

## さきがけ「分子技術と新機能創出」

### 研究領域事後評価報告書

#### 総合所見

本研究領域では、戦略目標「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」のもと、“物理学、化学、生物学、数学等の科学的知見を基に、分子を設計、合成、操作、制御、集積することによって、分子の特性を活かして目的とする機能を創出し、応用に供するための一連の技術”である「分子技術」の構築を目指し、蓄電デバイス、有機薄膜太陽電池等の分子を用いた超低消費電力・超軽量デバイスの実現や、ドラッグデリバリーシステム、機能性医療材料などによる革新的な治療方法の確立等の基盤技術となる以下の技術体系を構築することを達成目標とした。

- 「設計・創成の分子技術（精密合成技術と理論・計算科学との協働により、新規機能性物質を自在に設計・創成する技術）」に係る技術体系の構築
- 「形状・構造制御の分子技術（分子の形や構造を厳密に制御することにより、新たな機能の創出に繋げる技術）」に係る技術体系の構築

環境・エネルギーや医療・健康分野等における現在の社会的な課題を解決するため、分子素材の新機能・新物質・新材料の創出や分子の働き・振る舞いを自在に制御する「分子技術」を構築する狙いは、日本が強みを持つ分子を基盤とする機能材料の分野を、「技術」につなぎ、醸成させることでさらに発展、強化、推進させようとするもので、学問的重要性と社会的要請に答えるものである。近年の分子設計・合成・電子状態制御・構造／機能制御技術の進展を基礎に、これらを融合してより大きなブレークスルーを生み出そうとする「分子技術」は、材料研究開発の究極課題（グランドチャレンジ）であり、これを「分子技術」というキーワードのもとで、先駆けて推進することは、我が国の持続的経済発展を支える技術基盤を確保する上で重要であることから、本研究領域の設定は時宜を得たものであり大変適切である。

上記技術体系の構築は、非常に高い達成目標であり、目的をもって分子を設計・変換・合成してその分子を自在に制御し、精密に集合・複合構造を創出し機能を発現させ、材料、デバイス、プロセスという一連の技術を生み出すというねらいは具体的であり、研究を推進する非常に優れた指針となった。

研究課題の選考では、公募時に研究領域の特徴を明確に提示し、研究領域の達成目標を念頭に広範な研究課題を、大学や地域の多様性を維持し、女性研究者も含め43件採択したことは十分評価できる。広範かつ適切な分野設定であったために多くの若い優秀な研究者が応募した結果、3期平均で19倍という高い競争率となり、優秀な研究者が採択された。採択課題を、構造構築、分子・理論、デバイス機能、バイオ機能の出口、ならびに研究分野に分類して、位置づけを各年度ならびに全体として課題マップとして示したのは、融合研究のために広範な課題を採択するための選考にあたり適切であり、さらに各研究者の融合

研究への位置づけや意識付けにも有効であったと評価できる。特に、ポテンシャルの高い研究者を選定して、オリジナリティーの高い研究の推進を誘導する運営方針は、次に示す高い研究成果につながっており特に高く評価できる。領域アドバイザー16名は、関連分野の多様性を考慮して、日本を代表する研究者により構成されており、申し分のない陣容である。

研究成果は研究領域全体で、563報の論文（うち国際誌481報）が発表されており、特許も91件（うち国際出願34件）出願されている。さらに796件の招待講演（うち国際会議での招待講演は318件）など、極めて高い研究成果が創出され、世界においても注目されており、実際多くのテーマで想定以上の成果、あるいは従来技術では困難と思われた課題の解決に大きく貢献した成果として結実している。例えば、齊藤尚平による柔軟性を有する $\pi$ 共役系分子の研究では、光ではがせる独創的な液晶接着材料など独自性の高い機能材料が開発され、今後の応用も大いに期待される。また田中克典は、生体内の疾患部位でデザインした金属触媒を用いた有機合成反応を促進させることで、生体内で新たな分子を合成する手法を開発するなど、世界的に見ても独創性豊かな高い研究成果を創出した。また、異分野融合を見据えた研究者の採択や、領域総括による融合研究並びに共同研究の奨励・推進により、一つの分野では実現できないような融合研究の成果が多く創出され、研究期間中に12報もの優れた共著論文が生まれた。

