

Press Release

2026年5月22日

京都大学アイセムス（高等研究院 物質－細胞統合システム拠点）

国立大学法人東北大学

分子を識別し、色・大きさ・硬さが変わる多孔性ゲル ～金属錯体多面体が分子認識と材料応答をつなぐ～

- ・金属錯体多面体^{※1}（MOP）分子が高分子と連結した多孔性ゲルの合成に成功
- ・ゲスト分子^{※2}を構成する原子の種類を認識し、ゲルネットワークへの取り込みを制御
- ・ゲスト分子の取り込みにより、ゲルの色・大きさ・硬さが変わる

<概要>

京都大学アイセムス（高等研究院 物質－細胞統合システム拠点：WPI-iCeMS）の立石友紀 日本学術振興会特別研究員 PD（当時、現・東北大学学際科学フロンティア研究所助教）と古川修平 教授らの研究グループは、特定の分子を見分け、「どの分子を取り込んだか」という分子レベルの識別情報を、「色」、「大きさ」、「硬さ」の変化として出力する多孔性ゲル「MOPEG ゲル」の開発に成功しました。

分子を識別する仕組みはガスの分離から水質管理、薬剤分子の輸送など、私たちの生活・社会に密接に関連しており、これまでもさまざまな分子認識材料の開発が進められてきました。似通った構造の分子を精密に識別する分子認識はナノメートルの非常に小さいスケールで起こる現象です。この現象を人間が簡単に肉眼で識別できる「色や大きさ」、触って確認できる「硬さ」などで判別できると、新しいセンサーなどへの応用が期待できます。

本研究では、この分子認識情報を目に見える形で出力する新しい材料「MOPEG ゲル」を開発しました。MOPEG ゲルは、金属錯体多面体（MOP）という分子を「結び目（架橋点）」とし、柔軟なポリエチレングリコール（PEG）と連結させて作るゲル材料です。MOPの表面にある金属イオンが配位結合^{※3}を介した分子認識サイトとしてはたります。配位結合を形成できる窒素(N)原子をもつ分子を MOPEG ゲルの中へ取り込ませた場合にのみ、ゲルは緑色から赤色へ変化し、大きさも収縮するとともに硬さ（貯蔵弾性率）が10倍以上跳ね上がりました。一方、構造が類似していても識別できない炭素(C)原子や水素(H)原子のみをもつ分子では、これらの顕著な変化は起こりません。これにより、MOPEG ゲルは、ナノサイズの分子情報を、人間が感知可能なゲル材料の色や大きさ、硬さといったマクロな物性へと変換できることを実証しました。

本研究で示された材料設計指針は、MOPに限らず既存の他の機能性分子を架橋点とした高分子材料の開発へと展開できます。今後、「ミクロ分子認識」と「マクロ物性応答」の両輪がはたらく新しい種類の多孔性材料として、特定の化学物質に反応して応答する人工アクチュエータや、スマート薬剤輸送システムなどの実現に新たな道が開かれることが期待されます。

本成果は2026年5月5日（日本時間）に、米国誌「Journal of the American Chemical Society」オンライン版で公開されました。

1. 背景

「分子認識」は特定の分子を識別する現象を指します。この仕組みは、ガスの分離や水質管理、薬剤分子の輸送など、私たちの生活や社会と密接に関連しています。例えば、チューブ調味料のわさびの辛味が長期間保たれているのは、辛味成分分子が、ブドウ糖が連なったカプセル状分子（シクロデキストリン）の中に貯蔵されているためです。分子を貯蔵する仕組みに加えて、似通った構造の分子を精密に識別する精度の高い分子認識を実現するには、識別する側（ホスト）と識別される側（ゲスト）の間で、巧みに設計された相互作用や化学結合が不可欠です。

通常、人工的な分子認識には静電的な力などの弱い力（非共有結合）が使われますが、これでは特定の分子だけを厳密に見分けることが難しく、複数の結合点を同時に形成する必要があります。生体内では、タンパク質を構成する数十～数百の原子がゲスト分子を包み込むことで高精度な認識を行います。タンパク質の中でも、構造内に金属イオンを含む金属タンパク質^{※4}は、非共有結合に加えて、金属イオンとゲスト分子の間で選択的に強くはたらく「配位結合」を駆使することで高い分子選択性を実現し、ゲスト分子の精密な識別・貯蔵・変換に重要な役割を果たしています。

