



業績紹介：二輪型分子ベアリングの自発的・自己選別組み上げ

“Self-Sorting of Two Hydrocarbon Receptors with One Carbonaceous Ligand”

Taisuke Matsuno, Sota Sato, Atsutoshi Yokoyama, Sho Kamata, and Hiroyuki Isobe

Angew. Chem. Int. Ed., **55**(49), 15339–15343, (2016), DOI:10.1002/anie.201609444

佐藤宗太

(東北大学 WPI-AIMR・
A02 計画研究代表者)



分子認識による超分子形成において働く相互作用は、非指向性と指向性の相互作用の二種類に大別できる。一般に、選択性が高い分子認識には水素結合や配位結合に代表される指向性の相互作用が不可欠だと考えられており、ファンデルワールス力など非指向性の相互作用は二次的な役割を果たすのみとされてきた。

これまでわれわれの研究グループでは、チューブ状芳香族炭化水素レセプターとフラレンリガンドからなる超分子複合体の合成と機能・構造解析を行ってきた。特に、チューブ内部でフラレンが自由に回転する「分子ベアリング」としての機能に着目して研究を進めてきた。

本研究では、チューブ状レセプターと、二ヶ所の会合サイトを有するフラレンリガンドとの超分子形成を検討し、非常に強固な 2:1 会合体が形成されることを明らかにした。さらに、異なるレセプターを混合した場合には、予想外に、非指向性のファンデルワールス力のみで自己選別が実現できることを見いだした。

チューブ状レセプターとして[4]シクロクリセニレン ([4]CC) の二種類の異性体を、フラレンリガンドとしてダンベル状フラレン C₁₂₀ を用いた。溶液中において超分子錯体が形成することを蛍光消光滴定により確認した。Job プロット解析と合わせ、期待したとおり一分子の C₁₂₀ に対して二分子の[4]CC が錯体形成した 2:1 錯体が得られたことがわかり、会合定数は、二種類の異性体でほぼ同等であった。

二種類の異性体を混合した場合の生成物を明らかにするため、NMR 測定を行ったところ、自己選別挙動が観測された。二種類の homo 体と一種類の hetero 体

という、合計三種類の 2:1 錯体が生成する可能性がある。確率論的に形成される場合は、得られるモル比は $\text{homo}^a:\text{homo}^b:\text{hetero} = 1:1:2$ と予想されるが、実際の比率は 1:1:0 であり、二種類の homo 体のみが「ナルシシスティック自己選別」により生成した。

この 2:1 錯体の構造を明らかにするため、X 線結晶構造解析を行った (図 1)。炭素と水素原子のみからなる有機分子ではあるが、複雑で大きな構造であるために、良質な結晶の調製・回折データの取得・構造解析はそれぞれ困難であったが、放射光 X 線の利用により、3 種類すべての 2:1 錯体の構造を明確に決定できた。これらの超分子形成には非指向性のファンデルワールス力のみが働いていることを明らかにできた。

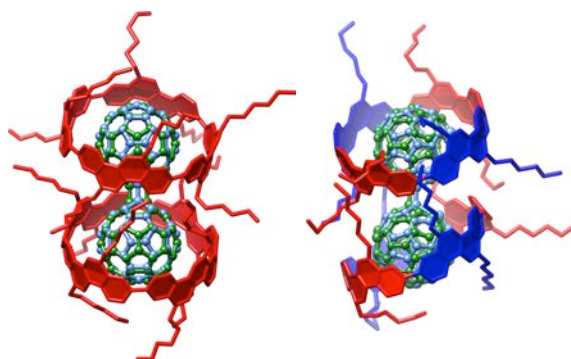


図 1：放射光 X 線結晶構造解析によって明らかになった homo および hetero 型の超分子複合体の構造。

以上のように、非指向性のファンデルワールス力のみによる特異な 2:1 会合体を形成するとともに、予想外の自己選別挙動を見いだした。選択的な超分子形成のメカニズムに新たな知見を与える成果である。

