

## 6-5 生命・錯体分子科学研究領域

### 生体分子機能研究部門

青野重利（教授）（2002年5月1日着任）

A-1) 専門領域：生物無機化学

A-2) 研究課題：

- a) 新規なセンサー型転写調節因子の構造と機能に関する研究
- b) 細菌のヘム取り込み反応に関与するタンパク質の構造機能相関解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) *Thermus thermophilus* に含まれる CarH は、カロテノイド色素合成酵素の発現を光依存的に制御している転写調節因子であり、ビタミン B12 (アデノシルコバラミン) を光受容体として利用している新規な光センサータンパク質である。暗所で調製したアデノシルコバラミン結合型 CarH (AdoCbl-CarH) は、四量体構造を有しているが、これに可視光を照射すると単量体へと解離した。光照射による四量体から単量体への高次構造変化は不可逆的な変化であり、光照射後のサンプルを暗所に戻しても四量体へと戻ることはなかった。CarH による光センシング、および光による CarH の機能制御の分子機構を明らかにするため、CarH の結晶構造解析を行い、暗所で調製した AdoCbl-CarH の結晶構造解析に成功した。得られた結晶構造中で CarH は四量体を形成しており、CarH プロトマーは三つのドメイン (N 末端側から順に DNA 結合ドメイン、helix-bundle ドメイン、Rossman-fold ドメイン) から構成されていた。アデノシルコバラミンは、helix-bundle ドメインと Rossman-fold ドメインに挟まれる形で結合しており、Rossman-fold ドメイン中の His177 が第 6 配位子としてコバルトに配位していた。アデノシル基は、helix-bundle ドメイン中の二本のヘリックスに挟まれて存在しており、Trp131 と His142 がアデノシル基周辺に位置することにより、その配向を制御していると推定された。CarH が光を感知すると、アデノシル基が光解離することにより、コバラミン周辺のコンフォメーションが変化し、その結果として四量体から単量体への高次構造変化が誘起されるものと考えられる。
- b) コリネバクテリア中に含まれるヘム取り込み系は、コリネバクテリアの細胞表層に存在し、ヘムの結合・輸送に関与する HtaA-HtaB タンパク質と、細胞内へのヘム輸送に関与する HmuT-HmuU-HmuV タンパク質から構成されている。今年度の研究では、細胞表層に存在するヘム輸送タンパク質 HtaA の N 末ドメイン (HtaA-N) の結晶構造決定に成功した。HtaA-N は 11 本の  $\beta$ -strand と 2 本の短い  $\alpha$ -helix から構成されており、HtaA-N 1 分子あたりにヘム 1 分子が結合していた。分子表面近傍に、 $\beta$ -strand 間を繋ぐ二つのループ領域がヘム分子を挟み込むように存在し、疎水性アミノ酸が豊富なポケット中にヘムが結合していた。ヘム鉄は Tyr58 を軸配位子とする 5 配位構造をとっていた。Tyr58 のヒドロキシ酸素は、近傍の His111 のイプシロン位の窒素と水素結合を形成していた。HtaA-N と HtaA の C 末ドメイン (HtaA-C) および HtaB のアミノ酸配列を比較すると、HtaA-N においてヘム結合ポケットを形成する疎水性アミノ酸や、ヘム鉄の軸配位子である Tyr58、Tyr58 と水素結合している His は、HtaA-C、HtaB の対応する位置に保存されていた。このことから、HtaA-N、HtaA-C、HtaB は共通の構造基盤を有するヘム結合・輸送タンパク質であると考えられる。HtaA-N と共通のフォールディングを有する既知のヘム結合タンパク質は存在しなかった。しかしながら、これまでに報告されているヘム輸送タンパク質中に存在するヘム結合ドメイン (NEAT ドメイン) と

HtaA-Nとの間には、いくつかの共通する性質が見られた。HtaA-NとNEATドメインでは、アミノ酸配列の相同性はないが、 $\beta$ シート構造を骨格としているという共通点があった。また、ヘム結合部位に着目すると、いずれもTyrがヘムの軸配位子として機能しており、軸配位子であるTyrは近傍の残基と水素結合を形成している。この水素結合は、ヘム取込み系で機能するタンパク質に共通の構造基盤であると考えられ、ヘムの結合親和性の制御に寄与していると推定される。

#### B-1) 学術論文

**N. MURAKI and S. AONO**, “Structural Basis for Heme Recognition by HmuT Responsible for Heme Transport to the Heme Transporter in *Corynebacterium glutamicum*,” *Chem. Lett.* **45**, 24–26 (2015).

**N. MURAKI, C. KITATSUJI, M. OGURA, T. UCHIDA, K. ISHIMORI and S. AONO**, “Structural Characterization of Heme Environmental Mutants of CgHmuT that Shuttles Heme Molecules to Heme Transporters,” *Int. J. Mol. Sci.* **17**, 829 (10 pages) (2016).

**A. OTOMO, H. ISHIKAWA, M. MIZUNO, T. KIMURA, M. KUBO, Y. SHIRO, S. AONO and Y. MIZUTANI**, “A Study of the Dynamics of the Heme Pocket and C-Helix in CoxA Upon CO Dissociation Using Time-Resolved Visible and UV Resonance Raman Spectroscopy,” *J. Phys. Chem. B* **120**, 7836–7843 (2016).

**T. NAKAE, M. HIROTSU, S. AONO and H. NAKAJIMA**, “Visible-Light-Induced Release of CO by Thiolate Iron(III) Carbonyl Complexes Bearing N,C,S-Pincer Ligands,” *Dalton Trans.* **45**, 16153–16156 (2016).

#### B-4) 招待講演

**S. AONO**, “Structure and Function of Heme Acquisition System in *Corynebacterium glutamicum*,” 229<sup>th</sup> The Electrochemical Society Meeting, San Diego (U.S.A.), May 2016.

**S. AONO**, “Structural Basis for Heme Acquisition in *Corynebacterium glutamicum*,” 9<sup>th</sup> International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-9), Nanjing (China), July 2016.

**S. AONO**, “New Functions of Heme: Sensing and Signaling in Biological Systems,” 9<sup>th</sup> Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

**N. MURAKI**, “Structural Analysis of a Novel Heme Acquisition Protein, Heme Transport-Associated (Hta) Family,” 9<sup>th</sup> Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

**S. AONO**, “Structural Basis for the Molecular Mechanism of Heme Acquisition in *Corynebacterium glutamicum*,” 8<sup>th</sup> Asian Biological Inorganic Chemistry Conference, Auckland (New Zealand), December 2016.

#### B-7) 学会および社会的活動

##### 学協会役員等

触媒学会生体関連触媒研究会世話人 (2002–).

日本化学会生体機能関連化学部会幹事 (2007–2014).

日本化学会東海支部常任幹事 (2009–2010).

日本化学会生体機能関連化学・バイオテクノロジーディビジョン幹事 (2014–2015).

日本化学会生体機能関連化学・バイオテクノロジーディビジョン主査 (2016–).

#### 学会の組織委員等

14<sup>th</sup> International Conference on Biological Inorganic Chemistry 組織委員会総務委員長 (2009).

The first International Symposium on Biofunctional Chemistry 組織委員 (2012).

