

※本件は、高エネルギー加速器研究機構（KEK）フォトンファクトリー（PF）PF-AR NE3A を利用した研究成果の公表です。

報道機関向け配布資料

2016年11月17日午後3時 報道解禁

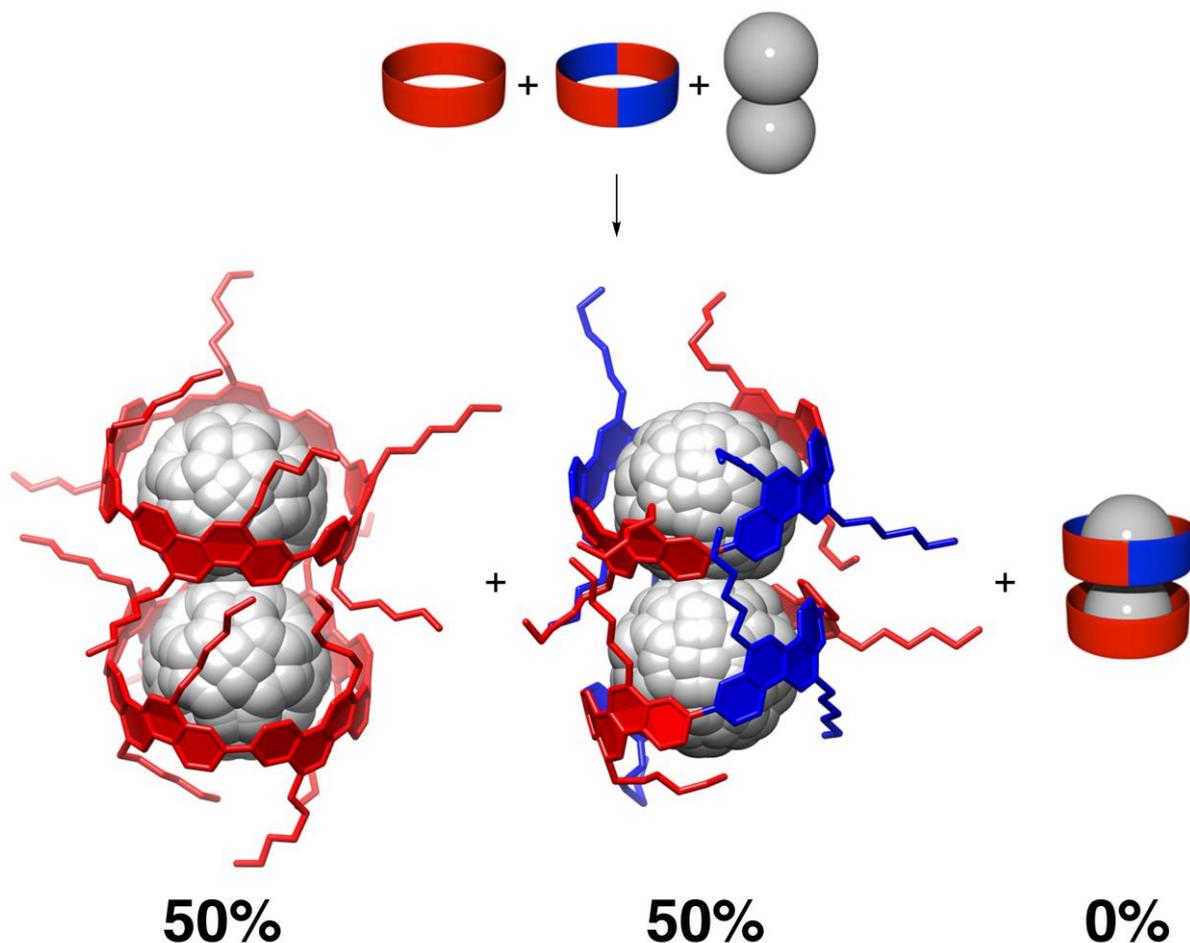
国立大学法人 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構（AIMR）