なお、本研究成果は東北大学・JST・東京大学からプレスリリースを行い、実験を行った SPring-8・KEK PF の web サイトでも紹介された。

また、2016 年 11 月 21 日付の日経産業新聞に掲載された。



業績紹介：より大きな大環状炭化水素分子の合成
～開き角が大きい単位ユニットの利用～

“An Obtuse-angled Corner Unit for Fluctuating Carbon Nanohoops”

Zhe Sun, Naoya Miyamoto, Sota Sato, Hidetoshi Tokuyama, and Hiroyuki Isobe

Chem. Asian J., in press, DOI:10.1002/asia.201601614

佐藤宗太
(東北大学 WPI-AIMR・
A02 計画研究代表者)



カーボンナノチューブの部分構造である、湾曲した π 系をもつ筒状分子の合成と、その特異な動的挙動・応用利用を研究してきている。本来は平面的な π 系は、湾曲させると歪みが生じるので合成が難しい。そのため、一般に、複数の折れ曲がった単位ユニットを環状に接続して多角形型の中間体を合成した後に、化学反応によって折れ曲がった部分を π 系に組み込んで筒状の生成物を得る合成戦略が用いられている。従来、単位ユニットの折れ曲がり角度は 90° 以下のものが報告されているが、幾何学的に考えると、より大きな角度を用いれば、より多くの単位ユニットが組み込まれた多角形が生じ、より大きな筒状分子が得られる。このような考察のもと、 $90^\circ \sim 180^\circ$ の角度 (obtuse angle) である、 126° の折れ曲がり角度をもつ単位ユニット **2** を合成し、筒状分子の合成を検討した (図 1)。

ベンザインとの Diels-Alder を鍵反応として、単位ユニット **2** を効率的に合成することができた。環化反応に適した山本型カップリング反応を用いることで、環状の 5、6、7、8 量体の中間体 **3**、すなわち、5～8 角形型分子を得ることができた。還元反応条件下、折れ曲がった部分を芳香環化し、環状の 5、6、7 量体の筒状分子 **4** を得た。これらの多角形型中間体 **3**、筒状分子 **4** が、いくつかの単位ユニットから構成されているかを決定するためには、分子量を決定できる MALDI-TOF 型質量分析が有用であった。

単位ユニット **2**、中間体 **3** のうち 5、7 量体、筒状分子 **4** のうち 5 量体の構造は、単結晶 X 線構造解析によって明らかにすることができた (KEK PF-AR NE3A ビー

ムライン: Dectris Pilatus 2M-F PAD 検出器、および Rigaku XtaLAB P200: Dectris Pilatus P200 PAD 検出器)。中間体 **3** では、5、7 量体の平均の折れ曲がり角度は、それぞれ 122° 、 125° であり、単位ユニット **2** の折れ曲がり角度 126° とほぼ同じであった。正七角形の内角は 129° なので、正五角形 (内角 108°) が主生成物となるのは不利だと考えられるが、捻れた構造で歪みを解消し、エントロピー的に有利な環状 5 量体が生じることがわかった。筒状生成物では、芳香環化による安定化の引き替えに、歪みが生じたことが明らかになった。