Japan-Korea Seminar on Biomolecular Sciences—Experiments and Simulations 組織委員 (2008–2010, 2012–2016).

#### 文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員 (2005–2007).

日本学術振興会国際事業委員会書面審査員 (2005–2007).

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2010–2012, 2014–2015).

日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査委員・書面評価員 (2016–2017).

大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員 (2016–).

#### 学会誌編集委員

*J. Biol. Inorg. Chem.*, Editorial Advisory Board (2002–2004).

*Biosensors*, Editorial Board (2010–).

*Chemistry Letters*, Section Editor (2013–).

#### B-10) 競争的資金

科研費特定領域研究(公募研究), 「タンパク質配位空間を利用した気体分子センシングとシグナル伝達」, 青野重利 (2005年–2007年).

内藤記念科学振興財団内藤記念科学奨励金(研究助成), 「気体分子による生体機能制御のケミカルバイオロジー」, 青野重利 (2006年).

倉田記念日立科学技術財団倉田奨励金(研究助成), 「一酸化炭素, 一酸化窒素, 酸素による遺伝子発現制御の分子機構」, 青野重利 (2006年).

科研費基盤研究(B), 「気体分子を生理的エフェクターとする金属含有センサータンパク質の構造と機能」, 青野重利 (2007年–2009年).

科研費特定領域研究(公募研究), 「ガス分子により駆動される新規なセンサータンパク質の機能発現機構」, 青野重利 (2007年–2010年).

ノバルティス科学振興財団研究奨励金, 「ガス分子により駆動される生体内シグナル伝達の分子機構解明」, 青野重利 (2010年).

野田産業科学研究所研究助成, 「ヘムをシグナル分子とする *Lactococcus lactis* における遺伝子発現制御」, 青野重利 (2011年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「環境汚染物質検出用の高感度蛍光プローブを装備したホーミングセルの創製」, 青野重利 (2011年–2012年).

科研費基盤研究(B), 「ガス分子による生体機能制御に関与するセンサータンパク質の構造と機能」, 青野重利 (2011年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「生物の環境センシング機能を基盤とした高感度な環境汚染物質検出システムの構築」, 青野重利 (2013年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「環境汚染物質に対する自発集積能を有する高感度汚染検出システムの構築」, 青野重利 (2015年–2016年).

### C) 研究活動の課題と展望

生物は、様々な外部環境の変化に応答・対応しながら、生体内の恒常性を維持している。我々の研究グループでは、生物にとって最も重要な遷移金属イオンである鉄イオンの細胞内恒常性維持に興味をもち、細胞内の鉄イオンの恒常性維持機構解明を目的とした研究に取り組んでいる。なかでも、鉄イオンを含む化合物であるヘム分子に着目し、細胞内ヘム濃度の恒常性維持に関与している転写調節因子やヘム分子取込み・排出に関与する一連のタンパク質の構造機能相関解明に関する研究に重点を置き、研究を進めている。本研究は、細胞中における遷移金属イオン濃度の恒常性維持機構の解明という、大きな研究目標への出発点ともいえる研究である。今後は、構造生物学的、ならびに生化学・分子生物学的な実験手法を活用し、ヘムを含む遷移金属イオンの細胞内濃度恒常性維持に関与するタンパク質群の構造機能相関解明を進めていきたいと考えている。

## 加藤 晃一（教授）（2008年4月1日着任）

A-1) 専門領域：構造生物学，タンパク質科学，糖鎖生物学，NMR 分光学

A-2) 研究課題：

- a) NMR 分光法をはじめとする物理化学的手法による複合糖質およびタンパク質の構造・ダイナミクス・相互作用の解析
- b) 生化学・分子生物学・超分子化学的アプローチによるタンパク質の構造機能解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 私たちは、細胞内で新たに生み出されたタンパク質の運命が、それらが担う糖鎖の構造によって決定されていることを明らかにしてきた。そして、その分子メカニズムを立体構造解析を通じて探求している。小胞体において新生糖タンパク質が立体構造を整えるプロセスにおいては、糖鎖の非還元末端に限られた時間だけ存在しているグルコース残基が分子シャペロンによって認識される目印として機能しており、これによって糖タンパク質の折り畳みが介助されている。私たちが2016年に立体構造を解き明かしたグルコシダーゼ II は、この目印を露出させて分子シャペロンが認識可能な状態にするとともに、一定時間が経過した後にこれを取り除くという2段階の反応を司る酵素である。X線結晶構造解析によって明らかにした本酵素の立体構造により、触媒サブユニットが2段階の反応を不連続的に触媒するのに適した瓢箪型の基質結合ポケットを備えていること、そしてそれが糖鎖認識ドメインを含む調節サブユニットと会合する仕組みの詳細を理解することができた。一方、分子動力学計算と NMR 解析によって、分子シャペロンが認識する糖鎖の動的3次元構造を明らかにした。具体的には、非還元末端グルコース残基を含む12糖からなる3分岐糖鎖について、レプリカ交換分子動力学計算によってコンフォメーション空間を探索するとともに、酵母遺伝子破壊、化学合成、試験管内酵素反応を駆使して本糖鎖の完全  $^{13}\text{C}$  標識体を作成し、還元末端に導入したランタニドイオンがもたらす常磁性効果を観測して原子の空間配置に関する情報を得た。こうした実験データによって裏付けられた分子シミュレーションにより、多様な構造を形成する糖鎖が分子シャペロンとの相互作用を通じて新たな立体構造を形成する誘導適合に基づく分子認識の仕組みを理解することができた。また、常磁性効果を利用した NMR 解析をタンパク質のコンフォメーション変化の観測に応用することにも成功した。具体的には、部位特異的にスピラベルを施したヒト免疫不全ウイルス逆転写酵素を用いて、阻害剤の結合に伴うコンフォメーション変化を常磁性緩和促進効果を通じて検出することができた（カセサート大・Supa Hannongbua 博士らとの共同研究）。この方法は、標的タンパク質にアロステリック効果を誘起する化合物を探索するための新たなアプローチを示すものである。
- b) 国内外の共同研究を通じて生命分子の構造機能に関するいくつかの新知見を得た。代表的な成果として、ジストログライカノパチーの原因遺伝子産物の遺伝子破壊細胞を利用した質量分析により  $\alpha$ -ジストログリカンのラミニン結合性糖鎖におけるポストリン酸修飾の構造を明らかにした（台湾中央研究院・Kay-Hooi Khoo 博士らとの共同研究）。また、重水素標識を利用した中性子散乱実験を非変性質量分析と組み合わせることにより、ヒト水晶体の分子シャペロンである  $\alpha\text{B}$ -クリスタリンの会合体の4次構造ダイナミクスおよびシアノバクテリアの時計タンパク質複合体形成の協同性とサブユニット空間配置に関する情報を得ることができた（京都大学・杉山正明博士，統合バイオ・内山進博士らとの共同研究）。

B-1) 学術論文

**M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and K. NISHIMURA**, “Membrane-Induced Dichotomous Conformation of Amyloid  $\beta$  with the Disordered N-Terminal Segment Followed by the Stable C-Terminal  $\beta$  Structure,” *PLoS One* **11**, e0146405 (2016).