以上を総括し、本研究領域は総合的に特に優れていると評価できる。

## 1. 研究領域としての成果について

### (1) 研究領域としての研究マネジメントの状況

#### ① 研究課題の構成

「分子技術」に関わる広範な分野の若手・中堅研究者の応募があり（3期平均での競争率約19倍）、非常に高いレベルの選考が行われ、全課題の採択課題マップで明らかであるが、有機・無機・バイオなどの合成と、構造構築、分子・理論、デバイス、バイオなどの機能化をカバーする実験・計測・理論に携わる研究課題が全体的にバランスよく採択された。大学や地域の多様性を維持し、女性研究者も含め採択されたことは適切であった。これは、研究総括の広範な研究背景と緻密に計画されたロードマップが選考に十分に反映された結果であり、異分野融合のための優れたプラットフォームが構築されたと言える。

#### ② 領域アドバイザーの構成

領域アドバイザー16名（国立大学8名、私立大学3名、企業5名）は、関連分野の多様性を考慮して、日本を代表する研究者により構成されている。産業界からも、化成品のみでなく機能材料やヘルスケア材料など新たな分野を切り拓いてきた専門性の高い研究者を選任した。本研究領域が担う専門分野は多岐に渡り、異分野融合の観点からも適切な構成となっている。また、CREST「分子技術」研究領域の山本尚研究総括も領域アドバイザーの一員として加わり、CRESTとの情報交換や連携が可能な体制が作られ、よく機能していたと

判断される。

### ③研究領域のマネジメント

領域運営の方針として研究者及び分野の融合を意識的に進め、領域内の共同研究が年次を超えて数多く実施され、結果的に研究期間中に 12 報の共同論文と 2 件の共同特許出願が生まれた。「分子技術」は分子の高設計性と自己組織化の多様性の基盤技術であるため、個々の研究者を異分野の研究者と融合させたことは、強い指揮・指導による賜物と特に高く評価する。一方、産学連携への基盤作りとして、11 回の領域会議の殆どで企業の工場見学を実施したこと、社会ニーズの実体験を目指した SciFoS (Science for Society) 活動、新化学技術推進協会における交流会や企業からの聴講が多い JST 新技術説明会、JST フェアでの発表活動などが挙げられる。これらの多彩な取り組みは、研究者個人へ産業化視点を持たせる大きな布石とも言える。学会活動と連携させた取り組みとしては、日本化学会春季年会におけるシンポジウム (5 回) や、秋季事業としての CSJ 化学フェスタ (3 回) などが実施され、学会を通じたのネットワーク構築の場も十分配慮されている。さらには、国際性豊かな研究者を育成する視点から、日仏「分子技術」国際公開シンポジウム、日独「分子技術」ワークショップなどを企画し、海外の研究者とのネットワーク構築を目指した結果、現在 12 件の国際共同研究が推進されている。これら研究総括の運営・指導は、極めて卓越していたと評価できる。本研究領域の多彩なマネジメント活動は、科学技術を総合的に判断する能力の向上や、さらには個人的なつながりを醸成し、将来を担う人材の育成に極めて有意義であったと判断する。

### ④その他

オリジナリティーの高い独創的な研究提案であることが選考指針として挙げられ、上記のような研究総括の優れた領域運営もあり、高い成果が創出され、研究者の昇進、受賞などにつながった。約 3 年の短期間に、半数近い 19 名の研究者が昇任しており、本研究領域の研究者の高いアクティビティーと将来性を示している。具体的には、准教授から教授への昇進が 5 名、助教から准教授が 8 名などである。また、文部科学大臣表彰若手科学者賞 8 名、日本化学会進歩賞 3 名など全国的な賞を受賞しており、人材育成の確かな状況が伺える。