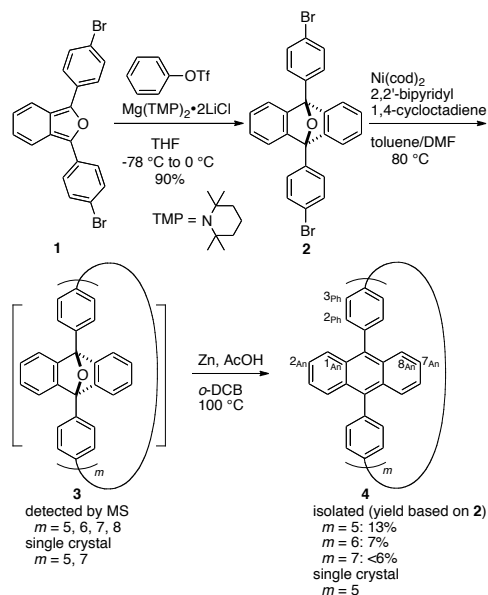


図 1：大環状芳香族分子の合成スキーム。

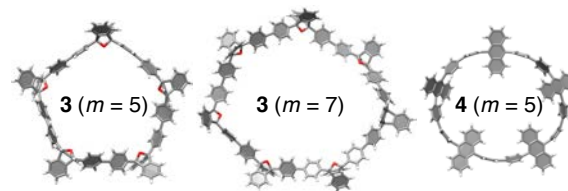


図 1：放射光 X 線結晶構造解析によって明らかになった中間体 **3** および最終生成物 **5** の分子構造。



マラリア原虫由来 PTEX トランスロコンのポア形成タンパク質

Expression and Characterization of the Plasmodium Translocon of the Exported Proteins Component EXP2

Kazuaki Hakamada, Hirokazu Watanabe, Ryuji Kawano, Keiichi Noguchi, and Masafumi Yohda
Biochem Biophys Res Commun., in press. DOI: [10.1016/j.bbrc.2016.11.097](https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2016.11.097)

マラリア原虫は赤血球に感染すると寄生胞と呼ばれる細胞内小器官を形成し増殖する。原虫は、寄生胞から PTEX (Plasmodium translocon of exported proteins) と呼ばれるトランスロコンを介して多数のタンパク質を宿主赤血球の細胞質内に送り込むことで、宿主赤血球細胞を改変して栄養素などを獲得する。PTEX は分子シャペロンの 1 種である Hsp101 を含む 5 つのタンパク質から構成されており、原虫細胞から寄生胞内に分泌された輸送タンパク質は、PTEX が一度アンフォールドし膜透過すると考えられている。我々は、他のユニットを膜に繋ぐリンカーであり、アンフォールドされたタンパク質が通過するポア形成が予想されるタンパク質 EXP2 について解析を行った。EXP2 は大腸菌より GST 融合タンパク質として獲得した。綿羊赤血球を用いた溶血実験から、EXP2 は赤血球を溶血させる特性があることが分かった。また電子顕微鏡によりリボソームに再構成された EXP2 を観察した結果、ポアの状の粒子を確認し、EXP2 が膜上でポアを形成している事を強く示唆した。人工脂質 2 分子膜に EXP2 を再構成し、パッチクランプ法により電氣的解析を行う事でポアの直径を算出した。電子顕微鏡から推定したポア直径の結果と合わせて、EXP2 は 3.4 nm の直径をもつポアを形成すると結論付けた。今後は他のユニットを追加し、輸送タンパク質がアンフォールドを受け輸送する動的な解析を行う予定である。

(養王田 正文 東京農工大学大学院工学研究院・A01 公募研究代表者)

新学術領域研究「動的秩序と機能」

今後の活動予定

- ・ 第 5 回国際シンポジウム
日時: 2017 年 1 月 21 日 (土) ~ 22 日 (日)
場所: 東京大学駒場キャンパス
<http://seimei.ims.ac.jp/event/20170121.html>
- ・ 平成 29 年度全体班会議
日時: 2017 年 6 月 2 日 (金) ~ 5 日 (月)
場所: 沖縄科学技術大学院大学
<https://www.oist.jp/ja>



研究紹介:

分子性液体中の
拡散律速反応理論の開発

笠原健人
(京都大学工学研究科・
博士後期課程三回生)



佐藤啓文
(京都大学工学研究科・
A01 計画研究代表者)



分子と分子集団の離散集合を理解する上で、拡散過程は中心的な役割を担う。また、分子科学における中心的課題の一つとして古くから研究がなされている。とりわけ蛍光消光反応は拡散律速反応の代表例として数多くの実験データが蓄積されてきている。理論・計算の立場からは、分子動力学法などのシミュレーションに基づく研究とともに、拡散方程式を直接扱う代数的・解析的なアプローチもなされている。後者は、現象をより体系的に理解する上で有効であると考えられる。しかし、広く一般に利用されている Smoluchowski 方程式では、分子形状を球形と仮定する、いわゆる単純液体しか扱うことができない。分子同士の相対配向が、実際の反応あるいは拡散過程において本質的な役割を担うであろうことは容易に想像が付き、こうした単純液体に基づくアプローチが十分でないことは古くから認識されていた。しかし、分子間の相対的な並進・回転をそのまま扱おうとすると、それらに由来する 6 次元の複雑な方程式となってしまう、現実的な処方箋であるとは言い難い。