**S. SEETAHA, M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, K. ISHII, S. HANNONGBUA, K. CHOOWONGKOMON and K. KATO**, “Application of Site-Specific Spin Labeling for NMR Detecting Inhibitor-Induced Conformational Change of HIV-1 Reverse Transcriptase,” *ChemMedChem* **11**, 363–366 (2016).

**T. SATOH, T. TOSHIMORI, G. W. YAN, T. YAMAGUCHI and K. KATO**, “Structural Basis for Two-Step Glucose Trimming by Glucosidase II Involved in ER Glycoprotein Quality Control,” *Sci. Rep.* **6**, 20575 (2016).

**J. HABCHI, P. AROSIO, M. PERNI, A. R. COSTA, M. YAGI-UTSUMI, P. JOSHI, S. CHIA, S. I. COHEN, M. B. MULLER, S. LINSE, E. A. NOLLEN, C. M. DOBSON, T. P. KNOWLES and M. VENDRUSCOLO**, “An Anticancer Drug Suppresses the Primary Nucleation Reaction That Initiates the Production of the Toxic A $\beta$ 42 Aggregates Linked with Alzheimer’s Disease,” *Sci. Adv.* **2**, e1501244 (2016).

**R. THAMMAPORN, K. ISHII, M. YAGI-UTSUMI, S. UCHIYAMA, S. HANNONGBUA and K. KATO**, “Mass Spectrometric Characterization of HIV-1 Reverse Transcriptase Interactions with Non-Nucleoside Reverse Transcriptase Inhibitors,” *Biol. Pharm. Bull.* **39**, 450–454 (2016).

**R. INOUE, T. TAKATA, N. FUJII, K. ISHII, S. UCHIYAMA, N. SATO, Y. OBA, K. WOOD, K. KATO, N. FUJII and M. SUGIYAMA**, “New Insight into the Dynamical System of  $\alpha$ B-Crystallin Oligomers,” *Sci. Rep.* **6**, 29208 (2016).

**H. ITO, H. KAJI, A. TOGAYACHI, P. AZADI, M. ISHIHARA, R. GEYER, C. GALUSKA, H. GEYER, K. KAKEHL, M. KINOSHITA, N. G. KARLSSON, C. S. JIN, K. KATO, H. YAGI, S. KONDO, N. KAWASAKI, N. HASHII, D. KOLARICH, K. STAVENHAGEN, N. H. PACKER, M. THAYSEN-ANDERSEN, M. NAKANO, N. TANIGUCHI, A. KURIMOTO, Y. WADA, M. TAJIRI, P. Y. YANG, W. Q. CAO, H. LI, P. M. RUDD and H. NARIMATSU**, “Comparison of Analytical Methods for Profiling *N*- and *O*-Linked Glycans from Cultured Cell Lines: HUPO Human Disease Glycomics/Proteome Initiative Multi-Institutional Study,” *Glycoconjugate J.* **33**, 405–415 (2016).

**M. SUGIYAMA, H. YAGI, K. ISHII, L. PORCAR, A. MARTEL, K. OYAMA, M. NODA, Y. YUNOKI, R. MURAKAMI, R. INOUE, N. SATO, Y. OBA, K. TERAUCHI, S. UCHIYAMA and K. KATO**, “Structural Characterization of the Circadian Clock Protein Complex Composed of KaiB and KaiC by Inverse Contrast-Matching Small-Angle Neutron Scattering,” *Sci. Rep.* **6**, 35567 (2016).

**T. SATOH, T. TOSHIMORI, M. NODA, S. UCHIYAMA and K. KATO**, “Interaction Mode between Catalytic and Regulatory Subunits in Glucosidase II Involved in ER Glycoprotein Quality Control,” *Protein Sci.* **25**, 2095–2101 (2016).

**H. YAGI, C. W. KUO, T. OBAYASHI, S. NINAGAWA, K. H. KHOO and K. KATO**, “Direct Mapping of Additional Modifications on Phosphorylated O-Glycans of  $\alpha$ -Dystroglycan by Mass Spectrometry Analysis in Conjunction with Knocking out of Causative Genes for Dystroglycanopathy,” *Mol. Cell Proteomics* **15**, 3424–3434 (2016).

B-3) 総説、著書

**M. YAGI-UTSUMI, T. YAMAGUCHI, R. KITAHARA and K. KATO**, “NMR Explorations of Biomolecular Systems with Rapid Conformational Exchanges,” in *Molecular Science of Fluctuations Toward Biological Functions*, M. Terazima, M. Kataoka, R. Ueoka and Y. Okamoto, Eds., 87–103 (2016).

**A. FURUKAWA, T. KONUMA, S. YANAKA and K. SUGASE**, “Quantitative Analysis of Protein-Ligand Interactions by NMR,” *Prog. Nucl. Mag. Reson. Spectrosc.* **96**, 47–57 (2016).

加藤晃一, 谷中冴子, 矢木-内海真穂, 「NMR 構造生物学がもたらす新たな創薬研究のツール」, *MEDCHEM NEWS* **26**, 195–200 (2016).

B-4) 招待講演 (\* 基調講演)

**S. YANAKA**, “The Analysis of Structural Dynamics Using NMR for the Understanding of the Protein Functions and for Designing Drugs,” The 12<sup>th</sup> SOKENDAI Life Science Retreat, Kakegawa (Japan), January 2016.

加藤晃一, 「糖鎖の構造生物学」, 第57回構造生物応用研究会, 東京, 2016年2月.

**T. SATOH, T. ZHU, T. TOSHIMORI, K. SUZUKI, G. I YAN, T. YAMAGUCHI and K. KATO**, “Structural Insights into N-Glycan-Mediated Fate-Determination of Glycoproteins in Cells,” Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON) 2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

**S. YANAKA, K. TSUMOTO and K. SUGASE**, “Affinity Improvement of Antibody through Mutational Modification of the Conformational Dynamics,” 8<sup>th</sup> Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

谷中冴子, 「溶液NMRを用いた蛋白質試料の測定と解析」, 2015年度NMR集合研修, 岡崎, 2016年2月.

**K. KATO**, “Structural Views of Functional Glycans of Pharmaceutical Interest,” 6<sup>th</sup> International Symposium on “Current Trends in Drug Discovery & Research,” Lucknow (India), February 2016.\*

**K. KATO and S. YANAKA**, “Structural Study of Glycoproteins Using Antibodies as Model Systems,” KIAS Seminar, Seoul (Korea), March 2016.

加藤晃一, 「糖鎖の生命分子構造学」, 第371回CBI学会講演会, 大阪, 2016年4月.

**K. KATO**, “Structural Views of Glycoprotein Quality Control in Cells,” 2<sup>nd</sup> KU-IMS Symposium, Bangkok (Thailand), June 2016.

加藤晃一, 「生生命分子の動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ関連の探査と設計原理の探求」, 平成28年度全体班会議, 長浜, 2016年6月.

加藤晃一, 「多彩な糖鎖の構造・ダイナミクス・相互作用の分子科学」, 第43回生体分子科学討論会, 名古屋, 2016年6月.

加藤晃一, 「糖鎖の生命分子構造学の探査・創生・展開」, 生体機能関連化学部会若手の会第28回サマースクール, 蒲郡, 2016年7月.

