

# 【新学術領域研究（研究領域提案型）】 複合領域



研究領域名 **発動分子科学：エネルギー変換が拓く自律機能の設計**

東京工業大学・生命理工学院・教授 **きんばら かずし**  
**金原 数**

研究課題番号：18H05418 研究者番号：30282578

## 【本領域の目的】

本領域では、外部エネルギーを受け取ることで機械的な構造変化を起こし、これを利用して別の形のエネルギーへと変換する分子装置を、「発動分子 (molecular engine)」と名付け、これを構築するための基礎学理を築くことを目的としています。このため、これまで異分野として独自に活動してきた合成化学、分子生物学、生物物理学、ソフトマター物理学、計測科学の専門家が連携して叡智を結集することで、ナノスケールの分子素子を組み上げ、さらにそれらをミクロスケールに組織化することにより、高効率でエネルギーを変換できる分子システムの構築を目指します。社会実装可能なデバイスの構築を見据え、様々なエネルギー源の利用可能性を探索します (図1、2)。

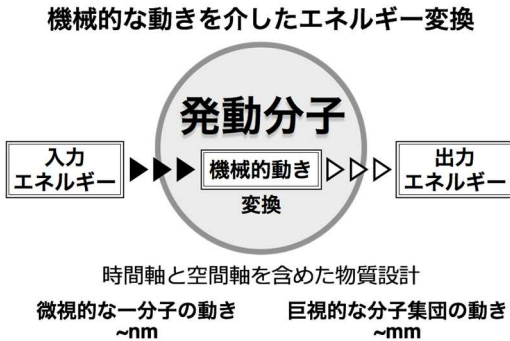


図1 発動分子の概念

## 【本領域の内容】

本領域では、「発動分子科学」の概念を確立するために、比較的単純な構造の小分子、タンパク質のような高次構造形成可能な高分子、これらを集積化した分子集合体、というスケールの異なるそれぞれの階層において、機械的な動きを介したエネルギー変換、すなわち「発動」を実現するための論理の構築を目指します。この目的のため、人工分子機械、生体分子機械、分子集合体研究において実験、計算、理論の各専門分野で実績を挙げている研究者を対象として、**A01:エネルギー変換分子素子の合理的設計**、**B01:エネルギー変換機能を有する分子集団運動の設計**、**C01:発動分子の精密分析**、**C02:発動分子の理論解析**の4つの研究項目を設定しました。A01は合成化学によるボトムアップ構築、遺伝子工学的手法による異種分子間の部品交換やキメラ化、進化分子工学、計算科学による合理設計などにより、多様なエネルギー源を別のエネルギー形態に変換する分子素子の創造を行ないます。B01にお

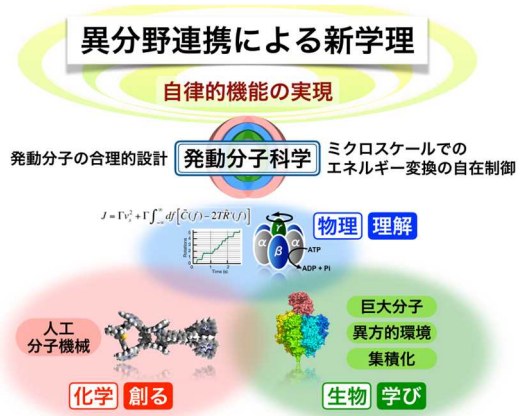


図2 異分野連携による発動分子科学の推進

いては結晶、液晶、高分子フィルムなどによる、人工分子、生体分子、ハイブリッド分子の集積化及び集団運動を利用したエネルギー変換に挑戦します。C01では高速AFM、光学顕微鏡1分子計測、X線結晶構造解析、物理化学解析による発動分子の精密解析から、分子素子や分子の集団運動によるエネルギー変換機構の理解及び細胞外での応用を容易にする耐熱化予測技術などの開発を行ないます。C02は計算科学や物理学的手法により、分子素子及び分子の集団運動におけるエネルギー変換メカニズムを解明し、発動分子の *de novo* 設計への道筋を開きます。