本研究では、相互作用点モデルに基づく記述に基づくことで、分子配向に対するこうした困難を回避しながら、多原子分子系に適用可能な新しい Smoluchowski 方程式の導出に初めて成功した。具体的には相互作用点の密度場に対して Zwanzig-Mori 射

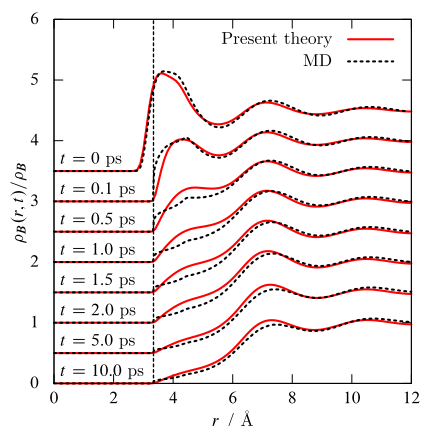


図 1 二原子分子系における時間発展

影演算子法によって得た一般化 Langevin 方程式と、3D-RISM-UU 方程式を組み合わせることで方程式を得ている。

図 1 に、二原子分子 (N_2 などに相当する) について、新しい方程式に基づいて得られた結果を分子動力学シミュレーションと比較して示した。導出の過程で用いられている慣性項の無視などの近似の影響で、0.5 から 2ps 程度の比較的短い時間領域では若干の差異が見られるが、5ps 以降の長時間極限では両者は極めてよく一致している。

既に報告した通り、本研究を中心になって進めた笠原は第 19 回理論化学討論会において「最優秀ポスター賞」を受賞した[ニュースレター第 36 号]。さらに 2016 年 9 月に神戸にて開催された第 10 回分子科学討論会 2016 においても「優秀講演賞」を受賞している。同学会は、分子科学会の主催により毎年一回開催される、物理化学分野における最も大きく、権威ある討論会の一つである。優秀講演賞は 33 才未満もしくは学生の口頭発表を対象としたものであり、今回は 7 件が受賞している。今後は、より現実的な分子系へ同法を展開することを企図しており、実験研究者と協力しつつ拡散過程に対する理解を深められるものと期待している。

上記研究は J. Chem. Phys. に発表されました。

"A theory of diffusion controlled reactions in polyatomic molecule system", Kento Kasahara, and Hirofumi Sato
J. Chem. Phys., **145**, 194502, (2016),

DOI: [10.1063/1.4967400](https://doi.org/10.1063/1.4967400)



研究紹介:

ピラミッド型分子の
エネルギーランドスケープ

吉田悠一郎
(京都大学工学研究科・
修士課程二回生)

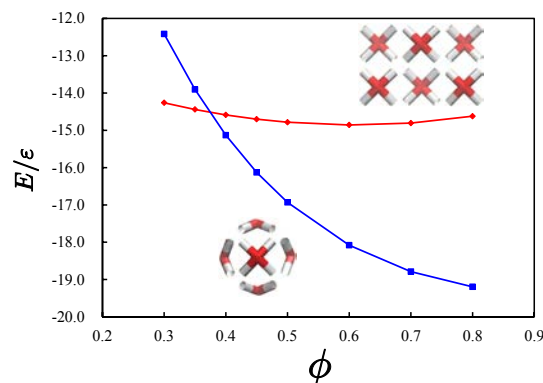


佐藤啓文
(京都大学工学研究科・
A01 計画研究代表者)



