

6-8 特別研究部門

藤田 誠 (卓越教授) (2018年4月1日着任)

三橋 隆章 (特任助教 (分子科学研究所特別研究員))

CHEN, Jiazhuo (研究員)

増田 道子 (事務支援員)

A-1) 専門領域：錯体化学，有機化学，超分子化学

A-2) 研究課題：

- a) 結晶スポンジ法の二次代謝酵素の機能解析への応用

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 結晶スポンジ法とは，超分子化学の基礎研究から生まれた分子の構造解析技術である。本手法は，信頼性の高い構造決定手法として知られるX線結晶構造解析を，本来は必要な工程である解析対象物の単結晶化を経ることなく行うことができる画期的な構造解析法である。我々は，この結晶スポンジ法を用いて，二次代謝酵素の機能解析に取り組んでいる。二次代謝酵素の機能解析においては，酵素の生産する酵素産物の構造決定が極めて重要であると同時に困難であり，この問題の解決に結晶スポンジ法の利用が有効であると考えた。

また，結晶スポンジ法は，解析対象物の結晶化を必要としないという利点の他に，微量（数マイクログラム以下）の解析対象物しか必要としないという利点も併せ持っている。本年度は，この後者の点に着目し，結晶スポンジ法の使用によって，二次代謝酵素の解析スキーム全体を小スケール化できることを実証した。具体的には，二次代謝酵素の解析に頻用される遺伝子組換え微生物を用いた酵素産物の生産を小スケール化して行い，得られたごく僅かな酵素産物のみを用い，結晶スポンジ法によって構造決定を達成した。具体的には，通常NMRなどを用いた構造決定に十分な量の酵素産物を得るために遺伝子組換え微生物を数Lから数十Lの培地を用いて培養を行う必要があるところ，本研究では，おおよそ100分の1にあたる25 mLの培養液を用いた培養から得た酵素産物のみを用いて，その構造決定に成功した。

B-1) 学術論文

Y. DOMOTO, K. YAMAMOTO, S. HORIE, Z. YU and M. FUJITA, “Amplification of Weak Chiral Inductions for Excellent Control over the Helical Orientation of Discrete Topologically Chiral $(M_3L_2)_n$ Polyhedra,” *Chem. Sci.* **13**(15), 4372–4376 (2022). DOI: 10.1039/d2sc00111j

H. TAKEZAWA, Y. FUJII, T. MURASE and M. FUJITA, “Electrophilic Spirocyclization of a 2-Biphenylacetylene via Conformational Fixing within a Hollow-Cage Host,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **61**(24), e202203970 (2022). DOI: 10.1002/anie.202203970

R. TABUCHI, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Selective Confinement of Rare-Earth-Metal Hydrates by a Capped Metallo-Cage under Aqueous Conditions,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **61**(37), e202208866 (2022). DOI: 10.1002/anie.202208866

H. TAMURA, H. TAKEZAWA, M. FUJITA and H. ISHIKITA, “A Self-Assembled Coordination Cage Enhances the Reactivity of Confined Amides via Mechanical Bond-Twisting,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24(35)**, 21367–21371 (2022). DOI: 10.1039/D2CP03126D

B-3) 総説, 著書

Y. DOMOTO and M. FUJITA, “Self-Assembly of Nanostructures with High Complexity Based on Metal...Unsaturated-Bond Coordination,” *Coord. Chem. Rev.* **466**, 214605 (2022). DOI: 10.1016/j.ccr.2022.214605

B-4) 招待講演

藤田 誠, 「化学と幾何学：多面体の定理を活用したものづくり」, 第 135 回分子科学フォーラム, オンライン開催, 2023 年 2 月.

藤田 誠, 「マイクロ結晶スポンジ法 (MicroCS 法) : 質量分析に迫る極微量 X 線分子構造解析」, 第 70 回質量分析総合討論会, 福岡, 2022 年 6 月.

藤田 誠, 「化学と幾何学：多面体定理を活用したものづくり」, 令和 4 年度化学系学協会東北大会 (盛岡大会), 岩手, 盛岡市, 2022 年 9 月.

M. FUJITA, “Complex molecular topologies via reversible ring/loop threading,” ArtMoMa Summer School, Oxford (UK), July 2022.

