

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	藤田 大士
研究機関名	国立大学法人 京都大学
所属部署名	高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 (iCeMS)
役職名	准教授
研究課題名	分子スーツ装着による生体分子の機能強化と動態制御
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

2022 年度の研究においては、初年度に「感覚的」に掴んだ設計指針を、理論としてきちんと整備することに取り組んだ。具体的には、代数的グラフ理論的な手法を用い、分子自己集合系の基礎理論の構築を試みたところ、このアプローチは想像以上に進捗した。また当初想定よりもはるかに大きな潜在性を有している事に気付いた。詳細は割愛するが、上記理論の具体例であるシンプルな 2 成分系においても、特定の 2 種類のノードの組合せが、自己集合系設計の観点から有益であることが導かれた。また一定規則で構成要素を取り除くことで、関連する新構造を作れる事も発見した。これら成果は応用上も重要であるため、なるべく特定の分子構造に限定されない、広範な特許を取得する計画を立てており、現在特許戦略を練っている。これら特許は、2023 年度第三四半期を目標に出願計画であり、現在複数種の異なるマテリアルでの合成実証データを収集中である。この基礎理論整備は、当初計画の長期ビジョンで示した様々な形状のケージ分子（分子スーツ）の合理的な設計にも役立つと同時に、「どうして球状ウイルスは正二十面体の対称性を有しているか？」「自然（自己集合系）は対称性を好むのか？」といった長年の基礎科学的問いにも、一定の説明を示す事ができる可能性がある。次年度以降も、記述法も含めた理論の整備を通じ、自己集合現象の数理的な理解、そして有用な物質創成を目指す。