幾何構造は分子を特徴づける最も大きな要素の一つである。自己集合によって形成される構造体の幾何的特徴は、それを構成している個別の構成要素（分子）の幾何構造に帰着し、両者を結び付けて考えることができるはずである。事実、A02 班の佐藤班員らはこうした性質を積極的に利用してさまざまな形状の自己集合分子の合成に成功している[ニュースレター36号など]。実際の分子系では、金属に対する配位結合など、化学結合に特有の強い方向性が鍵となることが多く、こうした局所的な結合が集積することで全体の構造が決定される。一方で、幾何的特徴により着目しながら、抽象化を押し進めたらどうなるのだろうか？例えばウィルスカブシドでは *triangulation number* という観点から、サブユニットと全体の関係が直接的に整理されている。もちろん、化学反応によって新しい共有結合が形成されるなど、分子は幾何構造を大きく変えることもあり、問題は複雑である。それならばどのように複雑なのだろうか？

A02 班の平岡班長らにより開発され、A01 班の立川班員らとともに精力的に研究が進められているナノキューブは、平面状の分子が6つ集合して立方体構造を形成する。そこで、ウィルスカブシドで提案された



五角錐型のモデルを基に、底面が正方形である四角錐（ピラミッド）型分子モデルを作成し、それら6つの集合過程を考察した。このモデルでは底面の4つの頂点が互いに引力的に、ピラミッドの頂点が反撥的に相互作用する。昨年度の国際シンポジウムで招待講演をされた Cambridge 大学 Wales 教授らが開発して来た Basin-hopping 法を用い、彼らと協力しながら、この系のエネルギー地形を徹底的に調べた。

図は、6分子からなる系について得られた結果の一部で、横軸φはピラミッドの「高さ」に、縦軸はエネルギーに相当している。この系では立方体構造の他に、シート型の構造の6量体が存在しており、両者の相対的な安定性はピラミッドの高さによって入れ替わってしまうことが分る。この系を網羅的に調べると、この両者以外に数千以上の安定構造が存在していることが明らかとなり、しかも上述のように、φの変化によって最安定構造はもとより、全体のエネルギー地形 (Energy landscape) も大きく変わることが分った。

中心となって研究を進めた吉田は2016年10月に上海で開催された The 4th International Conference on Molecular Simulation においてこの成果を発表し、Best Poster Award を受賞した。また研究を発表した *Chem. Phys. Lett.* においては、Editor's choice に採択されただけでなく、同誌の表紙も飾った ([こちら](#))。

"Potential energy landscapes of tetragonal pyramid molecules" Yuichiro Yoshida, Hirofumi Sato, John W. R. Morgan, and David J. Wales, *Chem. Phys. Lett.*, **145**, 194502, (2016), DOI: [10.1016/j.cplett.2016.09.058](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2016.09.058)



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 41

January, 2017

活動報告： 「細胞を創る」研究会 9.0



栗原顕輔

(自然科学研究機構 岡崎統合
バイオサイエンスセンター・A03
計画研究分担者)



平成28年11月21日-22日の日程で、『細胞を創る』研究会9.0 (<http://jcsr.org/sympo2016/>) が、本新学術領域共催のもと、早稲田大学国際会議場井深大記念ホールで開催されました。今年度は岩崎秀雄大会実行委員長(早稲田大)、清水義宏プログラム委員長(理化学研究所)、藤原慶大会運営事務局長(慶應大)の先生方を中心に運営され、口頭講演20件、ポスター発表79件、総参加者数264名の研究会となりました。今年度は、平成19年のキックオフイベント『細胞を創る』研究会0.0から数えて10回目の開催となりました。

『細胞を創る』研究会は、さまざまな分野の研究者が独自の実験手法で細胞の再構築をおこない、その過程で互いに生命の本質への理解を深めていくことを目的としています。そのため本会の特徴として、生物学・物理学・化学の分野以外の研究者らとともに、「生命とはなにか」、「細胞を創ることとはどのような意味があるのか」などについて、多角的に議論することを重要視しています。また、「様々な分子を組み上げていく過程で、高次の現象を発現させる」という本研究会のアプローチは、本新学術領域の「生命分子の動的な秩序形成が高次機能を発現することを分子科学から解明する」という目標と相補関係のように思います。