人工材料を使った分子認識に目を向けると、近年ではゴムやゼリーのような性質を持つ柔らかい固体材料（ソフトマテリアル）を使って実践しようとする研究が加速しています。ソフトマテリアルの一例であるゼリー状材料のゲルは、一般的に柔らかい高分子材料で構成されており、ゲスト分子が出入りすることで、ゲル自身が変形・硬化するなど、私たちの目に見える形で変化を確認できる特性を持ちます。しかしながら、従来の高分子ゲルは分子認識部位の設計が困難で、似た構造の分子を見分けにくいという本質的な課題を有しています。そこで、ソフトマテリアル中の分子認識において配位結合を用いることで、精密な分子認識情報を人間が感知可能なゲル材料の色や大きさ、硬さといった物性変化に出力できると着想しました。

2. 研究内容と成果

こうした背景を踏まえ、「分子認識」「配位結合」「ソフトマテリアル」の三つの要素を組み合わせた新材料として開発したのが、本研究で提案する「MOPEG ゲル」です。MOPEG ゲルは、金属イオンを含む金属錯体多面体（MOP）を網目状構造の「結び目（架橋点）」とし、鎖状高分子であるポリエチレングリコール（PEG）と化学的に強く安定な共有結合^{※5}によって連結することで合成できるゲル材料です。MOP 表面に位置する金属イオンを活用することで、配位結合を形成するゲスト分子をゲル内部に取り込んだ場合にのみ、ゲル材料の色・大きさ・硬さの変化として応答を示すことを実践しました。

本研究で用いた MOP 分子は、12 個のロジウム(Rh(II))イオンと 12 個のカルバゾール誘導体配位子で構成されています。Rh(II)イオンは 2 個ずつペアになって八面体構造 6 箇所の頂点に位置することで配位結合を介した分子認識サイトとしての機能を、カルバゾール誘導体配位子は柔軟な鎖状高分子の一種である PEG と共有結合形成を介して連結する「架橋点」としての機能を担っています。この MOP を PEG と連結して作ったゲルを、本研究では「MOPEG ゲル」と命名しました（図 1）。