**K. KATO**, “Platform for Integrative Biological Sciences,” 28<sup>th</sup> International Carbohydrate Symposium, New Orleans (U.S.A.), July 2016.

**K. KATO**, “Structural Views of Glycan-Dependent Determination of Glycoprotein Fates in Cells,” 28<sup>th</sup> International Carbohydrate Symposium, New Orleans (U.S.A.), July 2016.\*

矢木真穂, 「タンパク質の構造ダイナミクスと分子集合メカニズムの理解を目指して」, 分子研若手の会, 岡崎, 2016年7月.

加藤晃一, 「バイオ医薬品の構造解析: 基礎と応用」, 技術情報協会セミナー, 東京, 2016年8月.

**K. KATO**, “Dynamic Ordering of Biomolecular and Artificial Systems,” OIIB Summer School 2016, Okazaki (Japan), August 2016.

**M. YAGI-UTSUMI and K. KATO**, “Interactions of Amyloidogenic Proteins with Membranes and Molecular Chaperones,” The 17<sup>th</sup> International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Kyoto (Japan), August 2016.

**K. KATO**, “Structural Views of Glycofunctions of Biological and Pharmaceutical Interest,” The 5<sup>th</sup> International Symposium on Drug Discovery and Design by NMR, Yokohama (Japan), August 2016.

**K. KATO, T. YAMAGUCHI and T. SATOH**, “Structural Basis of Glycoprotein-Fate Determination in Cell,” The 16<sup>th</sup> KIAS Conference on Protein Structure and Function, Seoul (Korea), September 2016.

**K. KATO**, “Carbohydrate Dynamics That Determine Protein Fates and Functions,” IGER International Symposium on Science of Molecular Assembly and Biomolecular Systems 2016, Nagoya (Japan), September 2016.

**K. KATO**, “Structural Basis for Dynamic Orchestration of Proteasomes,” The 42<sup>nd</sup> Naito Conference, Sapporo (Japan), October 2016.

**K. KATO**, “Structural Insights into Proteasome Orchestration Mechanisms,” The 9<sup>th</sup> Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

**M. YAGI-UTSUMI, T. SATOH and K. KATO**, “Structural Basis for Interactions of Molecular Chaperones with Intrinsically Disordered Proteins,” The 9<sup>th</sup> Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

**S. YANAKA, R. YOGO, H. YAGI and K. KATO**, “Characterization of Antibody Interactions in Serum Environments,” The 9<sup>th</sup> Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Gyeongju (Korea), November 2016.

加藤晃一, 「生命分子システムの秩序形成のダイナミクス」, 次世代脳プロジェクト冬のシンポジウム, 東京, 2016年12月.

#### B-6) 受賞, 表彰

加藤晃一, 日本薬学会奨励賞 (2000).

神谷由紀子, 特定領域研究「タンパク質の社会」全体班会議ポスター優秀賞 (2008).

西尾美穂, 第73回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2009).

神谷由紀子, 糖鎖科学名古屋拠点若手研究者奨励賞 (2009).

矢木真穂, 第74回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2010).

西尾美穂, 糖鎖科学名古屋拠点第8回「若手の力フォーラム」奨励賞 (2010).

加藤晃一, 日本薬学会学術振興賞 (2011).

矢木真穂, 第11回蛋白質科学会年会若手奨励賞 (2011).

山本さよこ, The International Symposium on Nuclear Magnetic Resonance 2011 (ISNMR 2011) 若手ポスター賞 (2011).

加藤晃一, 第48回ベルツ賞1等賞 (2011).

山口拓実, 日本化学会第92春季年会優秀講演賞(学術) (2012).

**Y. ZHANG**, 平成24年度総合研究大学院大学学長賞 (2012).

雲井健太郎, 第12回日本蛋白質科学会年会ポスター賞 (2012).

山口拓実, 第15回日本糖質学会ポスター賞 (2013).

**Y. ZHANG**, 糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2013).

山口拓実, 第7回バイオ関連化学シンポジウム講演賞 (2013).

山口拓実, 第3回自然科学研究機構若手研究者賞 (2014).

**T. ZHU**, 第87回日本生化学会大会若手優秀発表者賞(鈴木紘一メモリアル賞) (2014).

矢木真穂, The 3<sup>rd</sup> International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions” Poster Presentation Award (2015).



**A. SIKDAR**, The Winter School of Sokendai/ Asian CORE Program, Poster Presentation Award (2015).  
**T. ZHU**, 第12回「若手の力」フォーラム平成27年度糖鎖科学中部拠点奨励賞 (2015).  
**T. ZHU**, The 4<sup>th</sup> International Symposium of “Dynamical ordering of biomolecular systems for creation of integrated functions”  
Poster Presentation Award (2015).  
谷中冴子, 第32回井上研究奨励賞 (2016).  
谷中冴子, 第80回日本生化学会中部支部例会奨励賞 (2016).  
與語理那, OIIB retreat 2016 Best Poster Award (2016).  
柚木康弘, 第4回将来を見据えた生体分子の構造・機能解析から分子設計に関する研究会優秀発表賞 (2016).

#### B-7) 学会および社会的活動

##### 学協会役員等

日本バイオイメージング学会評議員 (1995–), 理事 (2012–2016).  
日本生化学会評議員 (2002–), 代議員 (2005–).  
日本糖質学会評議員 (2003–), 理事 (2013–).  
日本核磁気共鳴学会評議員 (2006–2012, 2016–), 理事 (2008–2012, 2014–), 副会長 (2016–).  
NPO バイオものづくり中部理事 (2008–2016).  
日本蛋白質科学会理事 (2010–2014, 2015–), 副会長 (2016–).  
日本糖鎖科学コンソーシアム幹事 (2012–), 常任幹事 (2016–).  
日本生物物理学会委員 (2013), 代議員 (2014–2015).  
日本生化学会中部支部幹事 (2014–), 副支部長 (2016–).

##### 学会の組織委員等

The 71<sup>st</sup> Okazaki Conference “New perspectives on molecular science of glycoconjugates” 組織委員 (2011).  
第51回NMR 討論会運営委員 (2012).  
第27回生体系磁気共鳴国際会議 (ICMRBS) 実行委員 (2013–2016).  
第13回糖鎖科学コンソーシアムシンポジウム世話人代表 (2015).  
第25回バイオイメージング学会組織委員・大会長 (2016).

##### 文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会科学研究費委員会専門委員 (2009–).  
日本学術振興会先端科学シンポジウム事業委員会 プランニング・グループ・メンバー (2009–2011).  
生物系特定産業技術研究支援センターイノベーション創出基礎的研究推進事業書類審査専門委員 (2009–).  
大阪大学蛋白質研究所専門委員会委員 (2014–), 同委員長 (2015).  
大阪大学蛋白質研究所「共同利用・共同研究」委員会超高磁場NMR 共同利用・共同研究専門部会委員 (2012–).  
独立行政法人科学技術振興機構戦略研究推進部外部評価委員 (2012–2014).  
経済産業省 第3者委員会委員 (2013).  
文部科学省研究振興局 委員会評価者 (2013–).  
独立行政法人大学評価・学位授与機構教育研究評価委員会専門委員 (2015–).  
理化学研究所NMR 施設NMR 利用研究ワーキンググループ委員 (2016–).