国立研究開発法人 科学技術振興機構（JST）

国立大学法人 東京大学 大学院理学系研究科

## 二輪型分子ベアリングの自発的・自己選別組み上げ

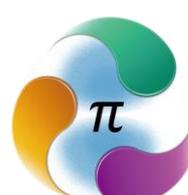
「相手を選んで自ら組み上がる」



表紙図. 炭素と水素だけでできた「輪状分子」が、炭素だけでできた「車軸分子」に自発的にはまり「二輪型分子ベアリング」が組み上がる。二種類の輪状分子と車軸分子を混ぜると、同じもの同士が選別されて組み上がる「自己選別組み上げ」という現象が見つかった（同種二輪型分子ベアリングが50%ずつできあがり、異種混合二輪型分子ベアリングは0%だった）。炭素と水素という二つの元素を使った単純な分子でも、洗練された分子認識である「自己選別」が可能であることが初めて示された。



東北大学



## 1 発表タイトル

# 二輪型分子ベアリングの自発的・自己選別組み上げ

## 「相手を選んで自ら組み上がる」

**2 発表者** 東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR)  
科学技術振興機構 (JST) ERATO 磯部縮退  $\pi$  集積プロジェクト  
東京大学大学院理学系研究科

磯部 寛之

## 3 発表概要

東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) の磯部寛之主任研究者 (JST ERATO 磯部縮退  $\pi$  集積プロジェクト研究総括、東京大学大学院理学系研究科教授) の研究グループは、炭素と水素のみからなる分子を使い「二輪型分子ベアリング」が「自ら (自発的)」かつ「相手を選んで (自己選別的)」に組み上がることを見いだしました。

## 4 発表内容

選別 (ソーティング、*sorting*) と組み上げ (アセンブリ、*assembly*) という言葉は機械の組み上げ工程での工学用語として汎用されています。機械を間違いのないようにつくり出すには、必要な部品を「選別」しながら「組み上げ」ることが重要であるためです。ナノサイズの機械の創造と活用を目指す「分子機械」の分野では、部品組み上げの「選別」はより重要となります。分子の世界での小さな機械の組み上げの際には、それをつくるための装置をつくり、利用することができないためです。一方で、複雑な構造により精密な機能をもつ生物分子では、選別と組み上げが同時に実現されています。複雑な分子構造の中に、分子の間の力や認識 (分子間力、分子認識) を巧妙に配置することで、相手を選んで自ら組み上がる「自己選別組み上げ」が実現されているのです。

東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) の磯部寛之主任研究者 (JST ERATO 磯部縮退  $\pi$  集積プロジェクト研究総括、東京大学大学院理学系研究科教授) の研究グループは、炭素と水素のみからなる単純な分子 (二元素分子) においても「自己選別組み上げ」が実現可能であることを見いだしました。二元素分子と炭素分子からなる「二輪型分子ベアリング」が「自ら (自発的)」かつ「相手を選んで (自己選別的)」組み上がるが見いだされたものです。

研究グループでは、これまでに輪状分子 (有限長カーボンナノチューブ分子) と球状分子 (フラレン) とが強固な力で結びつき、「分子ベアリング」が組み上がることを報告していました。強い力で組み上がりながらも、内部の球状分子がくるくると回る、機械的な動きを実現した分子機械です (参照記者発表: 2015年3月2日、2014年5月27日、2013年1月9日)。

今回の研究では、球状分子を二つ連ね「車軸」のようにした分子 ( $C_{120}$ ) を使うと、ベアリングの組み上げの際に「自己選別組み上げ」が起こることを発見しました。まず、「輪状分子」と「車軸分子」とを混ぜると「二輪型分子ベアリング」が組み上がります。輪状分子としては、部材が同一で形がほんの少し違う二種を用意しました (図中の赤い輪と赤・青の輪; 化学組成と分子量が同じ物質)。すると両者はそれぞれ、車軸分子と同じ強さ・同じ力で「二輪型分子ベアリング」を形

