

## 【若手研究(S)】 理工系(化学)



### 研究課題名 化学機能を制御する超分子ツールの創製

東北大学・多元物質科学研究所・教授 きんばら かずし  
**金原 数**

研究分野: 化学

キーワード: 超分子、分子素子、機能触媒

#### 【研究の背景・目的】

本研究課題では、刺激に応答して機能を発揮する生体分子の機能をモチーフとして、「物質変換」および「エネルギー変換」などの化学的な機能を超分子化学的にコントロールする、新しい概念の分子ツールの開発を目指します。

物理的、あるいは化学的刺激に応答して物性が変化する刺激応答性分子は、分子センサー、分子メモリ等の分子デバイスの根幹を成す極めて重要な合成分子です。申請者らはこのような刺激応答性分子の中で、刺激により機械的な構造変化を起こす「分子機械」に注目し、既存の刺激応答性分子では実現できない新機能の発現を目指して、プログラムされた複雑な動きを実現する分子設計の基礎的な方法論を開拓してきました。一方、分子生物学の発展に伴い、生体系では物質生産、エネルギー変換、シグナル伝達、物質移動などの多くの化学的機能が、タンパク質を中心とした巨大分子の高度にプログラムされた機械的な動きを通してコントロールされていることが明らかになってきました。本研究課題では、生体系で実現されている機能のうち、「物質変換」および「エネルギー変換」に着目し、これらを人工環境下で実現する合成/半合成分子機械の構築を目指します。

#### 【研究の方法】

本研究の鍵となるコンセプトは、「分子の歪みの可逆制御」です。人工触媒あるいは酵素反応において、反応活性中心部の立体環境が反応速度、選択性に大きな影響を与えることはよく知られています。このような触媒活性を有する分子に外部から分子機械を作用させて、これを物理的に歪ませ、さらに可逆的に戻すことができれば、反応活性、反応選択性を可逆的に変化させることができます。この原理は単純であるが故、様々な化学反応の制御に適用できる普遍性があります。また、歪んだ分子構造を生成することができれば、入力に用いる物理的なエネルギーとは異なる形の化学エネルギーとしてこれを貯蔵あるいは取り出すことにもつながります。そこで本研究課題では、まず第1に、有機金属触媒および酵素の2つをターゲットとし、これらに超分子化学的に作用し、機械的な構造変化を通じて活性の制御を行うことのできる超分子機械の開発を目指します。さらに、もう一つの重要な柱として、分子機械の「分子スイッチからの脱却」を目指します。例えば、物質の能動輸送を考えた場合、分子機械が2つの構造の間で変化する限り、機械的な動きを通じて物質を運ん

でも、逆の動きを起こす過程で物質を逆に輸送してしまうことになり、実質的な「仕事」を生み出すことは困難です。これに対し、生体系中のATP加水分解酵素などでは、ATPの結合、加水分解、ADPの解離という多段階を経ているため、この加水分解のエネルギーを利用して各種イオンの輸送という「仕事」をさせることができる。このような、「化学反応を利用した多段階の機械的動きの創製」にチャレンジします。

#### 【期待される成果と意義】

石油をはじめとする資源逼迫が年々大きな課題となる中、既存の概念を越えた新しい機能物質の開発が将来的に必要不可欠な状況にある。生体中で起こっている様々な化学現象は、そのエネルギー変換効率の高さ、永続性の観点から、そのような機能物質の開発において、様々なヒントを与えてくれる。「分子機械」はこれまで、分子エレクトロニクスなど電子デバイス的な観点から着目されてきたが、生命を維持仕組みのなかでこれらを巧みに利用していることを考えると、電気以外のエネルギー源により動作する新しい機能物質の基盤として考えるのに適当であると期待される。分子の機械的な動きによって、化学反応の制御やエネルギー変換、エネルギー貯蔵などが実現できれば、既存の刺激応答性分子とは一線を画した、機能性マテリアルの新潮流を創出することが期待できる。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Mechanical Twisting of a Guest by a Photoresponsive Host, Takahiro Muraoka, Kazushi Kinbara, and Takuzo Aida, *Nature* **2006**, *440*, 512–515.
- Chaperonin-Mediated Stabilization and ATP-Triggered Release of Semiconductor Nanoparticles, Daisuke Ishii, Kazushi Kinbara, Yasuhiro Ishida, Noriyuki Ishii, Mina Okochi, Masafumi Yohda, and Takuzo Aida, *Nature* **2003**, *423*, 628–632.

#### 【研究期間と研究経費】

平成21年度–25年度

69,400千円

ホームページ等

<http://www.tagen.tohoku.ac.jp/labo/kinbara/index-j.html>