M. FUJITA, “Self-Assembly of Gigantic Polyhedra: From Synthetic To Peptidic,” ICC2022, Rimini (Italy), August 2022.

M. FUJITA, “Self-assembly of Gigantic Coordination Polyhedra: From Synthetic to Peptidic,” 11th Singapore International Chemistry Conference (SICC-11), Singapore, December 2022.

M. FUJITA, “Self-assembly of Gigantic Coordination Polyhedra: From Synthetic to Peptidic,” 3DMM2O conference, Schöntal Monastery, Schöntal (Germany), March 2023.

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, 朝日新聞文化財団朝日賞 (2023).

藤田 誠, 化学の家財団国際賞 (2022).

B-7) 学会および社会的活動

学会誌編集委員

Chemical Science 誌, Editorial Board (2018–).

Acc. Chem. Soc. 誌, Editorial Board (2018–).

B-10) 競争的資金

科研費特別推進研究, 「空間捕捉によるタンパク質の構造・機能制御および高効率構造解析」, 藤田 誠 (2019 年度–2023 年度).

C) 研究活動の課題と展望

本年度は、結晶スポンジ法の利用によって、二次代謝酵素の機能解析実験を小スケール化することが可能であると実証できた。これにより、二次代謝酵素の機能解析をますます迅速に行うことができるようになることが期待される。近年の遺伝子解析技術の発展を背景に、興味深い二次代謝酵素をコードする遺伝子が次々と見だされており、こうした酵素について結晶スポンジ法を駆使することで逸早く解析し、酵素機能に関する数多くの知見を蓄積していきたい。

木村 真一 (教授) (2020年4月1日着任)
(クロスアポイントメント; 大阪大学大学院生命機能研究科)

石川 あずさ (事務支援員)
栗田 佳子 (事務支援員)

A-1) 専門領域: 物性物理学, 量子ビーム科学

A-2) 研究課題:

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 機能性固体・薄膜の電子状態の分光研究: 磁性と伝導が複雑に絡み合うことにより新しい機能が現れる固体・薄膜について, 低温・高圧・高磁場下の赤外・テラヘルツ分光と高分解能三次元角度分解光電子分光および時間分解分光により, 機能性の起源である電子状態を詳細に決定している。また, それらの実験条件に合わせた第一原理電子状態計算を組み合わせることで, 機能性固体・薄膜の電子状態の総合的な情報を得ている。
- b) 物質科学に向けた新しい放射光分光法の開発: UVSOR や次世代放射光で用いることを想定した新たな分光法を開発する。特に, 電子構造のダイナミクスを可視化することを目標に, 新たな光電子分光法と赤外分光法の開発を進めており, 物質科学への応用を図る。
- c) 新しい量子ビームを使った分析技術の開発: スピン偏極高輝度電子源を用いた高エネルギー分解能スピン・角度分解共鳴電子エネルギー損失分光法の開発を進めている。

B-1) 学術論文

T. NAKAMURA, Y. OHTSUBO, A. HARASAWA, K. YAJI, S. SHIN, F. KOMORI and S. KIMURA, “Fluctuating Spin–Orbital Texture of Rashba-Split Surface States in Real and Reciprocal Space,” *Phys. Rev. B* **105(23)**, 235141 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.105.235141

H. MIYAZAKI, T. HAJIRI, M. MATSUNAMI, M. INUKAI, T. ITO and S. KIMURA, “Observation of Thickness-Dependent Exchange Interaction in EuO Ultrathin Films,” *Front. Nanotechnol.* **4**, 872717 (2022). DOI: 10.3389/fnano.2022.872717

Y. OHTSUBO, T. NAKAYA, T. NAKAMURA, P. LE FÈVRE, F. BERTRAN, F. IGA and S. KIMURA, “Breakdown of Bulk-Projected Isotropy in Surface Electronic States of Topological Kondo Insulator $\text{SmB}_6(001)$,” *Nat. Commun.* **13(1)**, 5600 (2022). DOI: 10.1038/s41467-022-33347-0

T. NAKAMURA, T. NAKAYA, Y. OHTSUBO, H. SUGIHARA, K. TANAKA, R. YUKAWA, M. KITAMURA, H. KUMIGASHIRA, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Surface Valence Transition in SmS by Alkali Metal Adsorption,” *Phys. Rev. B* **107(4)**, L041102 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.107.L041102