#### 学会誌編集委員

*Open Glycoscience*, Editorial board member (2008–).  
*Glycoconjugate Journal*, Editorial board member (2009–).  
*World Journal of Biological Chemistry*, Editorial board member (2010–).  
*Journal of Glycomics & Lipidomics*, Editorial board member (2010–2015).  
*Glycobiology*, Editorial board member (2011–).  
*The Journal of Biochemistry*, Associate Editor (2014–).  
*Scientific Reports*, Editorial board member (2015–).

#### 競争的資金等の領域長等

新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」領域代表者 (2013–).

#### その他

(株) グライエンス科学技術顧問 (2004–2014), 取締役 (2005–2013).  
(株) 医学生物学研究所科学技術顧問 (2014–2016).  
総合研究大学院大学統合生命科学特別委員会委員長 (2013–2015).  
出前授業「身近な化学反応で学ぶ! タンパク質のかたちとはたらき」, 矢作北中学校 (2016). (矢木真穂)

#### B-8) 大学での講義, 客員

名古屋市立大学薬学部, 大学院薬学研究科, 特任教授, 2008年4月–.  
名古屋市立大学薬学部, 「構造生物学」「薬学物理化学II」「生命薬科学研究入門」「薬学概論」「テーマ科目 創薬と生命」「免疫学」「バイオインフォマティクス」「創薬科学・知的財産活用論」, 2016年.  
名古屋市立大学大学院薬学研究科, 「創薬生命科学基礎II」「生命分子構造学特論」, 2016年.  
理化学研究所, 客員研究員, 2009年4月–.  
国立長寿医療研究センター認知症先進医療開発センター, 客員研究員, 2011年4月–.  
名古屋大学大学院理学研究科, 非常勤講師, グリーン自然科学国際教育研究プログラム(博士課程リーディングプログラム自然科学連携講義)「構造生物学特論I・II」, 2016年.

#### B-10) 競争的資金

特定非営利活動法人パイオものづくり中部, 「糖鎖分科会」, 加藤晃一 (2005年–2006年).  
科研費特定領域研究「グライコミクス」, 「NMRを利用した構造グライコミクス」, 加藤晃一 (2005年–2006年).  
科研費萌芽研究, 「味覚修飾タンパク質クルクリンの機能発現メカニズムの解明と応用」, 加藤晃一 (2005年–2006年).  
ノバルティス研究奨励金, 「NMR 構造生物学によるパーキンソン病発症メカニズムの解明」, 加藤晃一 (2006年).  
科研費基盤研究(B), 「タンパク質分解における糖鎖修飾系とユビキチン修飾系のクロストークの構造的基盤」, 加藤晃一 (2006年–2007年).  
科研費新学術領域研究「揺らぎが機能を決める生命分子の科学」(計画研究), 「NMRを利用したタンパク質および複合糖質の揺らぎの検出とその機能関連の探査」, 加藤晃一 (2008年–2013年).  
科研費基盤研究(B), 「ポスト小胞体品質管理における細胞内レクチンの分子認識と超分子形成の構造基盤の解明」, 加藤晃一 (2009年–).

科研費研究活動スタート支援,「アミロイド線維末端の特異構造の解明に基づく線維伸長メカニズムの理解」, 矢木真穂 (2011年–2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「分子シャペロン機能を有するシャトル型プロテアソーム活性化因子の同定と構造機能解析」, 加藤晃一 (2012年–2014年).

科研費基盤研究(A),「糖鎖認識系を標的とする創薬を目指した複合糖質機能の構造基盤の解明と分子設計」, 加藤晃一 (2012年–2015年).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(総括班),「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現の研究に関する総括」, 加藤晃一 (2013年–).

科研費新学術領域研究「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」(計画研究),「生命分子の動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ相関の探査と設計原理の探求」, 加藤晃一 (2013年–).

科研費挑戦的萌芽研究,「機能性ネオ糖脂質クラスターを利用した神経幹細胞の幹細胞性制御」, 加藤晃一 (2014年–).

科研費若手研究(B),「ガングリオシド糖脂質クラスター上におけるアミロイド $\beta$ の構造転換の精密解析」, 矢木真穂 (2015年–).

科研費基盤研究(A),「多元的構造生物学アプローチによるプロテアソーム形成機構の解明と創薬への展開」, 加藤晃一 (2015年–).

科研費新学術領域研究,「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現の研究推進のための国際活動支援」, 加藤晃一 (2015年–).

宇宙航空研究開発機構「さほう」利用フィジビリティスタディ,「神経変性疾患の発症機構解明に向けた微小重力環境下でのアミロイド線維形成と性状評価」, 加藤晃一 (2016年–).

#### B-11) 産学連携

協和発酵キリン(株)抗体研究所,「ヒトIgG1とヒトFc $\gamma$ 受容体IIIaとの結合状態の構造解析」, 加藤晃一 (2016年).

味の素(株)ライフサイエンス研究所,「味覚変調蛋白質の立体構造形成と機能発現に関する研究」, 加藤晃一 (2016年).

太陽日酸(株),「タンパク質の安定同位体標識技術の開発」, 加藤晃一 (2016年).

#### C) 研究活動の課題と展望

2017年は、新学術領域「生命分子システムにおける動的秩序形成と高次機能発現」および岡崎統合バイオサイエンスセンターのオリオンプロジェクトのさらなる躍進を目指すとともに、新たな生命科学研究の方向性を模索する年となるであろう。研究プロジェクトとしては、前年までの成果を踏まえて、生命分子素子がダイナミックな集合離散を通じて動的な秩序構造を形成するメカニズムを明らかにするとともに、生命分子集団の自己組織系に内在する精緻にデザインされた不安定性をあぶり出し、機能発現にいたる時空間的展開の原理を理解することを目指す。そのために、生命分子システムの動的秩序形成におけるマイクロ-マクロ相関の探査を可能とする物理化学的計測手法の開発と応用に一層力を注ぐ。さらに、超分子化学と生命分子科学の融合研究と国際共同研究の発展を推進する。