成しました (図 1)。次に、研究グループは、赤の輪状分子と赤・青の輪状分子の二種を混合して車軸分子に混ぜました。すると、予想に反して異種混合の二輪型分子ベアリングは全くできませんでした。赤の輪状分子は赤の輪状分子と組となり、赤・青の輪状分子は赤・青の輪状分子と組となることで、同種二輪型分子ベアリングのみができあがったのです (図 2)。実際の実験では、赤の輪状分子と赤・青の輪状分子をそれぞれ 200,000,000,000,000 個 (二十京個) ずつ、200,000,000,000,000 個 (二十京個) の車軸分子と混ぜ、異種混合二輪型分子ベアリングが 0 個、同種二輪型分子ベアリングがそれぞれ 100,000,000,000,000 個 (十京個) ずつできあがるという高精度な選別が実現されました。自分自身と同じもの同士が選ばれることから、「ナルシシスティック自己選別 (narcissistic self-sorting)」と呼ばれる現象です。この現象は、複雑な構造をもつ生物分子の世界では知られていましたが、今回の研究のように二つの元素のみからなる単純な分子によっても実現されると思ひも寄らないことでした。なお、研究グループでは、二輪型分子ベアリングの構造を単結晶 X 線構造解析により解き明かしており (図 3、4)、内部の車軸分子が回転している可能性を見いだしています。

本研究成果は、高度・精緻な分子認識が、炭素と水素のみからなる分子間に働く力 (ファンデルワールス力) のみで実現できることを示しました。「自己選別現象がどのようにして起こるのか」という理解までも変革させ得る発見です。

この成果はまた、ナノサイズの分子機械の世界でも「部品が自ら相手を選び、正しい組み合わせで望みの構造ができあがる」ことが可能であることを示した点で重要です。今後の分子機械研究において、自己選別法を活用することで、複雑な機械構造、さらには新しい機能が生み出されることが期待されます。

この研究が受けた主な支援は以下の通りです：

JST 戦略的創造研究推進事業総括実施型研究 (ERATO) 「磯部縮退 $\pi$ 集積プロジェクト」  
世界トップレベル研究拠点プログラム (WPI)  
科学研究費助成事業

また、X 線回折による分子構造決定には、一部、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) フォトンファクトリー (PF) PF-AR NE3A 及び SPring-8 BL38B1 の最先端設備が活用されています。

研究成果は、国際学術雑誌「アンゲバンテ・ケミ (Angewandte Chemie International Edition)」に 11 月 16 日に掲載されました。

研究者の氏名・所属：

松野 太輔 (まつの たいすけ) : ERATO 磯部縮退 $\pi$ 集積プロジェクト 研究員  
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) 助教  
(現所属：東京大学大学院理学系研究科 特任助教)

佐藤 宗太 (さとう そうた) : ERATO 磯部縮退 $\pi$ 集積プロジェクト グループリーダー  
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) 准教授

横山 温和 (よこやま あつとし) : ERATO 磯部縮退 $\pi$ 集積プロジェクト 研究員  
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) 助教

(現所属：国立高等専門学校機構 佐世保工業高等専門学校 講師)

鎌田 翔 (かまた しょう) : 東北大学大学院理学研究科 大学院生  
磯部 寛之 (いそべ ひろゆき) : 東京大学大学院理学系研究科 教授  
ERATO 磯部縮退 $\pi$ 集積プロジェクト 研究総括  
東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) 主任研究者

## 5 発表雑誌

アングewannte・ケミ (*Angewandte Chemie International Edition*)

論文名 : Self-sorting of two hydrocarbon receptors with one carbonaceous ligand

(和文 : 炭化水素レセプターの炭素性リガンドによる自己選別)

(論文 URL : <http://dx.doi.org/10.1002/anie.201609444>)