H. MIYAZAKI, S. KIMURA, K. ONISHI, T. HIHARA, M. YOSHIMURA, H. ISHII, M. MIKAMI and Y. NISHINO, “Relation between Electronic Structure and Thermoelectric Properties of Heusler-Type Ru₂VAl Compounds,” *Crystals* **12(10)**, 1403 (2022). DOI: 10.3390/cryst12101403

B-3) 総説, 著書

Y. OHTSUBO, S. KIMURA and F. IGA, “Recent Progress in Clean-Surface Formation of Topological Kondo Insulators and Topological Surface States Observed There,” *Electron. Struct.* **4(3)**, 033003 (2022). DOI: 10.1088/2516-1075/ac8631

B-4) 招待講演

H. WATANABE, S. TATSUKAWA, Y. CHEN, T. NAKAMURA, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Carrier-induced insulator-to-metal transition on SmS,” 11th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Hiroshima (Japan), October 2022.

R. IKEDA, H. WATANABE, M.-H. JUNG and S. KIMURA, “Terahertz electric-field drive on Weyl fermions,” 11th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Hiroshima (Japan), October 2022.

S. KIMURA, “Origin of the valence transition in samarium mono-sulfide,” 3-day International Conference on Materials Science, Verona (Italy), October 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会評議員 (2021.9–2023.9).

日本物理学会領域5代表 (2022–2023).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

東京大学放射光連携研究機構物質科学ビームライン課題審査委員会委員 (2021.4–2023.3).

広島大学放射光科学研究センター協議会委員 (2018.4–2024.3).

SPring-8/SACLA 成果審査委員会「査読者」(2016.4–2024.3).

量子科学技術研究開発機構 次世代放射光施設利用研究検討委員会委員 (2019.4–2023.3).

B-8) 大学等での講義, 客員

大阪大学大学院生命機能研究科, 教授, 2013年7月–.

大阪大学大学院理学研究科, 講義「シンクロトロン分光学」, 2022年4月–9月.

大阪大学理学部, 講義「光物理学」, 2022年4月–9月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 講義「基礎物理学I」, 2022年4月–9月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 実習「基礎物理学実習」, 2022年4月–9月.

大阪大学全学教育推進機構, 講義「力学詳論II」, 2022年10月–2023年2月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B),「スピン分解共鳴電子エネルギー損失分光法の確立とスピン量子物性への応用」, 木村真一 (2020年度-2022年度).

(公財)光科学技術研究振興財団,「新規内殻共鳴分光法の開発と中間状態の電子状態の検証」, 木村真一 (2020年度-2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

物質機能の起源である電子構造を明確にすることは、物性の理解を深め、新しい機能性を創りだすのに重要である。そのため、準粒子を観測するための手段として、これまで放射光を使った角度分解光電子分光と赤外・テラヘルツ分光を推進してきた。現在は、準粒子とともに重要な素励起である集団励起の観測を行うために、内殻共鳴電子エネルギー損失分光法 (rEELS) の開発を進めている。クロスアポイントメントの5年間で、rEELS をスピン分解、角度分解、時間分解に拡張するとともに、スピン・角度分解共鳴逆光電子分光法の開発も行っていく。

大 西 洋 (教授) (2021 年 11 月 1 日着任)
(クロスアポイントメント; 神戸大学大学院理学研究科)

石川 あずさ (事務支援員)
栗田 佳子 (事務支援員)

A-1) 専門領域: 界面分子科学, 触媒科学

A-2) 研究課題:

- a) 有限厚さをもつ固液界面のオペランド計測: 創/省エネルギーを支えるサイエンスの構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 創エネルギーと省エネルギーという社会ニーズに応えるために, 高収率の半導体光触媒と低摩擦の潤滑油が最近 20 年のあいだに次々と開発されてきた。これら新材料をオペランド計測する手法に工夫をこらして有限の厚さ (1 μm –1 nm) をもつ液体–固体界面が機能を発現するしくみを理解する。分子論的な界面 (液体分子と固体分子が接触する場所) でおきる現象と, 分子論的な界面へ物質とエネルギーを入出力する場所でおきる現象を同時に計測し一体として理解することの重要性を光触媒 (物質変換) と潤滑油 (力学的エネルギー散逸) というケーススタディをとおして世界へ発信することを目的とする。①電子励起状態にある光触媒の軟エックス線分光と全反射光学分光の手法開発②潤滑油界面のナノ力学計測と単一分子蛍光追跡の手法開発が本年度の成果である。

B-4) 招待講演

H. ONISHI, “Semiconductor Photocatalysts for Artificial Photosynthesis: Operando Characterization under Water,” Seminar at RIKEN, Wako, 2022年4月.

