



研究代表者	京都大学・工学研究科 化学理工学専攻・教授	
	前多 裕介（まえだ ゆうすけ）	研究者番号：30557210
研究課題情報	課題番号：26B202	研究期間：2026年度～2028年度
	キーワード：非平衡系、分子モーター、ソフト多孔性錯体、ゆらぎ、構造相転移	

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

本研究領域「**確率駆動化学**」は、不規則な分子運動や不均一な化学反応など、平均値だけでは捉えられない確率的なゆらぎを活用する化学エンジンの基礎学理を打ち立てるものである。そのために、ミクロな分子の動きと反応の過程を計測・評価するゆらぎのエネルギー論を拡張し、分子モーターの動作原理を解明する。さらに、規則性と柔軟性を兼ね備えた多孔性構造体を用い、エネルギーの抽出・貯蔵・変換が可能な確率駆動多孔体エンジン**Stochastic Engine by Active Macroporous framework (STEAM)**を構築する。ゆらぎをエネルギー源とするSTEAMから駆動力を得る革新的材料を創成し、化学熱力学の法則を質的に変革することで、非平衡物理学から化学工学を横断する新たな学術領域を切り拓く。

●研究の背景

自然界の多くの物質系は、エネルギー流入により熱平衡から外れた非平衡状態にある。とくに生命システムはその典型であり、細胞内の物質輸送や代謝を担う分子モーターは、化学反応によって得られたエネルギーを効率的に運動に変換し、化学エンジンとして機能している（図1-①）。本来はランダムに動く分子が一方へ運動することは、確率的なゆらぎを抽出し、エネルギーを利用する機構が備わっていることを示唆する。

一方で、分子運動のゆらぎなどを化学エネルギーとして貯蔵する物質として本研究で注目するのが、ナノスケールの細孔構造と高い比表面積を持つ多孔性金属錯体（MOF: Metal-Organic Framework）である。特にSoft MOFと呼ばれる物質群は、外部のガスや高分子を細孔内に取り込み、外圧に対して急峻に吸着量が変化する「ゲート型吸着」と呼ばれる構造相転移を示す（図1-②）。ゆらぎとエネルギーの視点から見れば、Soft MOFは構造変化によって分子を取り込み放出する材料であり、燃料を搭載しそれを吐き出すことで推進力を得ることが可能な、ナノスケールのエンジンとも捉えられる（図1-③）。

●研究の目的

本研究では“分子モーターのゆらぎと運動”と“Soft MOFのゲート型吸着”という一見異なる現象に共通する原理を解明し、化学エネルギーで動作する化学エンジンSTEAMを構築する。これにより、分子運動や化学反応のゆらぎをエネルギー源とする新たな学理「確率駆動化学」を創出する。



図1 本領域「確率駆動化学」の概要図

●確率駆動多孔体エンジン STEAM Engine by Active Macroporous framework

Soft MOFは吸着分子の配置を整えながらも、吸着分子の運動を完全には拘束せず、ゆらぎながら化学反応を制御している。その動作には、吸着分子と多孔性構造の双方のゆらぎが関連している。本研究では、分子運動と構造体の確率的性質を利用し、化学エネルギーの抽出・貯蔵、力学的エネルギーへの変換を実現する**確率駆動多孔体エンジンSTEAM**を構築する。

STEAMは、捕捉粒子の有無で二状態をとり、ソフトマテリアルから作られる多孔性構造体である（図2）。その動作原理の解明は、ゆらぎを利用して高効率に動作する次世代の自己駆動システム（アクティブマター）の確立につながる。

さらに、STEAMの構築は、液相で動作可能なSoft MOFの設計指針を与えると共に、実空間でユニットセルの構造転移の顕微鏡観察を可能にするなど、幅広い学術的インパクトを持つ。

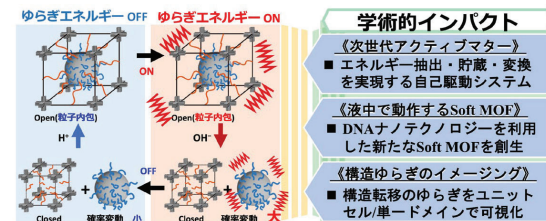


図2 確率駆動多孔体エンジンの概要と期待されるインパクト

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●計画研究の研究内容

本領域では非平衡物理学・生物物理学・化学工学・合成化学が結集した組織となっている。4つの計画研究を実施し、確率駆動性をあらわに取り入れたエネルギー論・構造論の統一モデルを構築する（図3）。

計画研究A01：分子モーターの確率的な運動の解析とともに、ゆらぎからエネルギーを抽出・貯蔵・変換するためのエネルギー論を構築する。化学エンジンSTEAMで動作するアクティブマターの創出と運動解析を行う。

計画研究A02：DNA人工分子モーターのレール設計による高性能化と確率駆動的動作原理の解明を目指す。また、DNAナノテクノロジーを導入し、STEAMの格子構造を構築する。

計画研究B01：Soft MOFのゲート吸着挙動を単一ドメインの確率駆動的相転移として捉え、構造転移と力学応答を高分解能で計測・解析することで、真の熱力学パラメータを明らかにし、空間不均一性の制御を通じてSoft MOFとSTEAMの材料設計指針を確立する。

計画研究B02：Soft MOFの構造特性と化学反応の確率性を制御し、構造内の連鎖的分子変換と協同的に進行する構造相転移を実証する。反応進行の時空間的な可視化解析により、Soft MOFとSTEAMの空間拘束トポロジーを操る合成化学技術を確認する。

●領域運営の方針と新たな学術領域の形成

円滑な領域推進と領域内連携のため、総括班に変革WG・理論WG・合成WGの3つのワーキンググループで構成する（図4）。

世界的にも、非平衡物理学と化学工学は学術融合の機運が高まっている。本領域研究の成果は生物物理学分野の生体分子モーターをはじめ、CO₂ガス吸着材料、光化学反応、エネルギーデバイスに波及し、新たな物理学・化学・ナノ生命科学の新興領域を拓くものとなる。

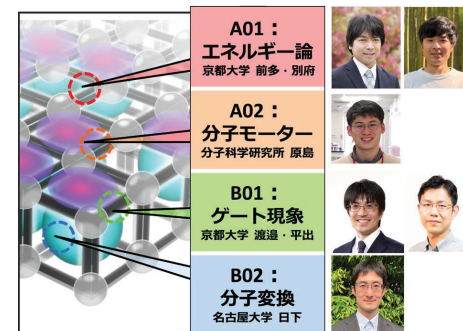


図3 4つの計画研究と領域構想上の位置付け



図4 領域運営の方針と総括班の構成