## 6 問い合わせ先

東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) 主任研究者 磯部 寛之

Tel: 022-217-6160 (東北大) 03-5841-4162 (東大) Fax: 022-795-6233 Email: [isobe@m.tohoku.ac.jp](mailto:isobe@m.tohoku.ac.jp)

研究室ホームページ : <http://www.jst.go.jp/erato/isobe/>

(JST 事業に関すること)

科学技術振興機構研究プロジェクト推進部 大山 健志

Tel: 03-3512-3528 Fax: 03-3222-2068 Email: [eratowww@jst.go.jp](mailto:eratowww@jst.go.jp)

(報道担当)

東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR) 広報・アウトリーチオフィス

Tel: 022-217-6146 Email: [aimr-outreach@grp.tohoku.ac.jp](mailto:aimr-outreach@grp.tohoku.ac.jp)

科学技術振興機構広報課

Tel: 03-5214-8404 Fax: 03-5214-8432 Email: [jstkoho@jst.go.jp](mailto:jstkoho@jst.go.jp)

東京大学大学院理学系研究科・理学部広報室

Tel: 03-5841-0654 Email: [kouhou@adm.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:kouhou@adm.s.u-tokyo.ac.jp)

## 7 用語解説

### 分子機械

機械的な動きをする分子・分子集合体の呼称であり、「分子マシン」とも呼ばれる。2016年ノーベル化学賞授賞対象。ナノサイズの機械として、今後、新しい材料の基本構成となることが期待される。

### 化学組成

分子を構成する元素の種類と原子数を表したもの。本研究で用いられた「車軸分子」は $C_{120}$  (炭素原子120個)の化学組成、「輪状分子」は $C_{120}H_{136}$  (炭素原子120個、水素原子136個)の化学組成をもつ。

### 分子量

分子の「重さ」を表す量で、「相対分子質量」とも呼ばれる。分子が1モル (約6000垓個 ; 「垓」は10の20乗を表す単位) あるときの重さ。すなわち分子量を6000垓で割ると分子一つの重さとなる。本研究で用いられた車軸分子一つの重さは、 $1.5 \times 10^{-21}$  グラム (0.000000000000000000015 グラム)、輪状分子一つの重さは  $1.6 \times 10^{-21}$  グラム (0.000000000000000000016 グラム) である。

## 単結晶 X 線構造解析

原子・分子が整然と並んだ単結晶に X 線を照射すると、回折現象が起こる。この X 線回折を解析すると、結晶内での原子の配置を精密に決定できる。この手法を使うことで、金属、無機塩、有機分子やタンパク質などの結晶構造が解明されてきている。

参考情報 [<http://www.iycr2014.org/>]

## ファンデルワールス力

分子間力のうち、帯電していない中性の分子同士の間働く引力や斥力の総称。相互作用する際の指向性がないことが特徴。指向性がない相互作用であるために、選択・選別には二次的な役割を果たすと考えられてきた。本研究の二輪型分子ベアリングの組み上げの際に働く力はこのファンデルワールス力のみとなっている。

## 参考情報

磯部寛之主任研究者らの代表的な関連先行研究については、以下のプレスリリースもご参照いただけます：

- ・ナフタレンからベルト状分子（2016年6月28日）  
[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2016/20160628\\_000649.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2016/20160628_000649.html)
- ・ナフタレンから全固体リチウムイオン電池の負電極材料（2016年5月16日）  
[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2016/20160516\\_000632.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2016/20160516_000632.html)
- ・トルエンから単層有機 EL の新材料（2015年11月5日）  
[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2015/20151105\\_000587.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2015/20151105_000587.html)
- ・ナノサイズのコマの歳差と自転運動（2015年3月2日）  
[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2015/20150302\\_000541.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2015/20150302_000541.html)
- ・カーボンナノチューブ分子内部の秘密（2014年5月27日）  
[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2014/20140527\\_000468.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2014/20140527_000468.html)
- ・カーボンナノチューブの有限長指標（ものさし）について（2014年1月22日）  
[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2014/20140122\\_000443.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2014/20140122_000443.html)  
<http://www.orgchem2.chem.tohoku.ac.jp/finite/>
- ・顔料からの伸長型有限長カーボンナノチューブの合成について（2013年5月22日）  
[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2013/20130522\\_000388.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/news/press/2013/20130522_000388.html)
- ・有限長カーボンナノチューブ分子を活用した溶液中のナノベアリングについて（2013年1月9日）  
<http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2013/01/press20130108-01.html>
- ・世界初ジグザグ型カーボンナノチューブ分子の化学合成について（2012年7月18日）  
<http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2012/07/press20120710-01web.html>
- ・世界初らせん型カーボンナノチューブ分子の選択的化学合成について（2011年10月12日）  
<http://www.tohoku.ac.jp/japanese/2011/10/press20111006-02.html>