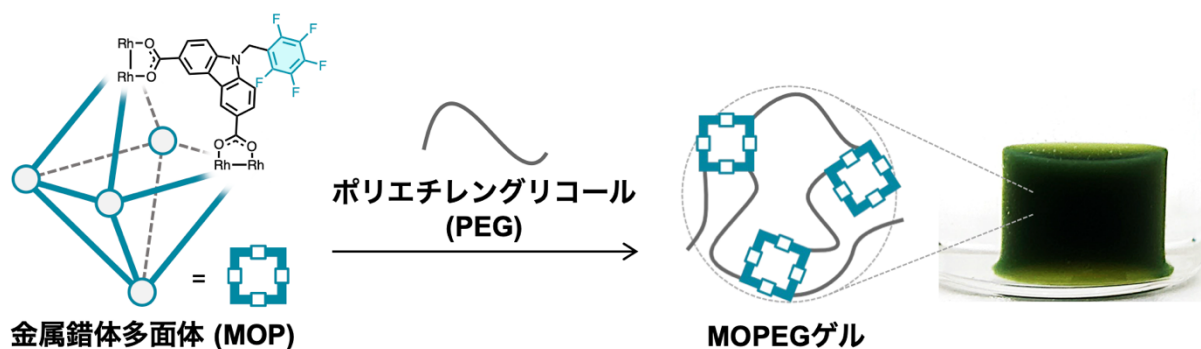


図 1. MOPEG ゲルの合成。MOP 分子をヒモ状の高分子である PEG と反応させることで MOPEG ゲルが形成する。

MOPEG ゲルを構成する MOP は配位結合を介した分子認識サイトを持つため、MOPEG ゲルの構造を維持したまま別の分子との配位結合を形成することが可能です。また、Rh(II)イオンに由来する分子認識サイトの影響で、ゲスト分子との配位結合が生じると MOP は赤色に変化することが知られています。実際に配位部位として窒素(N)原子を有するゲスト分子を加えると、緑色だった MOPEG ゲルは赤色に変わった上で大きさも収縮し、材料の硬さを表す貯蔵弾性率は 0.16 kPa から 2.2 kPa と 10 倍以上増加しました。比較として、この窒素(N)部位を非配位性の炭素(C)と水素(H)に置き換えたゲスト分子を加えたところ、MOPEG ゲルは緑色のままで、大きさにも顕著な変化は見られませんでした。この 2 種類のゲスト分子は、2 ヶ所の原子が窒素(N)か炭素(C)かという小さな違いしかありませんが、MOPEG ゲルは配位結合可能な窒素(N)を持つ分子のみを識別し、材料としての物性変化を引き起こしました。

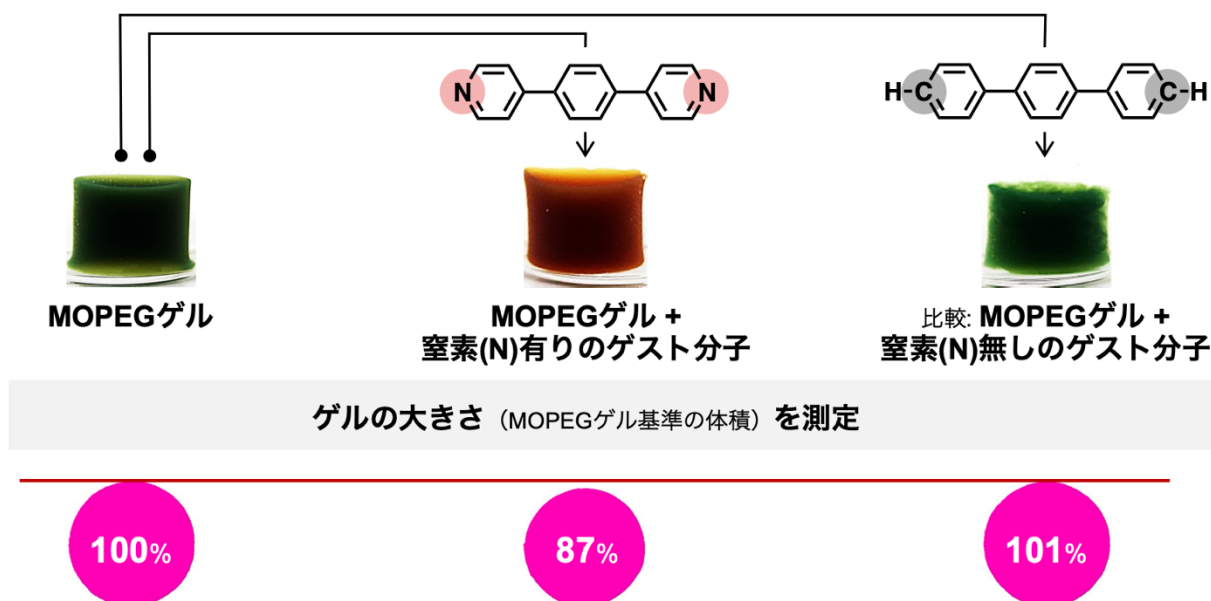


図 2. MOPEG ゲルに対してゲスト分子を加えたときの変化。MOPEG ゲルに対して、窒素(N)原子を有するゲスト分子を加えるとゲルの色が緑から赤に変わった上で縮む一方で、窒素(N)原子を持っていないゲスト分子を加えても、ゲルの色が変わらない上に体積もほとんど変わらない。

本研究では、ナノメートル (10^{-9} m) サイズの分子を配位結合によって識別することでミリメートル (10^{-3} m) 以上のマクロな変形・物性変化を示すという、1,000,000 倍の長さスケールにわ

たって「分子認識」と「材料物性変化」をつなぐ MOPEG ゲルの合成に成功しました。また、配位結合を介した分子認識により、生体環境に影響を及ぼす小分子であるビタミン B₃ の類似分子（ニセリトロール）を貯蔵できる機能を示すこともできました。この成果は、従来の多孔性材料・高分子ゲルとは大きく異なる材料設計指針に基づいたものであり、今後、より高選択的な分子認識機能と環境変化への応答性を両立する次世代型多孔性材料への展開が期待されます。