大西 洋, 「半導体光触媒をもちいた人工光合成反応のオペランド計測: 溶存酸素の高速検出とダイヤモンドプリズムを用いた光学分光」, 日本オプトメカトロニクス協会第 2 回フォトンテクノロジー技術部会, オンライン開催, 2022 年 10 月.

大西 洋, 「半導体光触媒のオペランド界面計測: ダイヤモンドプリズムを用いた光学分光と溶存酸素の高速検出」, 実用表面分析セミナー 2022, 神戸, 2022 年 11 月.

大西 洋, 「水中ですすむ触媒反応のオペランド計測: 光触媒の事例」, 第 445 回触媒科学研究所コロキウム, 北海道大学, ハイブリッド開催, 2023 年 2 月.

H. ONISHI, “Infrared absorption of semiconductor photocatalysts excited under water: operando study with an ATR prism,” 12th International Conference on Environmental Catalysis (ICEC2022), Osaka, July 2022.

M. HIRADE, S. MORIGUCHI, A. KOGURE, H. NAKAJIMA and H. ONISHI, “Application of FM-AFM,” 14th International Symposium on Atomic Level Characterizations for New Materials and Devices '22 (ALC '22), Nago, October 2022.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

(社)応用物理学会薄膜・表面物理分科会幹事(2006-).

日本表面真空学会理事(2022-).

学会の組織委員等

The 22nd International Vacuum Congress (IVC-22), program committee co-chair (2020-2022).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会ナノプローブテクノロジー第167委員会委員(2016-2023).

触媒科学計測共同研究拠点課題等審査専門委員会委員長(2022-).

学会誌編集委員

日本表面真空科学会電子ジャーナル委員(2002-).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「人工光合成をめざす半導体光触媒: オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」, 大西 洋 (2022年度-2024年度).

科研費挑戦的研究(萌芽), 「固体に挟まれた潤滑油分子の並進運動計測: 単一蛍光分子追跡」, 大西 洋 (2021年度-2023年度).

科研費基盤研究(A), 「電子スピン分極の三次元映像化で解く多重励起子・電荷分離立体構造の分子運動効果」(代表: 小堀康博), 大西 洋(研究分担者) (2019年度-2022年度).

C) 研究活動の課題と展望

【光触媒】水-光触媒界面ですすむ物質変換に焦点を絞った研究を展開していく。従来の光触媒ダイナミクス研究はフェムト秒からマイクロ秒で進む電子のうごき(電子励起と電荷分離)に注目してきた。有限厚の水-光触媒界面で物質輸送を含むミリ秒の反応化学の解明をめざす。

【潤滑油】潤滑油-固体界面におけるエネルギー散逸の鍵となる分子運動性を定量評価するために原子間力顕微鏡を駆使したナノ力学計測と, 生体膜研究に常用される単一蛍光分子追跡を潤滑油界面計測に転用する研究を進めていく。

高 谷 光 (准教授 (兼任; 京都大学)) (2022 年 3 月 1 日 ~ 2022 年 3 月 31 日)
(教授 (兼任; 帝京科学大学)) (2022 年 4 月 1 日着任)

神谷 美穂 (事務支援員)

A-1) 専門領域: 有機合成化学, 有機金属化学, ペプチド科学, X線吸収分光

A-2) 研究課題:

- a) X線吸収分光を基盤とする革新触媒の創製
- b) マイクロ波照射による有機反応促進機構の解明
- c) メタル化ペプチド基盤人工酵素を用いる木質バイオマスの循環資源化