## 8 添付図版

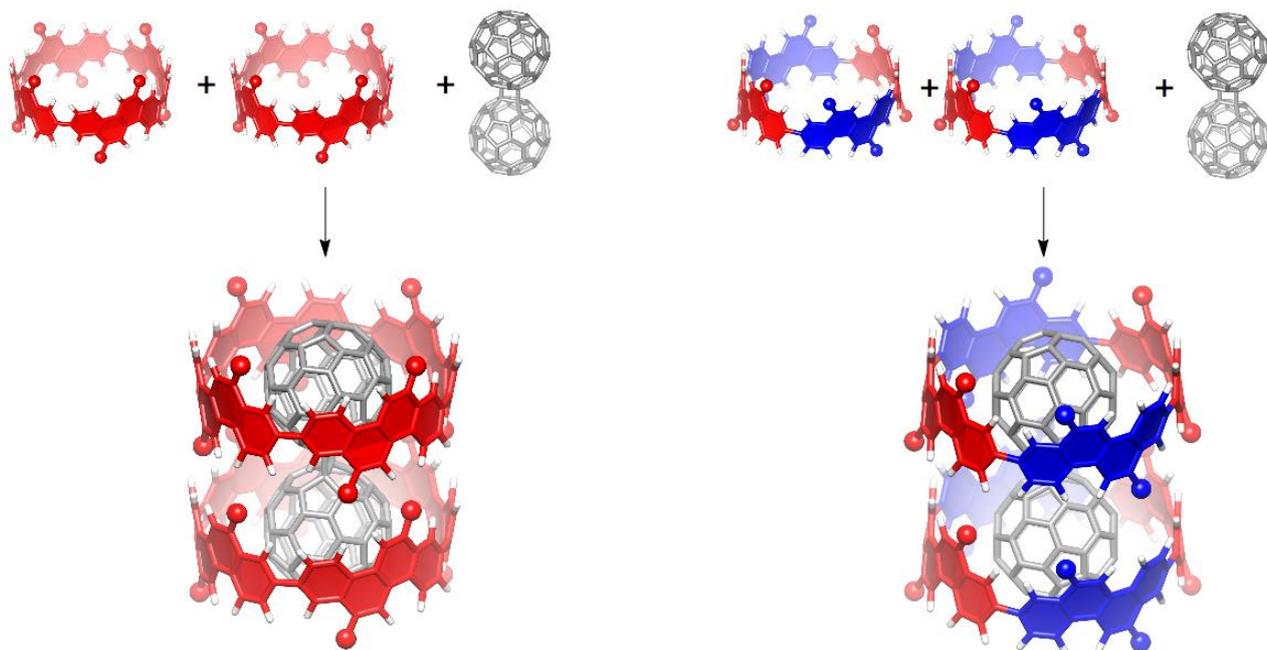


図1.「輪状分子」と「車軸分子」を混ぜると、「二輪型分子ベアリング」が自発的に組み上がる。赤の輪状分子と赤・青の輪状分子では、自発的組み上げの際の会合力はほぼ等しい。