## 飯野亮太(教授)(2014年6月1日着任)

A-1) 専門領域：生物物理学，分子機械，分子モーター，1分子計測，構造解析

A-2) 研究課題：

- a) リニア分子モーターセルラーゼ，キチナーゼのエネルギー変換機構の解明
- b) 回転分子モーター V-ATPase のエネルギー変換機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) エキソ型セルラーゼやキチナーゼは結晶性多糖を加水分解しながら連続的に直進運動するリニア分子モーターである。しかしながら，キネシンやミオシン等の ATP 駆動のリニア分子モーターとは運動機構が全く異なる。我々はセルラーゼ，キチナーゼの作動機構の解明を目指し，1分子計測，構造解析，非天然分子創造という複合アプローチで研究を行っている。カビ *Trichoderma reesei* 由来の *TrCel6A* は加水分解を行う触媒ドメイン (CD) と結合ドメイン (CBM) が糖鎖修飾されたリンカー領域で繋がった構造をしている。しかしそれぞれのドメインが分解反応においてどのような役割を担っているのか，詳細に解析した例はなかった。また，*TrCel6A* はセルロース上を直進運動しながら分解反応を行うと考えられていたが，実際に運動を観測した例はなかった。蛍光1分子観察により結合，運動，解離の反応時定数を解析した結果，リンカー領域でセルロースに結合し，結合ドメインで結合する結晶面の選択性を生み出している事が明らかとなった。また不活性型酵素と天然型酵素の運動を比較した結果，*TrCel6A* は 8.8 nm/sec の速度で直進運動し，一回の結合あたり 68 回加水分解反応を行っている事が明らかとなった。加えてドメイン構成の異なる細菌 *Cellulomonas fimi* 由来セルラーゼ *CfCel6B* と *TrCel6A* の結晶性セルロース分解反応の素過程 (結合・分解・解離) の速度定数を全て明らかにすることにも成功し，構造と動態の相関解析に成功した。その結果を基に，各ドメインを交換したキメラ酵素の創成に取り組んでいる。キチナーゼについては金ナノ粒子の修飾方法の改良と酵素への結合箇所の検討により 1.2 nm 間隔のステップ運動を検出する事に成功した。計測の精度をさらに上げる為，顕微鏡の改良を行っている。
- b) 腸内連鎖球菌由来  $\text{Na}^+$  輸送性 V-ATPase ( $\text{EhV}_0\text{V}_1$ ) は，ATP 加水分解反応のエネルギーで回転運動して  $\text{Na}^+$  イオンを能動輸送する分子モーターであり，親水性部  $\text{EhV}_1$  を単離すると ATP を分解しながら回転する。 $\text{EhV}_1$  の化学力学共役機構を明らかにするため，ATP 加水分解反応に重要なアミノ酸残基アルギニンフィンガーに変異を導入し詳細な1分子解析を行った。その結果，反応生成物 ADP の解離に相当する素過程の同定に初めて成功した。

B-1) 学術論文

**M. BABA, K. IWAMOTO, R. IINO, H. UENO, M. HARA, A. NAKANISHIA, J. KISHIKAWA, H. NOJI and K. YOKOYAMA**, "Rotation of Artificial Rotor Axles in Rotary Molecular Motors," *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **113**, 11214–11219 (2016).

**A. NAKAMURA, T. TASAKI, D. ISHIWATA, M. YAMAMOTO, Y. OKUNI, A. VISOOTSAT, M. MAXIMILIEN, H. NOJI, T. UCHIYAMA, M. SAMEJIMA, K. IGARASHI and R. IINO**, "Single-Molecule Imaging Analysis of Binding, Processive Movement, and Dissociation of Cellobiohydrolase *Trichoderma reesei* Cel6A and Its Domains on Crystalline Cellulose," *J. Biol. Chem.* **291**, 22404–22413 (2016).

**H. ISOJIMA, R. IINO, Y. NIITANI, H. NOJI and M. TOMISHIGE**, “Direct Observation of Intermediate States During the Stepping Motion Of Kinesin-1,” *Nat. Chem. Biol.* **12**, 290–297 (2016).

**Y. MATSUMOTO, S. SAKAKIHARA, A. GRUSHNIKOV, K. KIKUCHI, H. NOJI, A. YAMAGUCHI, R. IINO, Y. YAGI and K. NISHINO**, “A Microfluidic Channel Method for Rapid Drug-Susceptibility Testing of *Pseudomonas aeruginosa*,” *PLoS One* **11**, e0148797 (2016).

**M. TACHIOKA, N. SUGIMOTO, A. NAKAMURA, N. SUNAGAWA, T. ISHIDA, T. UCHIYAMA, K. IGARASHI and M. SAMEJIMA**, “Development of Simple Random Mutagenesis Protocol for the Protein Expression System in *Pichia pastoris*,” *Biotechnol. Biofuels* **9**, 199 (10 pages) (2016).

B-3) 総説, 著書

**R. IINO, S. SAKAKIHARA, Y. MATSUMOTO and K. NISHINO**, “Single-cell detection and collection of persister bacteria in a directly accessible femtoliter droplet array,” *Methods. Mol. Biol.* **1333**, 101–109 (2016).

**A. NAKAMURA, T. ISHIDA, M. SAMEJIMA and K. IGARASHI**, “The use of neutron scattering to determine the functional structure of glycoside hydrolase,” *Curr. Opin. Struct. Biol.* **40**, 54–61 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 日下勝弘, 田中伊知朗, 新村信雄, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子/X線複合構造解析で酵素触媒反応におけるプロトンリレーを可視化する」, *生物物理* **56(3)**, 171–173 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子構造解析で明らかになった立体反転型セルラーゼのユニークな活性残基」, *バイオサイエンスとインダストリー* **74(3)**, 231–233 (2016).

中村彰彦, 石田卓也, 日下勝弘, 田中伊知朗, 新村信雄, 鮫島正浩, 五十嵐圭日子, 「中性子/X線結晶構造解析によって明らかとなった反転型セルロース加水分解酵素のプロトン伝達経路を含んだ反応機構」, *中性子科学会「波紋」* **26(3)**, 139–142, (2016).

B-4) 招待講演

**R. IINO**, “Watching dynamic motions of biological molecular machines,” 7<sup>th</sup> RIES-Hokudai International Symposium, Sapporo (Japan), December 2016.

**R. IINO**, “Intermediate states during the stepping motion of kinesin-1 revealed by high-speed single-molecule imaging with gold nanoprobes,” 4<sup>th</sup> Kanazawa Bio-AFM Workshop, Kanazawa (Japan), October 2016.

**R. IINO**, “Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1,” Biophysical Society Thematic Meeting: Engineering Approaches to Biomolecular Motors: From in vitro to in vivo, Vancouver (Canada), June 2016.

**R. IINO**, “Biomass decomposition by cellulase observed at the single-molecule level,” The symposium at Faculty of Science, Kasetsart University, Bangkok (Thailand), June 2016.

**R. IINO**, “Direct observation of intermediate states during the stepping motion of kinesin-1,” 8<sup>th</sup> Japan-Korea Seminars on Biomolecular Science: Experiments and Simulation, Okazaki (Japan), February 2016.

**R. IINO**, “Single-molecule analysis of new molecular motors hydrolyzing crystalline polysaccharides,” PACCON2016, Bangkok (Thailand), February 2016.

飯野亮太, 「金ナノプローブを用いた生体分子モーターの高速・高精度1分子計測」, 生理研研究会「電子顕微鏡ビッグデータが拓くバイオメディカルサイエンス～限界を超えるための顕微鏡技術～」, 岡崎, 2016年11月.

飯野亮太,「マイクロ・ナノデバイスを用いた1分子・1細胞ナノバイオ計測」,MNC2016技術セミナー「マイクロ・ナノバイオ技術の最前線」,京都,2016年11月.

飯野亮太,「金ナノプローブで生体分子の速いダイナミクスを観る」,第25回バイオイメージング学会学術集会シンポジウム「ナノバイオイメージング:1分子から細胞までの先端手法」,名古屋,2016年9月.

飯野亮太,「タンパク質分子機械を観る,操る,壊す,創る」,日本化学会生体機能関連化学部会若手の会第28回サマースクール,蒲郡,2016年7月.