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 溶液X線種分光と量子化学計算の融合によって, NMR等の従来の分析手法では困難な, 常磁性の触媒活性種や高活性で不安定な活性種の「その場観 XAFS」の開発を目的とした研究を推進してきた。特に UVSOR (BL3U) において, 長坂博士と共同研究を行ない, 酸素や水分に対して不安定な反応活性種の溶液軟X線吸収分光法の開発に成功した。具体的には, 鉄触媒クロスカップリング反応の触媒活性種であるアリール鉄錯体や Grignard 反応剤の溶液 XAFS 測定を行うために, 各種有機溶媒に高い耐性を有するピーク樹脂製フローセルを開発した。このセルでは, 金蒸着された SiN 薄膜を窓材として用いており, 金線で窓材をアースすることによって有機溶媒の送液によって発生・蓄積する静電気を除去できる。そのため, 従来型フローセルで問題となっていた静電気によるノイズやベースラインのドリフトを抑え, 長時間安定して溶液 XAFS 測定を行える。また, 上記フローセルを用いる XAFS 測定では, 常に新鮮なサンプル溶液が供給されるため, 軟X線によるサンプルダメージを最小限に抑えることができる。さらに, フローリアクタを接続することで, 実際の反応に用いる試薬と触媒を流路内で反応させ, 系中に生成する反応/触媒活性種の「その場観察」が可能であるという特徴を有する。2021 年度では, 不安定な Fe/Ni 触媒種の Fe-L/Ni-L 端および有機マグネシウム反応剤 (Grignard 試薬) の C-K/O-K 端の溶液 XAFS 測定に成功した。2022 年度では, 有機化学における未解決の反応機構・活性種問題を解決するために, 触媒種/反応種を拡張し, さらにフローリアクタを用いて反応過程の XAFS 観察を行いたい。
- b) マイクロ波照射化学合成は, 電熱ヒータ等の従来型の通常熱源を用いる反応と比べて, 1/10 程度のエネルギー消費量で, 最大 1000 倍にも達する反応加速効果が得られること, 反応物質や触媒選択加熱による反応制御によって所望の物質のみを高選択的に合成できる優れた特徴を有する。しかしながら, この様な加速現象の発見から 30 年以上が経過した現在でも, マイクロ波照射によって化学反応が加速される分子科学的な機序は明らかになっていない。我々は, マイクロ波による反応加速現象の学理解明を目的として, 2020 年度より分子研 (田中, 長坂) と核融合研 (加藤, 村上) の融合研究を立上げ, マイクロ波照射下における化学反応のその場観察と分子動力学・QM/MM による分子挙動のシミュレーションについて基礎検討を行っている。2021 年度は, UVSOR の赤外/THz ビームライン (BL1B) の光学系に挿入できるマイクロ波反応装置の開発に成功し, マイクロ波照射下でのテラヘルツ測定に成功した。2022 年度では, マイクロ波効果のプロープ分子として知られるニトロベンゼン類を用い, テラヘルツ分光によるマイクロ波特異の効果の直接検出に取り組みたい。
- c) 木質バイオマスはリグニン, セルロース, ヘミセルロースを主成分とする夾雑な生体分子である。我々は, リグニン

およびセルロースを認識するペプチドと金属触媒を結合した人工酵素を開発し、これを用いて木質夾雑系からのリグニン／セルロース選択的な分子変換法の開発に取り組んでいる。2020年度には、リグニン認識能を有する12残基ペプチドに高い酸化能を有するRu錯体触媒を結合した人工酵素の合成に成功した。また、蛍光異方性測定と分子動力学計算によってペプチドのリグニン認識においてペプチド残基とリグニン水酸基および芳香族骨格の水素結合とCH/ π 型相互作用が支配的であることを明らかにした。2022年度では、分子動力学計算およびITCによるリグニン認識機構の解明に取り組むとともに、マイクロ波／メカノケミカル反応による木質バイオマスの高効率／高選択的な分解反応の開拓を行う。

B-1) 学術論文

M. UEDA, M. KIMURA, S. MIYAGAWA, M. NAITO, H. TAKAYA and Y. TOKUNAGA*, “Four- and Two-Armed Hetero Porphyrin Dimers: Their Specific Recognition and Self-Sorting Behaviours,” *Org. Biomol. Chem.* **20(2)**, 387–395 (2022). DOI: 10.1039/D1OB01694F (Supramolecular chemistry in OBC)

H. KOBAYASHI, Y. MASUDA, H. TAKAYA, T. KUBO* and K. OTSUKA, “Separation of Glycoproteins Based on Sugar Chains Using Novel Stationary Phases Modified with PEG-Conjugated Boronic-Acid Derivatives,” *Anal. Chem.* **94**, 6882–6892 (2022). (Front cover)

A. MURANAKA, H. BAN, M. NAITO, S. MIYAGAWA, M. UEDA, S. YAMAMOTO, M. HARADA, H. TAKAYA, M. KIMURA, N. KOBAYASHI, M. UCHIYAMA and Y. TOKUNAGA, “Naked-Eye-Detectable Supramolecular Sensing System for Glutaric Acid and Isophthalic Acid,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95**, 1428–1437 (2022). (BCSJ Award)

B-2) 国際会議のプロシーディングス

M. YOKOYAMA, H. TAKAYA and M. SAKAMOTO, “¹⁴C Dating of Historical Japanese Musical Instrument Flute Sack,” *24th Radiocarbon Conference, 10th ¹⁴C & Archaeology Conference* (2022).