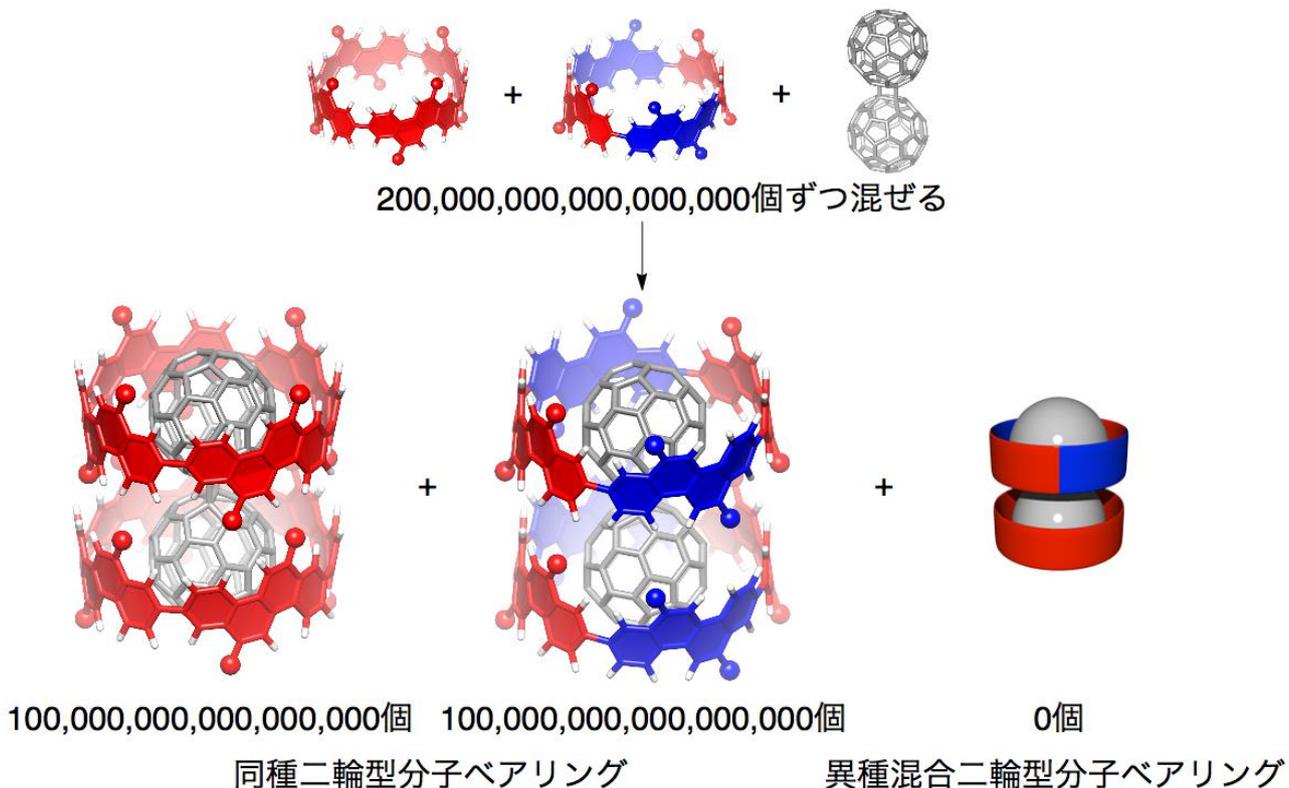


図2. 二輪型分子ベアリングの組み上げの際に観測された自己選別・自発的組み上げ。二種類の輪状分子と車軸分子を同じ数だけ混ぜると、同種二輪型分子ベアリングのみが組み上がり、異種混合二輪型分子ベアリングはできなかった。