飯野亮太,“Our approaches toward ‘real’ engineering of protein molecular machines,”分子研研究会「超機能分子の創成:合成,計測,数理が織りなす社会実装分子の戦略的設計と開発」,岡崎,2016年6月.

飯野亮太,「機動分子科学:趣旨説明」,日本化学会第96春季年会特別企画シンポジウム「機能を動きで実現する機動分子の科学」,京田辺,2016年3月.

飯野亮太,「金ナノプローブでタンパク質分子モーターのダイナミクスを観る」,新学術領域研究「柔らかな分子系」第15回ワークショップ『ダイナミクス観測からタンパク質の「柔らかさ」を観る』,大阪,2016年3月.

A. NAKAMURA, “Analysis of functional structure of cellulase by neutron crystallography,” 8<sup>th</sup> Japan-Korea Seminars on Biomolecular Sciences, Okazaki (Japan), February 2016.

#### B-6) 受賞,表彰

R. IINO, Emerging Investigator. Lab on a Chip., The Royal Society of Chemistry, U.K. (2012).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会代議員 (2014–2016).

日本生物物理学会分野別専門委員 (A-13. モータータンパク質) (2014).

日本生物物理学会分野別専門委員 (E-04. タンパク質工学) (2016).

学会誌編集委員

日本生物物理学会学会誌「生物物理」編集委員 (2014–2015).

*Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, Associate Editor (2015.4.29–).

その他

公益財団法人新世代研究所バイオ単分子研究会委員 (2012.4.2–2018.3).

日本生物物理学会小中高校への講師派遣サポート事業講師 (2016.11–).

#### B-8) 大学での講義,客員

名古屋大学IGER,非常勤講師,「自然科学連携講義1」,2016年11月.

#### B-10) 競争的資金

自然科学研究機構新分野創成センターイメージングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノプローブ表面の電場増強を利用した生体分子モーターの動きと化学反応の複合1分子計測法の開発」,飯野亮太 (2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「糖質加水分解サイボーグリア分子モーターの創生」,飯野亮太 (2016年–2017年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「金属ナノプローブを用いた分子モーターの運動と構造変化の高速1分子計測」,飯野亮太(2016年-2017年).

自然科学研究機構新分野創成センターイメージングサイエンス研究分野プロジェクト,「金ナノロッドの高速高精度光学イメージングによる生体分子モーターの複合1分子計測」,飯野亮太(2015年).

科研費基盤研究(B),「ナトリウムイオン輸送性 V-ATPase のエネルギー変換機構の解明」,飯野亮太(2015年-2017年).

大幸財団自然科学研究助成,「回虫精子アメーバ運動の完全再構成にむけたプロテオーム解析」,飯野亮太(2015年-2016年).

科研費研究活動スタート支援,「セルロース分解酵素のモーター運動に寄与する構造要素の解明」,中村彰彦(2015年-2016年).

科研費新学術領域研究「動的秩序と機能」(公募研究),「ATP 駆動サイボグ回転分子モーターの創生」,飯野亮太(2014年-2015年).

科研費新学術領域研究「柔らかな分子系」(公募研究),「金ナノロッドを用いた分子モーター構造ダイナミクスの高速1分子計測」,飯野亮太(2014年-2015年).

科研費特別研究員奨励費,「ダブルドメインセルラーゼの吸着バランス制御による結晶性多糖構造分解反応の促進」,中村彰彦(2013年-2014年).

科研費基盤研究(B),「リニアモータータンパク質糖質加水分解酵素の1ナノメートルステップの1分子計測」,飯野亮太(2012年-2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「生体・人工ハイブリッドナノモーターの創製」,飯野亮太(2012年-2013年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究),「分子モーターの構造揺らぎを調べる超高速配向イメージング法の開発」,飯野亮太(2011年-2012年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「生細胞内1分子 FRET 法による回転モータータンパク質のダイナミクス計測」,飯野亮太(2010年-2011年).

科研費新学術領域研究「揺らぎと生体機能」(公募研究),「モータータンパク質の揺らぎと性能の相関を調べる超高速光学顕微鏡の開発」,飯野亮太(2009年-2010年).

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転する ATP 合成酵素を1分子技術とマイクロデバイスで可視化する」,飯野亮太(2009年-2010年).

科研費若手研究(B),「プロトン駆動力で回転する生体分子モーター ATP 合成酵素の1分子計測」,飯野亮太(2006年-2008年).

日本学術振興会二国間交流事業共同研究,「生細胞内で働く ATP 合成酵素の回転速度を1分子技術で計測する」,飯野亮太(2010年-2011年).

大阪大学産業科学研究所リーダーシップ支援経費,「1細菌培養・観察・回収用マイクロドロップレットアレイの開発」,飯野亮太(2009年).

### C) 研究活動の課題と展望

リニア分子モーターセルラーゼ, キチナーゼについては, 運動素過程(ポーズとステップ)の可視化が重要な課題である。長時間・高空間分解能1分子計測によりキチナーゼの1 nm ステップを可視化する事ができたが, 更なる解析の為に, 顕微鏡の改良を行うだけでなく観測データの解析方法の改良も試みる。また, ドメイン交換した非天然セルラーゼを創造し, 天然型の性能を凌駕する分子を創り出す。回転分子モーター V-ATPase に関しては, ATP 加水分解駆動時の化学力学共役の完全な理解, およびNa<sup>+</sup> 輸送を伴う回転運動の詳細な解析が今後の課題である。さらに, ATP 結合部位(触媒サイト)やイオン結合部位を改造し, 天然に存在しない新しい機能を持つ回転分子モーターを創り出す。

栗原 顕 輔 (特任准教授(岡崎オリオンプロジェクト)) (2014年5月1日着任)

A-1) 専門領域：界面化学, 超分子化学

A-2) 研究課題：

- a) 増殖に最適な組成選択を行うベシクル系の構築
- b) ペプチド合成系を内包するベシクルの創成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 分子集合体に異種の膜分子前駆体を添加し、別の分子集合体を誕生させて、その増殖ダイナミクスを見守る。自己触媒反応系を内部に持ち、増殖するオクチルアニリンの油滴に、アルデヒドを持つ膜分子前駆体を添加すると、自己生産するベシクルへと形態変化する系を構築した。この成果を論文として報告した。このようなベシクルの多様性は、生命起源が自己複製する脂質膜から誕生したとするリピッドワールド仮説を拡張するものである。
- b) 有機化学を基礎とした細胞モデルに代謝機能、すなわち酵素を構成するタンパク質をベシクル内部で形成し、しかも増殖が可能な人工細胞ははまだ構築されていない。そこで、本研究は、ベシクル外部に存在しているアミノ酸を輸送体が捕捉することで、ベシクルの内部へと輸送し、ペプチドを化学合成する人工リボソームシステムを内包する細胞モデルの構築を目的とする。またアミノ酸を取り込んでペプチドを合成する油滴と、境界膜に化学変換できる油滴の2つの油滴システムを利用し、内部で高分子を合成するベシクル型人工細胞を構築する。

B-1) 学術論文

**L. SHENG and K. KURIHARA**, "Catalytic Amphiphile Generation in a Self-Reproducing Giant Vesicle," *Chem. Lett.* **45**, 598–600 (2016).

