

2024 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書【公開版】

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	主任研究者・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	2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

本年度は、これまでに構築してきた基礎理論をさらに深化させ、その確度を高めることに注力した。特に「ケージ分子の設計方法」と「ケージ効果の定量記述」の二つの柱において、理論と実験の両面から研究を推進し、計画通りの進展を得た。

「ケージ分子の設計方法」に関しては、既存の設計指針をより広範な分子構造へと拡張する試みを進めた。特に、ケージ構造の安定性や機能性を精密に制御するための新たな幾何学的概念を導入し、これに基づいて設計・合成した分子群において、予測通りの構造と特性が得られることを実験的に確認した。これにより、多様な分子形態の創出に向けた設計自由度が向上した。さらに、これらの成果をより普遍的な設計理論へと昇華させるため、数理科学的アプローチを深化させ、学際的な共同研究体制の構築にも着手した。

「ケージ効果の定量記述」については、限定空間内での分子挙動を予測・解析するための基礎理論構築およびシミュレーションコード開発が順調に進展した。開発中の手法は、一部のモデル分子系において実験結果との高い整合性を示しており、将来的には、従来手法では評価が困難であった微弱な分子間相互作用の精密な解析や、それを通じた新たな機能性分子の探索・設計など、広範な応用展開が期待される。

総じて、本年度は基礎理論の確度向上と応用への橋渡しとなる重要な知見を多数得ることができた。これらの成果は、次年度以降に計画している、より複雑な生体分子の機能制御や精密分析技術の開発に向けた強固な足場となるものである。引き続き、理論と実験の緊密な連携のもと、独創的な分子技術の創出を目指す。