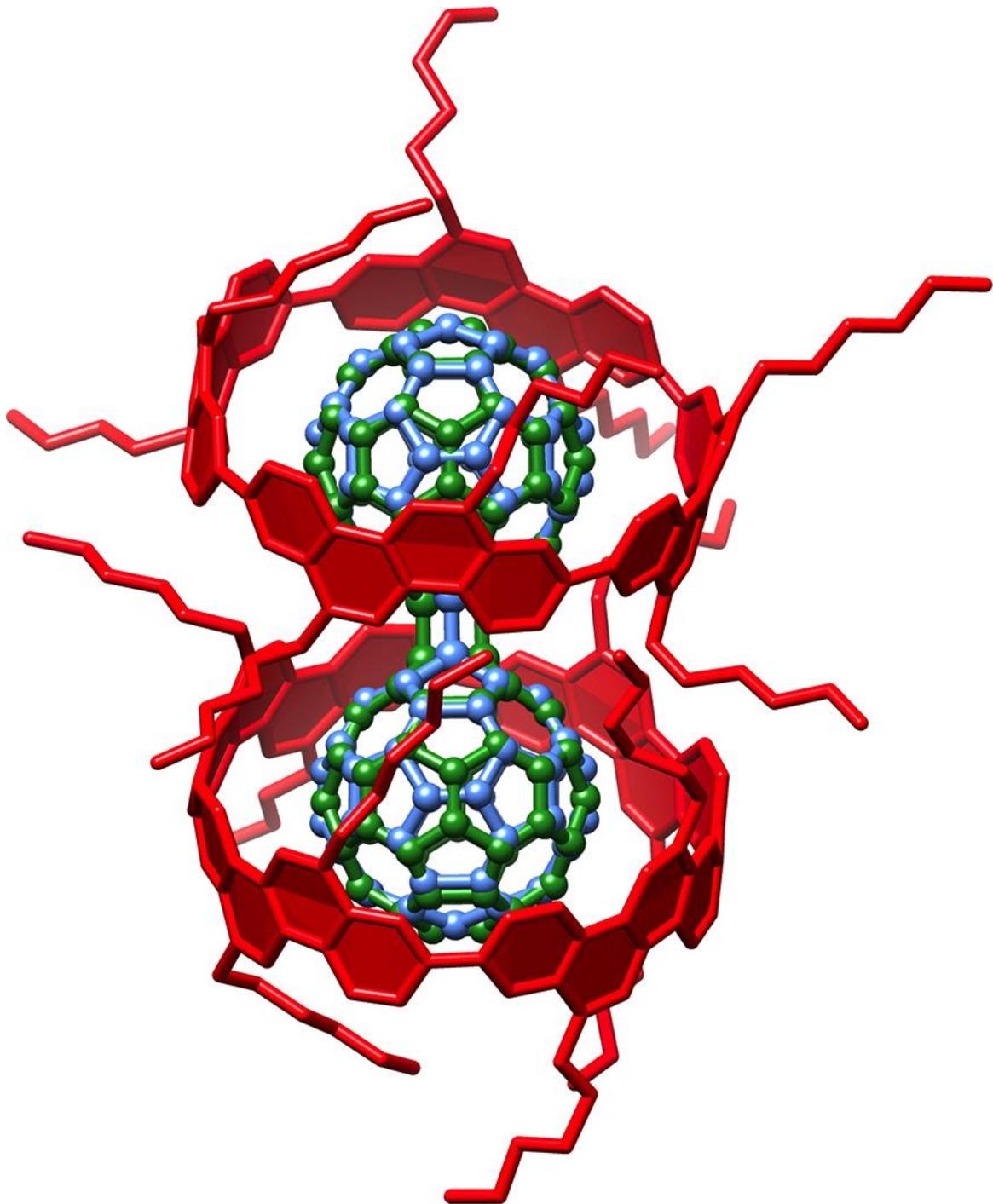


図3. 赤の輪状分子同士が二つ組み上がった「二輪型分子ベアリング」の分子構造。X線構造解析からの実験データ。内部の緑と淡青は回転した車軸分子二種が存在することを示している。