本年度は2名の先生の基調講演がありました。石渡信一先生(早稲田大名誉教授)には単一細胞の温度計測や外力による細胞分裂の制御に関するご研究の紹介

がありました。北野宏明先生(システム・バイオロジー研究機構)は、人工知能の最近の動向から人工生命への展開までをユーモアを交えながら講演されていました。

本研究会では併せて合計4つのセッションが企画されました。細胞の設計・構築・計測・起源のほかに、細胞を創ることの社会的意義などについての講演と議論がありました。以下、参考までにプログラムと講演者名を掲載しました(敬称略)。

1. 「細胞をデザインする」
岡田真里子(理化学研究所)・福田弘和(大阪府立大)・糸昭苑(東工大)・窪田亮(京大)・加納ふみ(東工大)
2. 「細胞を作って・測って・利用するテクノロジーの最前線」
守屋央朗(岡山大)・宮崎牧人(早稲田大)・若本祐一(京大)・酒井宏水(奈良県立医科大)・上村想太郎(京大)
3. 「細胞の起源と創成」
武村政春(東京理科大)・大島拓(奈良先端大)・車兪澈(東工大)・栗原顕輔(分子研)・藤島皓介(NASA / 東工大)
4. 「物質と生命の人文学」
林真理(工学院大)・横山輝雄(南山大)・奥村大介(京大)



本研究会の集合写真

次回は、10周年の平成29年10月中旬-下旬ごろに齋藤博英実行委員長(京都大学iPSセンター)のもと、京都教育文化センターでの開催が予定されています。皆様もぜひご参加ください。



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 41

January, 2017

活動報告：次世代脳プロジェクト 冬のシンポジウム

加藤晃一

(自然科学研究機構 岡崎統合バイ
オサイエンスセンター・A03 計画研
究代表者)



稲垣直之

(奈良先端科学技術大学院大学・バ
イオサイエンス研究科・A03 計画研
究代表者)



本領域は2016年12月19日-21日の3日間にわたって一橋大学・一橋講堂にて開催された「次世代脳プロジェクト 冬のシンポジウム」を共催いたしました。このなかで初日の午後に、「グリアアセンブリによる脳機能発現の制御と病態」(略称:グリアアセンブリ、領域代表:池中一裕先生)と「温度を基軸とした生命現象の統合的理解」(略称:温度生物学、領域代表:富永真琴先生)との合同シンポジウムを開催しました。

次世代脳プロジェクトは、脳関連の科研費・新学術領域研究および生理学研究の支援のもと進められている、コミュニティ発信の事業で、我が国の脳科学研究の更なる発展と次世代を担う中堅・若手研究者の育成を目指すものです。世話人代表をされている池の中一裕先生は、岡崎統合バイオサイエンスセンターのセンター長として融合領域研究拠点の形成に尽力されています。そうした経験を踏まえて、生命科学の他の分野と同様に、脳科学の分野でも従来の枠組みにおさまらない、異分野との連携・融合が重要な課題という深い認識に基づいて今回の合同シンポジウムを企画されました。そのため、3つの新学術領域の領域代表はいずれも岡崎統合バイオサイエンスセンターのメンバーです。本領域からは、加藤、稲垣の両名が参加して講演を行いました。以下に演題を記します。