B-3) 総説, 著書

高谷 光, 「4章–11. 単結晶X線構造解析 (Single Crystal X-ray Structure Analysis)」, 「触媒総合辞典」, 朝倉書店 (2023).

B-4) 招待講演

高谷 光, 「文化財と放射光分析」, 京都大学「陶磁器の化学」第1回ワークショップ, 京都大学吉田キャンパス百周年時計台記念館, 京都市, 2022年10月.

高谷 光, 「反応性有機金属種の軟X線XAFS」, UVSOR シンポジウム 2022, 分子科学研究所, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎市, 2022年11月.

高谷 光, 「X線吸収分光による溶液中分子構造決定」, 筑波大学数理物質系セミナー, 筑波大学, つくば市, 2022年12月.

B-5) 特許出願

特許登録

特許第7072778号, 「イミダゾール誘導体の製造方法」, 渡辺 隆司, 中村正治, 高谷 光, 磯崎勝弘, フランチェスカ ピンチェラ, 福田健治 (京都大学, 太陽日酸 (株)) (登録日 2022年5月13日).

B-6) 受賞, 表彰

A. MURANAKA, H. BAN, M. NAITO, S. MIYAGAWA, M. UEDA, S. YAMAMOTO, M. HARADA, H. TAKAYA, M. KIMURA, N. KOBAYASHI, M. UCHIYAMA and Y. TOKUNAGA, 日本化学会論文誌BCSJ 賞 (2022).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

SPring-8利用推進懇談会「SPring-8先端放射光技術による化学イノベーション研究会」主査委員 (2017-).

学会の組織委員等

日本化学会春季年会イノベーション共創プログラム (CIP) 企画委員 (2015-).

日本化学会第 102 春季年会 ATP 企画 TIC 「インフォマティクスの基礎」幹事 (2018-).

日本化学会第 102 春季年会特別企画「化学者のための放射光ことはじめ——XAFS の基礎と応用」代表幹事 (2022-2023).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会産学協力研究委員会「R024 電磁波励起反応場委員会」幹事委員 (2020-).

学会誌編集委員

日本電磁場エネルギー応用学会機関誌編集委員 (2019-).

その他

京都大学分野横断プラットフォーム「陶磁器の化学」(<https://research.kyoto-u.ac.jp/gp/g069/>)で清水焼「陶菴」社会長, 社長および京都大学(佐々木, 井田, 宇治ら)と曜変天目茶碗における曜変発現メカニズムの科学的解明と量産化のための焼成条件の基礎技術開発に取り組んでいる。(<https://www.atpress.ne.jp/news/203342>)(2022).

B-8) 大学等での講義, 客員

京都大学量子ビームアライアンス, オンライン講義講師, 「X線吸収分光」, 2021年-.

中部大学工学部, 客員准教授, 2022年4月-2023年2月, 客員教授, 2023年3月-.

帝京科学大学生命環境学部, 「有機化学I」「有機化学II」「化学療法論」「生命科学基礎実験I」「生命科学基礎実験II」「1年次基礎ゼミ」, 2022年-.

理化学研究所, 客員研究員, 2022年4月-.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「植物バイオマス循環資源化のためのメタル化ペプチド人工酵素の創製」, 高谷 光 (2021年度-2023年度).

科学技術振興機構CREST研究「新たな生産プロセス構築のための電子やイオン等の能動的制御による革新的反応技術の創出」領域, 「レドックスメカノケミストリーによる固体有機合成化学」(代表: 伊藤 肇), 高谷 光(共同研究者) (2021年度-2025年度).

科学技術振興機構研究開発最適展開支援プログラムA-STEP産学共同(本格型): with/post コロナにおける社会変革への寄与が期待される研究開発, 第4分野(アグリ・バイオ), 「糖鎖認識PEG誘導体を用いた糖たんぱく質の糖鎖に基づく精密分離技術の開発」(代表: 小林宏資), 高谷 光(分担者) (2021年度-2025年度).