一方、領域会議に加え、研究総括は個別のアドバイスも行い、特にライフイベントを経た女性研究者に対しても、ライフイベント前後の適切なアドバイスが、著名な学術誌への論文発表やプレス発表につながっている。このようなマネジメントが直近の成長や受賞だけでなく、将来にわたる貢献であり、研究領域終了から 5 年後、10 年後に本研究領域の研究者間のネットワークが、より一層高いレベルの新しいステージとなり、独創的アイデアを生み、新しい科学・技術の潮流を形成することを期待する。上記の通り、本研究領域の運営が研究総括の高い識見・ビジョンや具体的な研究の方向付けに加え、きめ細かな運営により進められ大きな成果を収めた。

以上により、本研究領域の研究マネジメントは特に優れていたと評価できる。

## (2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

「分子技術」の研究領域には、合成化学、自己組織化、機能素子、バイオなどの実験研究および理論物理や計算科学など様々な専門分野を研究背景に持つ研究者が一同に会し、基礎的学理の追求と社会的価値の高い機能の創出の両面から、個人の研究に高い成果が上げられたにとどまらず、分野融合や技術現場（企業視点の導入）との相互作用を進めた成果として、多くの独創的・挑戦的・先駆的成果が創出された。

例えば、齊藤尚平は、ナノレベルでの機械的刺激を発光色から判別できるメカノクロミック材料を開発したほか、自己凝集力の高いカラムナー液晶を独自に設計・合成し、紫外光を使った光剥離機能と 100℃前後の耐熱接着機能の両方を実現する新奇な接着材料の開発に成功した。さらに、計測の分野の羽田真毅と共同研究を行い、液晶接着材料の電子線時間分解測定により、分子の振る舞い(ダイナミクス)を、精密に理解することにも成功した。これらの成果は革新的な光機能性材料設計の新概念の創出に大きく貢献するとともに、社会的価値の高いレベルにまで発展させたインパクトの大きい成果であり、国際的な注目度も極めて高い。また、川井茂樹が独自に開発した超高感度顕微鏡や測定方法は、ナノスケール構造物の構造解析や操作（グラフェンへの所定位置へのホウ素導入）など、分子集合や化学反応の高分解能解析を実現した。これらの研究は、さきがけ研究者や海外研究者との共同研究により行われたことも特筆すべきである。合成系の研究が、計測分野や産業分野と相互作用することで当初の想定を超えて大きく発展したことは、さきがけの仕組みの成果としても意義が極めて大きい。加えて、楊井伸浩は、分子集合体組織となつて始めて発現されるエネルギーマイグレーション機能という新しい分子技術を用いて、従来困難であった光のアップコンバージョン（波長変換）技術の扉を拓いた。また、宍戸厚は光を操作させて行く中で分子を配列する「動的な光分子配向」の手法を開発した。この技術は広い面積で均一な配向パターンが容易に得られることから、今後のフレキシブルエレクトロニクスなどへの応用が期待される。

ライフサイエンスの分野では、田中克典により、生体内の疾患部位でデザインした有機合成反応を進め分子を合成する手法が開発された。従来、生体内で有機合成化学反応を行うことは非常に難しいと考えられてきたことから、この研究成果は画期的である。糖クラスターをドラッグデリバリーシステムとして活用し、生きている哺乳類の中で金属触媒を用いて、臓器選択的に分子を合成できることを実証、さらに疾患細胞で生産される毒性アタロレインをがん組織で選択的に抗がん剤に変換することに成功した研究成果は、今後、治療やライフサイエンス技術を大きく進展させる可能性があり、糖鎖分野の国際賞を日本人で初めて受賞するなど国際的にも注目されている。また、酒井崇匡は高分子ゲルにおいて、高分子濃度と架橋密度という重要な因子を独立に制御する技術を開発し、併せて経年劣化に伴うゲル膨潤を抑制する分子設計法を提案、実際に開発したハイドロゲル材料を用いて、人工硝子体として機能することを動物実験で実証し、今後の網膜剥離治療へ向けた