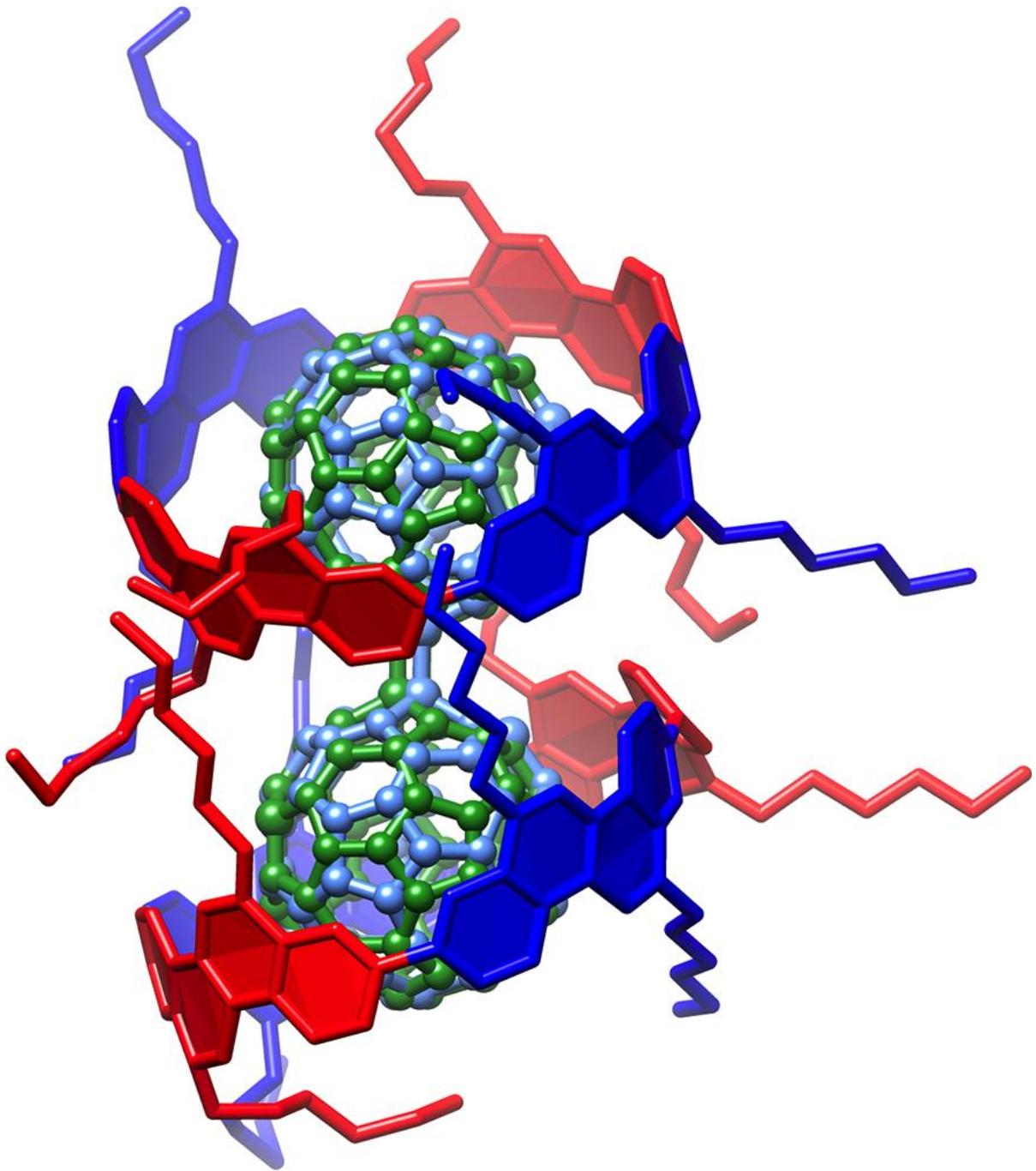


図4. 赤・青の輪状分子同士が二つ組み上がった「二輪型分子ベアリング」の分子構造。X線構造解析からの実験データ。内部の緑と淡青は回転した車軸分子二種が存在することを示している。