令和4年度「産学公の森」推進事業補助金アールステージコース、「曜変天目茶碗」再現のための基盤要素技術の開拓事業」(代表：土淵善重貴(陶菴社長)), 高谷 光(共同研究者)(2022年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 抗菌化研(株), 「新奇な抗菌性物質の開発と作用機序の解明」, 高谷 光(2022年).

共同研究, ENEOS(株), 「潤滑油成分の物性・構造解析」, 高谷 光(2022年).

共同研究, 本田技研工業(株), 高谷 光(2022年).

C) 研究活動の課題と展望

XAS 研究においては, 触媒と反応基質を混合・反応させて任意のタイミングで XAS 測定が行えるフローリアクタの開発と, これを用いる均一系触媒反応機構に関する研究, およびマイクロ波照射下における in situ 反応解析に必要な溶液分光セルおよび UVSOR の軟 X 線光源に挿入可能なマイクロ波反応装置およびメカノケミカル条件での XAS 測定可能なセル開発に注力した研究を行なう。また, これら XAS 測定から得られたスペクトルを用いた構造解析のために溶媒を含めた触媒活性種, 反応機構解析のために QM/MM による内核励起スペクトルシミュレーションに取り組む。

中 村 彰 彦 (准教授) (2022 年 8 月 1 日着任)
(クロスアポイントメント; 静岡大学農学部)

中根 香織 (事務支援員)

A-1) 専門領域: 生化学, 生物物理学

A-2) 研究課題:

- a) ポリエチレンテレフタレート加水分解酵素の改良
- b) ポリエチレンテレフタレート吸着酵素の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) ポリエチレンテレフタレートは飲料ボトルや衣料などに使用されている身近なプラスチックである。低コストで環境負荷の低いリサイクル方法を開発するため, その分解酵素の機構の向上を試みている。酵素表面に露出しているアミノ酸 95 個を塩基性アミノ酸または酸性アミノ酸に変更し, 表面電荷を改変した酵素ライブラリを作成した。活性スクリーニングしたところ 2 つの変異体で鋳型酵素よりも高い活性をもつことがわかった。
- b) 使用量が多いプラスチックは環境中へ流出する可能性が高く, 細かく粉碎されたプラスチック片による環境汚染が問題視されている。しかし検出に手間がかかるため正確な実態は不明である。そこでポリエチレンテレフタレートに特異的に吸着する酵素の開発を試みた。キチン吸着酵素を鋳型としてファージディスプレイ法により変異体のスクリーニングを行ったところ, ポリエチレンテレフタレートに吸着する変異体が取得できた。蛍光タンパク質との複合体を作成し吸着を計測したところ, 天然型酵素では吸着しないが変異体では吸着が確認でき, PET が染色可能であることがわかった。

B-1) 学術論文

T. UCHIYAMA, T. UCHIHASHI, T. ISHIDA, A. NAKAMURA, J. V.V ERMAAS, M. F. CROWLEY, M.SAMEJIMA, G. T. BECKHAM and K. IGARASHI, “Lytic Polysaccharide Monooxygenase Increases Cellobiohydrolases Activity by Promoting Decrystallization of Cellulose Surface,” *Sci. Adv.* **8(51)**, eade5155 (2022). DOI: 10.1126/sciadv.ade5155

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

(公財) 新世代研究所バイオ単分子研究会会員 (2022-).

学会の組織委員等

第 61 回日本生物物理学会実行委員 (2022).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業,「プラスチックを採して壊すバイオマイクロドロンの創出」,中村彰彦(2022年度-2024年度).

科研費基盤研究(B),「自然界に学ぶ「バイオマス分解機構」の解明」(代表:金子 哲),中村彰彦(研究分担者)(2021年度-2023年度).

B-11) 産学連携

共同研究,キリンホールディングス(株),「PET 分解酵素の開発」,中村彰彦(2022年).

C) 研究活動の課題と展望

ポリエチレンテレフタレート分解酵素の改良では,得られた2つの変異を掛け合わせることで相加的に活性が向上するかどうか,及び耐熱性が向上しているかどうかの確認が必要である。今後精製酵素を用いて詳細な比較をおこなっていく。ポリエチレンテレフタレート吸着酵素の開発では,天然型酵素では全く吸着しなかったが変異体では明確に吸着が確認できたため新たな吸着酵素の開発に成功したといえる。ただし天然型酵素の天然基質であるキチンへの吸着能が残っているため,今後は吸着特異性の向上を進めていく。