大きな成果を創出した。

本研究領域の研究成果は、国際学術誌、国内外の学会発表、特許出願、プレスリリースなどの形で国際的に情報発信され、社会的普及が図られた（発表論文 563 報、学会発表 1770 件、特許出願 91 件）。さらに、共同研究も共著論文 12 報と十分に行われていると判断できる。個別の研究成果には、独創的で、国際的に極めて高い水準であるものが多く含まれ、学問的な成果としては特に高い水準にある。また、いくつかの研究成果は、実用に近い段階にまで進んでおり、科学技術イノベーションの源泉となりうる先駆的かつ突出した研究成果として、それらの高い技術水準は国際的にも高く評価されている。

以上により、本研究領域としての戦略目標の達成状況は特に高い水準にあると評価できる。

## 2. 研究領域の活動・成果を踏まえた今後の展開等についての提言

### ①今後の活動について

「分子技術」の概念は、本さきがけ研究領域による突出した研究成果とともに具体化され、3年間に国際学術誌、国際学会、国際共同研究、プレスリリースなどによる「分子技術」の発展に関する情報発信も一定の効果があつたと評価できる。また、その中にはすでに社会実装や応用展開につながっているものもあり、今後の展開が楽しみなものも多い。

これらに関わる研究分野が、さらに未踏分野あるいは実用化に向けて継続的かつ拡大的に発展するためには、人材と組織の両面から進める必要がある。本事業に参画した開始時に平均 37 才の若手・中堅研究者は、まさしくこれから独立した研究体制を築いていく時期である。本事業により芽生えた基礎科学や革新的分子技術が実用化に向かうときに、これまでのように大学や研究所の学務業務を兼務する PI が、その環境の中で研究や知財管理を個別に進めることは大変困難を伴う。これを解決するには、(1) PI の研究室から独立した研究ユニットを速やかに組むことができ、(2) 産学連携を総括的に担当する専門的なリーダーを置いた、(3) 実用化に向けて連携する企業が実質的に参画できるオープンな体制（イノベーション機構）を大学や研究所に整備することも一つの考え方ではないだろうか。

さきがけに参加した研究者は、今後間違いなくこの分野をリードする研究者になると信じている。今後も定期的に合同研究会などを開催し、共同研究などをさらに進める機会を増やしたり、JST 内のプログラムや新技術説明会に紹介するとともに、他の可能性もアドバイスできる仕組みがあれば展開に有意義ではないかと考える。

優れた研究成果を生む視点から考えると、1期当たり3年という研究開発期間は短く、それを継続発展させていく仕組みがやはり必要と考える。また、基礎的な成果が上がっても、それを事業化していく段階で、技術経営の分野でよくいわれる「魔の川」「死の谷」「ダーウィンの海」の関門を乗り越えなければならないし、事業化に近づくほど関門を乗り越えるための費用も加速的に増える。ベンチャーキャピタル等民間資本以外に、公的な仕組み

も必要になると思われる。

#### ②研究領域について

過去に、ナノテクノロジー分野が産業界でも基盤研究として実施されていたが、景気後退の影響を受け一時的に活動が縮小した時期があった。そのような時代の流れを考えると、いくつかの分野の先進技術を融合した本研究領域の実施は、我が国の持続的経済発展を支える技術基盤を確保する上で非常に良いタイミングであり重要であった。今回の研究領域の基本路線では集合体・高次構造制御でBottom-up手法が強調されているように見えるが、top-downも重要である。実際、本研究領域ではTop-downで構造を制御した成果も含まれており、Bottom-upとTop-down両方が「分子技術」では重要なことが示されている。

#### ③知的財産について

事業化に先立つのは知的財産権の確保である。将来の実用化を視野に入れて研究を進める場合には、学会や論文発表とともに、特許性の確認を行ってほしい。