実装する。さらに、DFTや高精度波動関数理論、PIMD法を併用し、反応性・振動・励起状態に重水素がもたらす効果の起源を他班との連携により解明する。

A03 つくる（合成法開発、合成化学、合成生物学）

重水素化物質の実用的な合成法を確立する。具体的には、ボトムアップとトップダウンの両面から取り組み、未踏分野である重水素化生体関連物質を標的とした新たな合成化学を展開するとともに、触媒を駆使した新たな重水素化法を開発する。さらに、他班との連携を通じて未踏の重水素化物質の合成を実現する。

A04 はかる（機能評価、先端計測、機能性材料、生命科学、オミクス）

重水素化物質の物性・機能に対する同位体効果を先端計測により評価する。同時に、イメージングツールとしての重水素化物質の活用も図る。量子材料や分子会合体、重水素化医薬分子の代謝、吸収、分布、排泄など様々な現象に重水素がもたらす同位体効果を明らかにする。

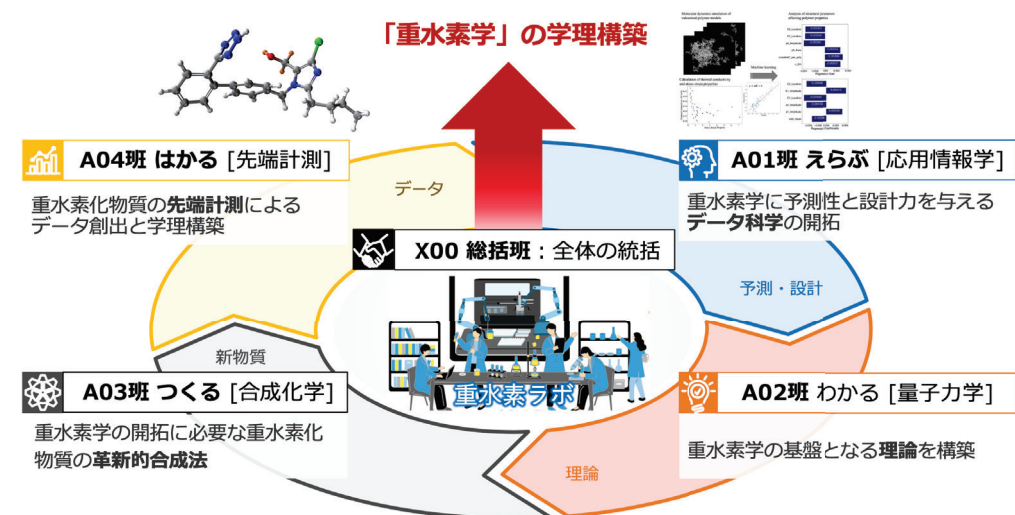


図2 重水素学の学理構築のための研究体制

ウェブサイト等

<https://deut-switch.pharm.kyoto-u.ac.jp/>
deuteriumscience@pharm.kyoto-u.ac.jp