

社会変革を加速させる 「精密分子設計」の開拓者

大学院理工学府 物質・環境部門
材料科学プログラム
准教授

覚知 亮平

[かくち りょうへい]

大学院理工学府の覚知亮平准教授は、高分子化学の分野で日本を代表する若手研究者の一人だ。

日本学術振興会(JSPS)海外特別研究員として、高分子科学の本場であるドイツで最先端の合成知見を磨いてきた。その実績が認められ、文部科学省の「卓越研究員」に選出されて以来、有機化学と高分子化学の境界を打ち破る革新的な研究を展開している。現在取り組んでいる研究の柱は多成分連結反応による高分子合成のグリーン化である。



効率の極限へ：

多成分連結反応による高分子合成

——「多成分連結反応による高分子合成」はどういうものですか。

多成分連結反応は、3種類以上の異なる原料を、一度の操作で一つの化合物へと組み上げる合成手法です。有機化学においては、その萌芽段階から存在している反応形式です。1850年代にはStreckerアミノ酸合成が発見されました。この反応はアミン、アルデヒド、シアン化水素間の三成分連結反応として認識されています。

しかし、高分子化学で多成分連結反応が積極的に導入されるようになったのは、驚くべきことに、ごく最近のことです。具体的には2010年代に入っ

てから、ドイツのカールスルーエ工科大学(KIT)のMeier教授らをはじめとする世界のトップランナーたちによって、その真の価値が次々と見出され、瞬く間に世界的なトレンドへと発展していきました。

——なぜ、高分子化学で多成分連結反応は難しかったのですか。

理由は、3つ以上の成分を、副生物を出さずに99%以上という完璧な効率で反応させることが極めて困難だったからです。高分子材料として十分な強度を出すためには、原料同士がほぼ100%の効率で長くつながり続ける必要があります。

しかし、成分が増えるほど反応の制御は難しくなり、途中で停止したり副生物が混ざったりするため、これまでは「多成分連結反応は、長い鎖(高分子)を作るのには不向きだ」というのが化学界の常識でした。

—— 多成分連結反応による高分子合成を可能にした覚知先生の技術・知見は何ですか。

これまでの高分子化学の領域では、扱える合成反応の選択肢が限られていました。私の研究の真の価値は、「材料合成という観点から、既存の有機化学を再定義できる点」にあります。

歴史上、無数に報告されている多成分連結反応の大半は低分子合成用ですが、私は分子の構造や反応挙動を徹底的に精査することで、「どの反応が高分子合成の土台として機能するか」を論理的に見極めるアプローチを強みとしています(図1)。これにより、材料開発の可能性を根底から広げることができます。

このように、既存の有機化学の枠組みを材料の視点で再評価し、高分子化学の新しい道具箱として提供できるアプローチにおいて、私は独自のポジションを確立していると考えています。

—— 大きな研究成果ですね、社会・経済への影響は？

多成分連結反応は、エネルギー消費と廃棄物を劇的に抑える「究極の省資源合成」です。これが技術の本質です。

この手法により、これまでは合成困難だった高機能材料を、低コストかつ低環境負荷で社会に供給する基盤を構築します。

循環の理想へ：トランスサイクル概念による持続可能なプラスチック

——「低環境負荷」ですか。

プラスチックの廃棄問題に対し、私は従来の「リ

サイクル」を超える、「トランスサイクル」という新概念を提唱しています。

そのポイントは、分子結合の切断と再結合が自在に行える「可逆的な化学反応」を高分子に導入することです。

これにより、使用済みの材料を分子レベルで組み替え、別の高機能材料へと「転生」させることが可能になります。

決して夢物語ではありません。私の研究成果は英国王立化学会の学術誌『Polymer Chemistry』に掲載されており、世界最先端の科学的実証成果として高く評価されています。

従来のプラスチックリサイクルは、溶かすたびに品質が下がる点や、原料まで完全分解する際に莫大な熱エネルギー(環境負荷)を必要とする点が課題でした。

これに対し、私が提唱する「トランスサイクル(Transcycle)」は、エネルギーをほとんどかけずに、材料の骨格を壊すことなく、時代のニーズに合わせた「別の新しい高機能材料」へと分子レベルでそのまま変換させる、全く新しい持続可能な資源循環の形です(図2)。

—— その仕組みである「可逆的な反応」とは？

一言でいえば、「一度固めたら二度と元に戻らない」とされていた頑丈なアミド結合を、分子設計と適切なアプローチによって、マイルドな条件で行ったり来たりできるようにした仕掛けです。

このアミド結合は自然界でもトップクラスに安定しているため、日常での使用中はきわめて壊れにくい優れた強度を持ちます。しかし、これまでは安定すぎるがゆえに、一度結びついたら二度と元の状態には戻せないと考えられていました。

私の研究のブレイクスルーは、反応の鍵を握る「カルボニル基」の周辺構造を緻密に設計した点にあります。これにより、温和な活性化剤と最適な反応条件を組み合わせることで、頑丈な結合をノーダメージで元の綺麗な状態へと自発的に戻す(逆反応)ことに成功しました。

