

最先端・次世代研究開発支援プログラム
事後評価書

研究課題名	自己組織化を活用した光機能性素子の創製
研究機関・部局・職名	東京工業大学・資源化学研究所・准教授
氏名	吉沢 道人

【研究目的】

本研究の目的は、多環 π 共役分子と金属イオンの自己組織化により、三次元 π 共役骨格に囲まれたナノサイズ空間を有するカプセル分子を構築するとともに、そのゲスト分子内包能を活用した、新規な光機能性素子を創製することである（図1）。

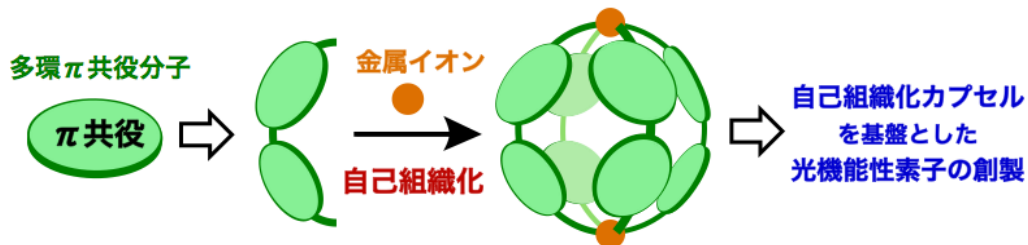


図1. 自己組織化カプセル分子を基盤とした光機能性素子の創製.

- 1) 蛍光性分子カプセルライブラリーの構築：種々の形やサイズを有する蛍光性分子カプセルを構築する。分子カプセルの構成要素として蛍光性の多環 π 共役分子を活用し、カプセル形成に金属イオンの配位結合を駆動力とした自己組織化を利用する。また、種々の分子間相互作用を活用した蛍光性分子カプセルの構築にも挑戦し、それらの構造および分光学的性質を解明する。
- 2) ゲスト分子内包を利用した新発光素子の開発：独自に開発した分子カプセルを利用して、様々な機能性分子（蛍光性色素分子など）の内包を達成するとともに、内包体の構造および光機能特性を明らかにする。分子カプセル骨格の簡便な化学修飾とゲスト分子内包により、高い蛍光性能と多彩な蛍光色を持つ新発光素子を開発する。
- 3) ヘテロ元素ドーピングによる光触媒化：窒素やリン原子を含む蛍光性分子カプセルを構築する。内部空間にドーピングされたヘテロ原子の特性を利用した光触媒を開発する。本研究の実施中、「光活性分子の内包による反応制御」に関する注目すべき現象が得られたため、課題変更を行った。
- 4) 量子ドット内包による生体プローブの創成：生体分子の高感度・高選択的センシングを可能とする蛍光性プローブを開発する。分子カプセルに蛍光性色素を導入することで、量子ドットを必要とせず、生体分子の高感度・高選択的センシングを達成する。
- 5) ドラッグデリバリーシステムの開発：薬物送達システムを目指した基礎研究として、1 nm サイズの巨大分子を安定に内包できる分子カプセルを開発する。また、内包した巨大分子を外部刺激（熱、光、酸塩基など）により放出可能なシステムを構築する。