3. 今後の展開

本研究で開発された MOPEG ゲルは、ナノメートルサイズの分子レベルを精密に見分ける基質選択性と、人間が感知可能なミリメートルサイズのゲル材料自身の色や大きさ、硬さといった物性変化を統合する新しい材料プラットフォームとなります。本研究で得られた知見は、MOP に限らず既存の他の機能性分子を「結び目（架橋点）」とした高分子材料の開発へと展開でき、「マイクロ分子認識×マクロ物性応答」の両輪がはたらく新しいマルチスケール材料群として展開されることが期待されます。今後は、特定の化学物質に反応するセンサーや人工アクチュエータ、スマート薬剤輸送システムなどの実現に新たな道が開かれることが期待されます。

4. 用語解説

- ※1 金属有機多面体（MOP）：金属イオンと有機配位子から組み上がるナノサイズの多面体型の分子です。本研究では、「分子認識サイト」と「架橋点」としての役割を担うことができる化学的安定性の高い分子を用いました。
- ※2 ゲスト分子：分子認識において、ホスト（認識する側）に取り込まれ、識別される対象となる分子のことです。本稿では、わさびの辛味成分（アリルイソチオシアネート）やビタミンB₃の類似分子（ニセリトロール）などをゲスト分子の例として紹介しています。
- ※3 配位結合：金属イオンと、電子豊富な原子（窒素(N)など)を含む特定の分子の間で形成される化学結合のことです。一般的に静電気のような弱い力に比べて結合が強く、後述する共有結合よりは弱い特性があります。
- ※4 金属タンパク質：タンパク質の構造内に亜鉛やニッケルなどの金属イオンを含有し、その金属イオンを活用して酵素反応や分子認識などの重要な生物学的機能を実現しているタンパク質のことです。私たちの体内で尿素を分解する酵素は、金属タンパク質の一種です。
- ※5 共有結合：2つの原子が電子の対を共有することで形成される、強く安定な化学結合のことです。共有結合で結びついた分子（身近な例では水・二酸化炭素・メタンなど）は、常温で安定して存在することができます。

5. 研究プロジェクトについて

本成果に関わる研究は、日本学術振興会 科学研究費助成事業（特別研究員奨励費 JP22KJ1784、若手研究 JP23K13762、基盤研究（A）JP23H00298）の支援を受けて行われました。

6. 論文タイトル・著者

“Coordinative Guest Recognition Triggers Macroscale Deformation of Covalently Linked Metal-Organic Polyhedra Polymer Gels”

(参考訳：配位結合によるゲスト分子認識が引き起こす、共有結合で架橋された金属有機多面体ポリマーゲルの巨視的変形)

著者：Tomoki Tateishi, Shunsuke Imai, Ayana Miyata, Yuki Tokudome, Kenji Urayama, Shuhei Furukawa

Journal of the American Chemical Society (American Chemical Society) |

DOI: 10.1021/jacs.6c06620

問い合わせ先

<研究内容について>

古川 修平 (フルカワ・シュウヘイ)

京都大学アイセムス 教授

電話：075-753-9868 | Eメール：shuhei.furukawa@icems.kyoto-u.ac.jp

X (Twitter)：@FurukawaG_Kyoto

立石 友紀 (タテイシ・トモキ)

東北大学学際科学フロンティア研究所 助教

電話：022-795-6547 | Eメール：tomoki.tateishi.d1@tohoku.ac.jp

<京都大学アイセムスについて>

遠山 真理 (トオヤマ・マリ)

京都大学アイセムス コミュニケーションデザインユニット 特定准教授

電話：075-753-9749 | Eメール：cd@mail2.adm.kyoto-u.ac.jp

<東北大学 学際科学フロンティア研究所について>

波田野 悠夏 (ハタノ・ユカ)

東北大学 学際科学フロンティア研究所 企画部 特任准教授

Eメール：fris-pr@grp.tohoku.ac.jp