可逆反応の制御により、使用時は頑丈に使い、役目を終えたら元の状態に戻して別の材料へ何度でも「転生」させる、持続可能な未来を描いています。

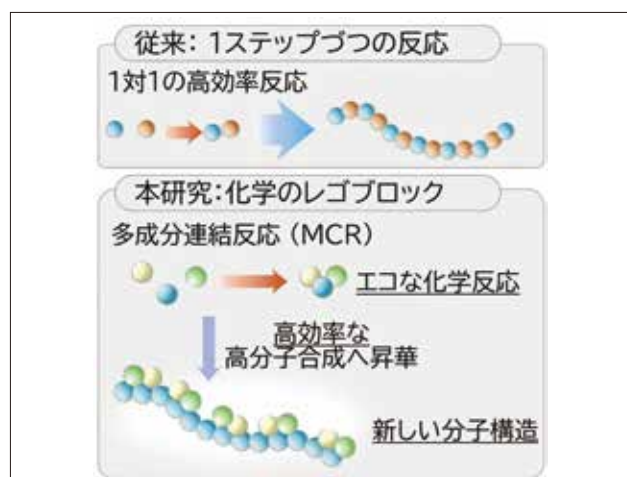


図1 多成分連結反応による高分子合成

— それにはどういう意義があるのですか。

「資源を消費して捨てる」線形経済から、分子が形を変えて社会を回り続ける「完全循環型社会」へのパラダイムシフトが可能になることです。

— トランスサイクルを可能にした先生の技術・知見の「すごさ」は何ですか。

最大のイノベーションは、高分子の骨格を維持したまま、材料の機能だけを劇的に「上書き」できるシステムを確立した点にあります。従来の化学界では「リサイクル＝元の材料や原料に戻すもの」という固定観念がありました。

私は、カルボニル基の分子設計を通じて、強固なアミド結合を温和な条件で制御する可逆反応を組み込むことで、「骨格の維持」と「高機能化への再構成」を一つのシステムとして両立させることに成功しました。「質の下がったリサイクル品を我慢して使う」のではなく、「使用済みのプラスチックを、次の時代に必要な、より価値の高い材料へと進化させる」というトランスサイクル概念を実証し、資源循環の新しいプラットフォームを創出した点が独自の強みです。

合成を科学から「予測」へ： 計算化学と機械学習の援用

— 研究手法の革新はありますか。

材料開発において、私は実験のみに頼る手法を脱却し、計算化学と機械学習 (AI) を融合させたDX駆動型研究を推進しています。具体的には、環境に優しい「次

世代グリーン溶媒(エコな液体)」を用いた有機材料の合成において、「どういう条件にすれば実験が成功するか」をAIに予測させる研究を行っています(図3)。

現在の材料開発の分野では、「AIの専門家はプログラムが組めても、実際の高度な合成実験はできない」という壁と、逆に「実験の専門家は材料を作れても、AIを自分で設定・構築することはできない」という大きな壁(分業のボトルネック)が存在しています。

しかし私は、AIの予測プログラムの構築から、それを用いた条件予測、そして実際の材料合成実験にいたるまで、すべてを分業せず一人で完結させています。AIの予測をその場ですぐ実験で検証し、得られたリアルなデータを自分でAIへ再学習させて予測精度を爆発的に高めていく——。この「AI設定」と「合成実験」の超高速な自己完結ループを一人で回せるからこそ、世界のどこよりも早く、環境に優しい次世代材料を開発できるのが最大の強みです。

— その手法の社会的インパクトは？

「経験と勘」を「理論とデータ」へ置き換えるこのアプローチは、新材料開発の期間を大幅に短縮し、日本の産業競争力を維持・強化するための鍵となります。

— 未来に向けては？

私の研究の根幹は、ドイツで培った合理性と、卓越研究員としての独創性、そして計算・AIを駆使したデジタルアプローチの融合にあります。この革新的な技術を社会実装へとつなげ、地球規模の環境課題解決と、次世代の材料科学の発展に貢献していく所存です。

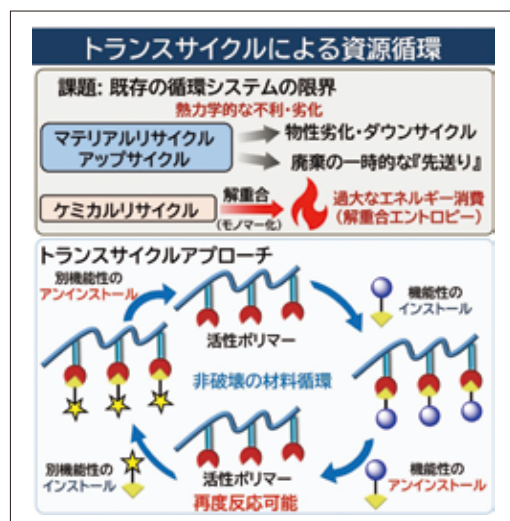


図2 持続可能な資源循環の形

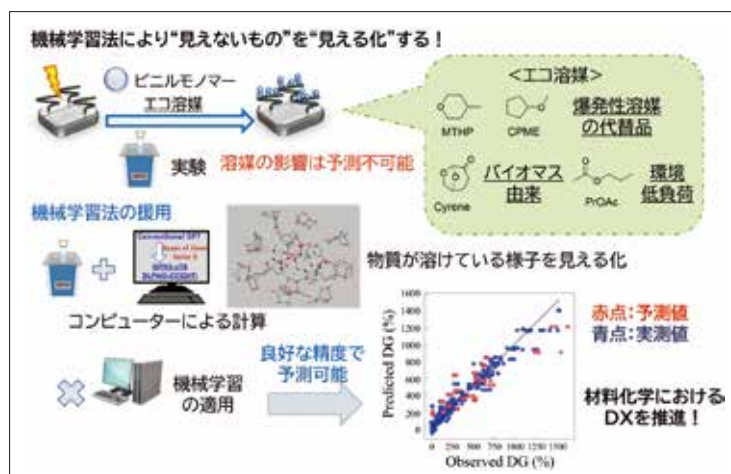


図3 DX駆動型研究の推進