【総合評価】	
	特に優れた成果が得られている
○	優れた成果が得られている
	一定の成果が得られている
	十分な成果が得られていない

【所見】	
① 総合所見	
<p>本研究は、多環π共役分子と金属イオンの自己組織化により、三次元π共役骨格に囲まれたナノサイズ空間を有するカプセル分子を構築し、その空間にゲスト分子を内包させ、最終的に新規な光機能性素子の創製を目的とする、自己組織化化学、ホスト・ゲスト化学の分野の研究である。全体的に見て、所期の目的のほとんどを達成でき、また基礎研究に優れた成果を挙げた。</p> <p>π-スタッキングを用いたミセル状ナノカプセルの創成など、新たな展開もある。自己組織化に基づく分子カプセル合成に関するライブラリー構築の学術研究では、当該分野におけるインパクトのある研究成果を挙げた。</p> <p>本研究開発の基盤となる種々の蛍光性分子カプセルが構築できた。また、様々な蛍光性色素分子の内包や AIBN などのラジカル開始剤の安定化に分子カプセルが利用できた。さらに、生体分子の高感度センシング、巨大分子の外部刺激による放出などにも応用した。</p> <p>課題3（「ヘテロ元素ドーピングによる光触媒化」）について、関連した実験の過程で「光活性分子の反応制御」に関する注目すべき現象が観測されたため、課題の変更を行い、期間内に目標を達成した。</p> <p>多環π共役分子を用いた分子ナノカプセルは、本研究代表者のオリジナルな材料系であり、その系を様々な展開した研究は先導性・優位性を有している。特にπ-スタッキングと疎水性相互作用を利用した分子カプセルには先進性がある。</p> <p>多環π共役分子に両親媒性を付与し、ミセル形成過程を利用した分子ナノカプセルの形成手法は、これまでのミセルや分子ナノカプセルの双方の特徴を有しているだけでなく、応用展開も期待できる。</p> <p>「ミセル構造」からの発想で、金属イオンを必要としない蛍光性分子カプセルを得た。これは、最も先進性および優位性が高く、ブレークスルーと呼べる研究成果である。もう1つのブレークスルーと呼べる研究成果は、「光と熱に強いラジカル開始剤」の開発である。1 nm サイズの内部空間を有する金属架橋カプセルに、種々のラジカル開始剤を内包でき、また、内包された分子を簡単に取り出すことができる。</p> <p>その他、特筆される結果は、・配位結合を利用した分子カプセルのうち、亜鉛および銅架橋カプセルによる青色蛍光、・π-スタッキングを利用した分子カプセルにより、水中で種々の蛍光性色素分子（DCM や Nile Red など）の内包、・親水性の分子ボウルの疎水性のポケット空間とその骨格に含まれるピリジニウム部位により、水中でカルボニル基を有する芳香族分子に対する高い分子認識能、・窒素を含む3分岐型分子によるフル</p>	

オロソルバトクロミズム（リン原子を導入した3分岐型分子は、リン上に種々の官能基を導入でき、固体状態で特異な蛍光色を呈した）、・白金架橋分子カプセルによる男性ホルモンの蛍光センシング、・外部刺激に応答したカプセル-チューブの相互構造変換による巨大ゲストの内包-放出システムの開発などである。

新たな自己組織化手法に基づく分子カプセルの合成手法のいくつかを開発しており、関連する研究分野の進展に寄与すると見込まれる。グリーン・イノベーション「持続的発展が可能な社会の実現」に貢献する新規な光機能性ナノ構造体を開発した。

研究室の立ち上げ段階にあったため、かなりの労力を要したが、順調にグループが成長した。特に多くの博士課程の学生を獲得している点は、マネジメントの高さを象徴している。指摘事項へも真摯に取り組んだ。

インパクトファクターの高い論文誌に多くの発表をしている。特許の取得も多い。

大学にリンクされた研究室のHPを活用して、最新の研究成果を発信した。また、高等専門学校や高等学校での出張講義、サイエンスカフェ、高校生・一般向けの公開講演を行い、専門家以外の国民に対して本研究課題の内容および成果について積極的に紹介した。

② 目的の達成状況

・所期の目的が

(全て達成された ・ 一部達成された ・ 達成されなかった)

補助事業期間内に目的が達成された。加えて、計画に無かった π -スタッキングを有したナノカプセルの合成に成功し、新たな展開もある。

本研究開発の基盤となる種々の蛍光性分子カプセルを構築した。また、分子カプセルの機能として、様々な蛍光性色素分子の内包やAIBNなどのラジカル開始剤の安定化と利用に成功した。さらに、生体分子の高感度センシング、巨大分子の外部刺激による放出なども明らかにした。

課題3（「ヘテロ元素ドーピングによる光触媒化」）について、関連した実験の過程で「光活性分子の反応制御」に関する注目すべき現象が観測されたため、課題の変更を行い、期間内に目標を達成した。

③ 研究の成果

・これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が
(ある ・ ない)

・ブレークスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が
(創出された ・ 創出されなかった)

・当初の目的の他に得られた成果が (ある ・ ない)