加藤晃一「生命分子システムの秩序形成のダイナミクス」

稲垣直之「タンパク質の集合・離脱と力の発生による神経軸索の伸長とガイダンスのメカニズム」

富永真琴「温度感知の分子メカニズム」

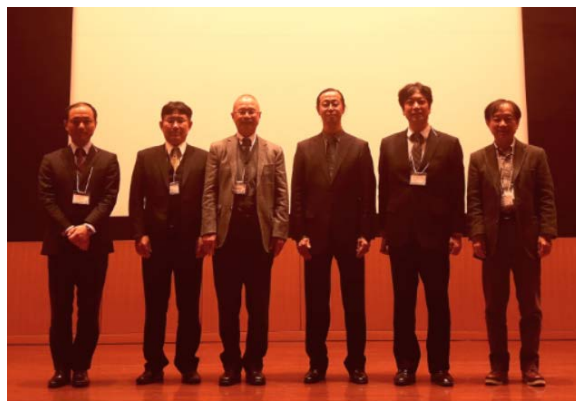
中村和弘「環境温度・環境ストレスから生命を守る神経回路」

池中一裕「グリアアセンブリによる脳機能発現の制御と病態」

伊藤 啓「ショウジョウバエのグリア細胞からみたグリア細胞の進化」

このように「脳」をキーワードにした分子レベルから個体レベルに至る先端的研究アプローチを用いて得られつつある成果と、脳科学の今後の展望について議論を深める場となりました。加藤は本領域の趣旨を説明するとともに、脳科学にかかわる本領域の研究成果をいくつか紹介いたしました。特に、奥村班員によるアミロイド線維の分子動力学シミュレーションの成果は異分野の研究者の関心をよび、フロアから活発な質問を受けました。稲垣はタンパク質の離合集散と外部環境との相互作用によっていかに神経細胞が精緻な神経回路を構築してゆくのか、本領域で得られた研究成果を紹介いたしました。聴衆の中には人文系を専門とされる方もおられて議論に参加され、まさに異分野融合にふさわしいイベントとなりました。講演終了後も議論が続き、異なる領域で活動する脳神経科学者間の意義深い情報交換の場にもなりました。

こうした新学術領域間の連携を基軸としてサイエンスの異分野融合が今後ますます活発化されていくことでしょう。



講演者の集合写真。異分野の連携・融合の重要性をあらためて実感するイベントでした。



受賞報告

松浦友亮

(大阪大学大学院工学研究科
生命先端工学専攻・A02 公募
研究代表者)



公募研究代表者の松浦友亮が平成 28 年度日本生物工学会大会（平成 28 年 9 月 28～30 日）において平成 28 年度生物工学奨励賞（斎藤賞）を受賞しました。受賞題目は「セルフリータンパク質合成系を用いた進化分子工学技術の開発」で、筆者がこれまでに行ってきたセルフリータンパク質合成系（無細胞翻訳系）を用いて行ってきた研究を評価していただきました。これもこれまで本領域の先生方をはじめとした多くの方々にご指導いただいたおかげです。また、同僚、研究員、学生など苦楽を共にした方々にも深く感謝申し上げます。ありがとうございました。

日本生物工学会は、大阪醸造学会としてスタートし今年で 96 周年を迎える歴史ある学会です。その中でも生物工学奨励賞（斎藤賞）は、生物工学分野の基礎学の進歩に寄与した会員に対し授与されるものであり今年で 52 回を迎える大変歴史が有りがたう栄誉ある賞であります。年齢制限が 45 歳までということで、最初で最後のチャンスだったのですが受賞できて大変うれしく思います。

無細胞翻訳系は試験管内でタンパク質を合成するシステムです。日本は歴史的に無細胞翻訳系に関する研究が盛んで、コムギ胚芽、大腸菌、昆虫細胞由来など多種類のシステムが国内で開発され、販売されています。その中でも筆者が長年用いてきたのが、東京大学の上田卓也先生の研究室で開発された再構成型無細胞翻訳系 PURE system (Shimizu *et al.*, *Nat Biotechnol*, 2001) です。

筆者らは、この PURE system を基本材料として様々な人工生命システムをボトムアップに構築してきました。すなわち既知材料だけを用いて様々な性質や機能を持つ生命システムを再構成してきました。その一つが、細胞サイズのリボソーム内で膜タンパク質を合成

する人工細胞システムです。本システムは再構成系であるために、全ての構成要素の濃度を変更することが可能であるという生細胞にはない特性があります。

筆者らは、これまでに人工細胞システムを用いて、膜タンパク質の進化分子工学、細胞疑似環境での膜タンパク質の機能解析などを行ってきました。本研究領域の公募研究では、より細胞らしいシステムをボトムアップで作り上げることを目指して研究を進めているところです。これらの研究成果を評価いただけたと考えております。今回の受賞を励みにさらに領域の研究の発展に貢献していきたいと思っております。特に、領域には専門性の異なる多くの研究者がおられるので、色々な方と一緒にもしろい研究を展開していけたらと考えています。今後ともどうかよろしくお願いいたします。