## 【期待される成果と意義】

機械的な動きにより、化学結合や、電気、力学、光等の様々な形態で貯蔵されたエネルギーを、利用可能な他のエネルギーに高効率で変換するエネルギー変換分子システムの設計指針が得られる。これにより、自律的なエネルギー変換の新しい可能性を提案できると期待されます。

## 【キーワード】

分子機械：外部から刺激を加えることにより機械のように物理的に動く分子

## 【研究期間と研究経費】

平成30年度－34年度  
1,193,600千円

## 【ホームページ等】

<http://www.molecular-engine.bio.titech.ac.jp>



**Title of Project : Molecular Engine: Design of Autonomous Functions through Energy Conversion**

Kazushi Kinbara  
(Tokyo Institute of Technology, School of Life Science and Technology, Professor)

Research Project Number : 18H05418    Researcher Number : 30282578

**【Purpose of the Research Project】**

In this research area, we define a molecular device that causes a mechanical structural change by receiving external energy and converts it into another form of energy, as "molecular engine." It is aimed at establishing basic scientific disciplines for building molecular engines. For this purpose, experts in synthetic chemistry, molecular biology, biophysics, soft matter physics, computer science, which have been developed independently as different fields, work together to unite wisdom and thereby create a new research field for nanoscale molecular devices and systems. Looking to construct social implementable devices, we explore the availability of various energy sources (Figs. 1 and 2).

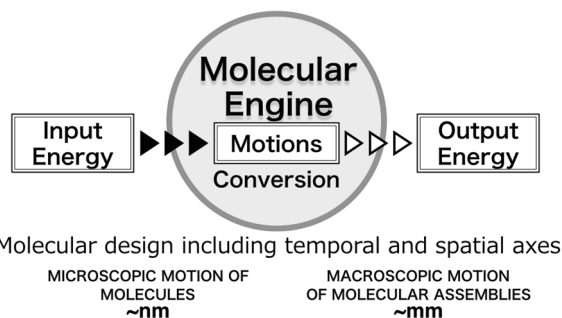


Fig. 1 Concept of "molecular engine."

**【Content of the Research Project】**

In this area, in order to establish the concept of "molecular engine", small molecules with a relatively simple structure, macromolecules capable of forming a higher order structure such as a protein, molecular aggregates in which these are integrated. In each of the different hierarchies, we aim to construct disciplines to realize energy conversion via mechanical motion. For this purpose, the following four research groups are organized, including experimental, computational, and theoretical science with artificial molecular machines, biomolecular machines and molecular assemblies. A01: Rational design of molecular units for energy conversion, B01: Movement of molecular assemblies with energy conversion function, C01: Detection and measurement of

molecular engines, C02: Theoretical analysis of energy conversion by molecular engines.

**【Expected Research Achievements and Scientific Significance】**

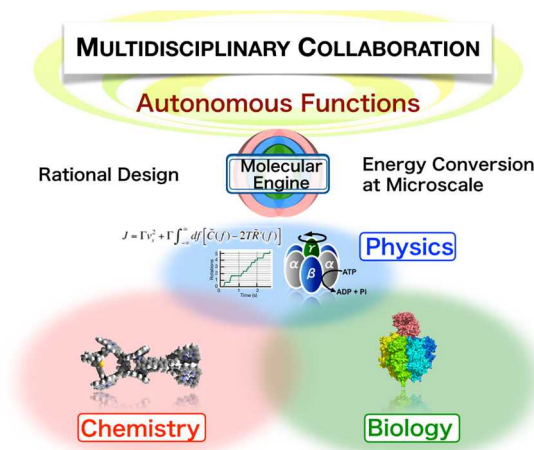


Fig. 2 Multidisciplinary collaboration.

Design principles for the energy conversion by the mechanical motion of molecular systems, that highly efficiently converts various energies such as chemical-bond, electrical, mechanical and, light energy to other usable energies is established. It is expected that new possibilities of energy conversion systems will be proposed.

**【Key Word】**

Molecular Machine: molecule that moves physically like a machine by applying external stimuli

**【Term of Project】**      FY2018-2022

**【Budget Allocation】**    1,193,600 Thousand Yen

**【Homepage Address and Other Contact Information】**

<http://www.molecular-engine.bio.titech.ac.jp>