・本研究で得られた研究成果の先進性・革新性・優位性はある。
多環 π 共役分子を用いた分子ナノカプセルは、本研究代表者のオリジナルな材料系であり、その系を様々な展開した研究は先導性・優位性を有している。特に π -スタッキングと疎水性相互作用を利用した分子カプセルは先進性がある。

多環π共役分子に両親媒性を付与し、ミセル形成過程を利用して分子ナノカプセルを形成する手法は、これまでのミセルや分子ナノカプセルの双方の特徴を有しているだけでなく、応用展開も期待できる。

- ・ 本研究で得られた研究成果で特筆すべきものがある。

「ミセル構造」からの発想で、金属イオンを必要としない蛍光性分子カプセルを得た。これは、最も先進性および優位性が高く、ブレークスルーと呼べる研究成果である。もう1つのブレークスルーと呼べる研究成果は、「光と熱に強いラジカル開始剤」の開発である。

その他、特筆される結果は、配位結合を利用した分子カプセルのうち、亜鉛および銅架橋カプセルによる青色蛍光、π-スタッキングを利用した分子カプセルにより、水中で種々の蛍光性色素分子（DCM や Nile Red など）の内包、親水性の分子ボウルの疎水性のポケット空間とその骨格に含まれるピリジニウム部位により、水中でカルボニル基を有する芳香族分子に対する高い分子認識能、窒素を含む3分岐型分子によるフルオロソルバトクロミズム（リン原子を導入した3分岐型分子は、リン上に種々の官能基化を導入でき、固体状態で特異な蛍光色を呈した）、白金架橋分子カプセルによる生体分子の蛍光センシング、外部刺激に応答したカプセル-チューブの相互構造変換による巨大ゲストの内包-放出システムの開発などである。

- ・ 当初の目的の他に得られた成果はない。

④ 研究成果の効果

- ・ 研究成果は、関連する研究分野への波及効果が
(見込まれる ・ 見込まれない)

- ・ 社会的・経済的な課題の解決への波及効果が (見込まれる ・ 見込まれない)

- ・ 本研究の成果は、関連する研究分野の進展に寄与が見込まれる。
新たな自己組織化手法に基づく分子カプセルの合成手法をいくつか開発しており、関連する研究分野の進展に寄与すると見込まれる。

- ・ 本研究の成果が、グリーン・イノベーションへの貢献が見込まれる。
グリーン・イノベーション「持続的発展が可能な社会の実現」に貢献する新規な光機能性ナノ構造体を開発した。

⑤ 研究実施マネジメントの状況

- ・ 適切なマネジメントが (行われた ・ 行われなかった)

- ・ 研究目的達成に向けての研究計画の適切性、研究実施体制の適切性、マネジメントの適切性は高い。助成金の有効な利活用、指摘事項への対応状況は適切である。
研究室の立ち上げ段階にあったため、かなりの労力を要したが、順調にグループが成長した。特に多くの博士課程の学生を獲得している点は、マネジメントの高さを象徴している。指摘事項への対応も適切で、真摯に取り組んでいる。

- ・ 論文発表、会議発表、知的財産権の出願・取得状況、その他への研究成果の積極的な公表や発信が適切に行われた。

インパクトファクターの高い論文誌に多くの発表をしている。特許の取得も多い。

- ・ 国民との科学技術対話が適切に実施された。

定期的に大学にリンクされた研究室の HP を活用して、最新の研究成果を発信した。また、高等専門学校や高等学校での出張講義、サイエンスカフェ、高校生・一般向けの公開講演を行い、専門家以外の国民に対して本研究課題の内容および成果について積極的に紹介した。

以下に記す発表もあった。

1. 月刊 Newton 「吉沢道人：ひとりでの組み上がる 発光性ナノカプセル」(2012年7月号、p.4)。
2. 米国化学会誌(英語版) Chemical & Engineering News 「Aromatic Groups Help Light Up Micelles」(2013年2月11日, p32)。
3. 日刊工業新聞「吉沢道人：拓く 研究人 新現象を"超分子"で」(2013年5月8日, 第23面)。
4. 東京工業大学 HP 「顔 東工大の研究者たち Vol.5 吉沢道人」(2013年9月トップページ) (<http://www.titech.ac.jp/research/stories/yoshizawa.html>)。