図 1：日本生物工学会の五味会長（東北大学）と筆者



図 2：大会中の受賞講演で講演する筆者

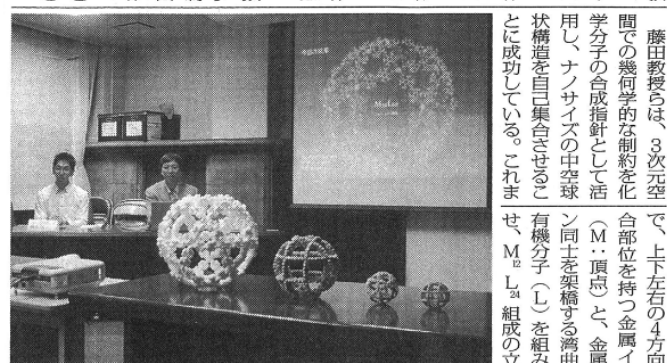
佐藤宗太班員の研究成果が新聞に掲載される

A02 計画研究代表者の佐藤宗太班員の研究成果が科学新聞（2016 年 7 月 15 日）に掲載されました。

多面体の構造持つ新たな分子 ナノサイズカプセル合成

東大 幾何学の定理を活用 機能性酵素研究や創薬などに応用期待

東大大学院の藤田誠教授、藤田大士特任研究員は、高輝度光科学研究センターの熊坂崇氏、水野伸宏氏らと共同で、30の頂点を持つアルキメデスの多面体（二十・十二面体）構造を持つ、新たな分子の合成に成功した。セル・プレスが創刊した新たな化学誌「Chem」に掲載された。



一番左が3Dプリンターで再現した $M_{30}L_{60}$ の構造体

藤田教授らは、3次元空間で、上下左右の4方向に結合部位を持つ金属イオン（ M ：頂点）と、金属イオン同士を架橋する有機分子（ L ）を組み合わせた構造を自己集合させることに成功している。これまで、 $M_{24}L_{24}$ 組成の立方八面体や、 $M_{24}L_{36}$ 組成の斜方立方八面体が自発的に組み上がることを発見している。

M と L の組み合わせでできる3次元構造について、正多面体や半多面体のいずれかになるという仮説を立てると、生成可能な構造は全て M_nL_{2n} の組成を持つ。 n は6、12、24、30、60に絞られる。 $n=6$ 、12、24までの多面体を再現できたが、 $n=24$ と30は構造が近いことから、 $n=30$ を目指しても、 $n=24$ の構造に収束してしまった。

そこで今回、分子のわずかな「たわみ」を設計に取り入れ、精密に自己集合を制御したところ、 $M_{30}L_{60}$ 組成の二十・十二面体を組み上げることができた。実際にX線構造解析をしたところ、設計通りの姿が明らかになった。

この二十・十二面体は、正三角形20枚、正五角形12枚を貼り合わせた対称性の高い形をしており、内径が8.7μm程度の巨大な中空球状構造を持つ。このサイズであれば、平均的な酵素やタンパク質を包み込むことができる。そのため、タンパク質分子構造解析で困難な結晶化をサポートするコンテナとしての役割や機能性酵素の研究や、ドラッグデリバリーシステム（DDS）へも応用されると考えられる。藤田教授は「私たちが作製した中空球状構造は、重要なタンパク質（6〜8μm）を取り込めるサイズにもなり、最先端の生物学に役立つレベルになってきた」と話す。次に目指す、 $M_{60}L_{120}$ の巨大中空分子は10μmを超えるといい、さらに応用範囲が広がると期待する。

その他

日経産業新聞 2016 年 7 月 7 日

読売新聞 2016 年 9 月 11 日



“Dynamical Ordering & Integrated Functions” Newsletter Vol. 41

January, 2017

佐藤宗太班員の研究成果が新聞に掲載される

A02 計画研究代表者の佐藤宗太班員の研究成果が 2016 年 11 月 21 日づけの日経産業新聞に掲載されました。