**L. SHENG and K. KURIHARA**, "Transformation of Oil Droplets into Giant Vesicles," *Chem. Commun.* **52**, 7786–7789 (2016).

B-4) 招待講演

**K. KURIHARA**, "A chemical approach to primitive cell," The 6<sup>th</sup> Yonsei-IMS Joint Workshop, Seoul (Korea), March 2016.  
栗原顕輔, 「外部環境に応答する原始細胞モデルの構築」, ABC ミニワークショップ「極限環境の光合成」, 立川, 2016年2月.

**K. KURIHARA**, "A study of the primitive cell as an assembly plant of the prebiotic materials," The 4<sup>th</sup> Astrobiology Workshop, Tokyo (Japan), March 2016.

栗原顕輔, 「柔らかい分子集合体で創る人工細胞」, 第一回オルガネラ生理学研究会, 岡崎, 2016年7月.

栗原顕輔, 「化学で創る人工細胞」, 細胞を創る研究会 9.0, 東京, 2016年11月.



## B-7) 学会および社会的活動

### その他

- あいち科学技術教育推進協議会発表会「科学三昧 in あいち 2014」英語発表指導 (2014).
- 愛知教育大学付属岡崎中学校取材 (2015).
- 第6回CSJ 化学フェスタ2016ポスター審査 (2016).
- 朝日新聞「先端人」取材 (2016).
- 国際芸術祭「虹のキャラヴァンサライ・あいちトリエンナーレ2016」(2016).

## B-8) 大学での講義, 客員

- 総合研究大学院大学,「統合生命科学教育プログラム」, 2016年 10月-11月.

## B-10) 競争的資金

- 科研費若手研究(B),「交差触媒系を内包するベシクル型人工細胞の構築」, 栗原顕輔 (2015年-2017年).
- 自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト,「生命材料物質の組み立て場としてみた原始細胞膜の基礎的研究」, 栗原顕輔 (2016年).
- クリタ水・環境化学振興財団研究助成,「原始海洋に誕生した細胞モデルの研究」, 栗原顕輔 (2016年).
- 中部科学技術センター学術奨励研究助成,「ドラッグデリバリーシステムを指向したオリゴペプチド内包リポソームの開発」, 栗原顕輔 (2016年).
- 花王芸術・科学財団化学・物理学分野助成,「化学的リポソームシステムを内包するジャイアントベシクルの創成」, 栗原顕輔 (2016年).

## C) 研究活動の課題と展望

本研究では、構成的アプローチの考え方から、既知の分子で「生命らしい」機能や挙動を示す物質を創成することを目的としている。この目標を達成するために、現在の細胞と同じ物性をもつ両親媒性分子で、人工細胞モデルを構築することが両課題で共通となっている。課題 a では油状のオクチルアニリンを用いて別相にすることで可逆反応を偏らせて、自己生産する油滴系を構築し、それを足場にベシクルの大量生産に成功した。また課題 b ではこれまでの「うつわ」ありき的手法ではなく、不定形な状態から代謝に必要なたんぱく質モデルを合成したのちに、「うつわ」を形成するという斬新な概念を提案した。特別な機能を持たない物質から構築される人工細胞が、どのように「生命らしい」挙動を獲得するのかを、本アプローチで解決したい。

## 生体分子情報研究部門

古 谷 祐 詞 (准教授) (2009 年 3 月 1 日着任)

A-1) 専門領域：生物物理学, 生体分子科学

A-2) 研究課題：

- a) 哺乳動物カリウムイオンチャネルのイオン選択性制御メカニズムの解析
- b) 耐熱性ロドプシン TR が起こす光反応の分子機構, およびその特異性の解明
- c) ウシ由来オプシンへの匂い物質結合の赤外分光解析
- d) 高圧力下での時間分解赤外分光計測系の構築とバクテリオロドプシンへの適用
- e) 急速溶液交換法を用いたイオンチャネル, トランスポーターの分子機構解析
- f) 無脊椎動物の脳内光受容機能を担うタンパク質の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 細胞が機能するためには, カリウムイオンを選択的に透過するイオンチャネル (カリウムチャネル) が重要である。TWIK-1 というカリウムチャネルは細胞の静止膜電位の調整にはたっているが, 細胞外環境に応じてナトリウムイオンの透過性が上昇するという特異な性質を有する。TWIK-1 タンパク質を精製し, 脂質小胞に再構成した試料に対して, 蛍光インジケータを用いてイオンの透過機能を解析し, このチャネルタンパク質単体がナトリウムイオンを透過する特性を持つことを確認した。さらに機能解析に用いたタンパク質と脂質の組み合わせで再構成試料を作製し, より生理的な状態でのイオン交換に伴う赤外吸収変化の解析に成功した。
- b) Thermophilic Rhodopsin (TR) は最近になって発見された初めての好熱菌由来のロドプシンでありその熱安定性の分子機構に興味を持たれている。昨年度は TR の野生型試料と変異体試料を用いて, 光反応の大枠とその温度依存性について明らかにした。今年度は TR の発色団近傍にあるアスパラギン酸残基 229 番を変異させた試料の測定も加え, 発色団からのプロトン移動にこの残基が不可欠であることを明らかにした。また, TR と分子系統的に近縁だが耐熱性を持たない *Gloeobacter Rhodopsin* (GR) と比較し, 両者の光反応過程における構造変化の違いを浮き彫りにした。本研究は岡山大学薬学部の須藤雄気教授, 塚本卓助教との共同研究として進めている。
- c) 視覚ロドプシンは G タンパク質共役受容体 (GPCR) と呼ばれる巨大な膜タンパク質ファミリーの 1 種であるため, 同じく GPCR に属する嗅覚を司る受容体と共通した分子機構が存在する。昨年度より, 発色団を排除したロドプシン (オプシン) への匂い物質の結合を全反射赤外分光法 (ATR) で調べている。昨年度の段階で匂い物質結合に伴うカルボン酸やタンパク質骨格由来の吸収変化の信号を得ることができていたが, SN 比の悪い結果に留まっていた。今年度はさらに実験回数を増やし SN 比を向上した。変異体を用いた計測から, 匂い物質とオプシンとの結合様式について推定した。本研究はカナダのトロント大学医学部の Oliver P. Ernst 教授, 森住威文研究員との共同研究として進めている。
- d) 時間分解フーリエ変換赤外分光 (TR-FTIR) 法はタンパク質反応の解析に有用な手法であるが, これが物理化学的に重要な圧力摂動の下で適用されたことはほとんどない。そこで, 光反応タンパク質の高圧下 TR-FTIR 測定が可能な系の構築を開始した。まず高圧セル (ダイヤモンドアンビルセル) を購入し, さらに赤外分光器内でのセル位置の精密な制御と温度管理が可能な高圧セルホルダーを分子研装置開発室の協力のもと製作した。この測定系を, バク

テリオロドプシンに適用し、高圧力下での時間分解赤外差スペクトルを得ることに成功した。

- e) これまでに全反射赤外計測用の結晶上に吸着させたイオンチャネルやトランスポーターなどの膜タンパク質が浸された緩衝液を急速に交換することで時間分解赤外分光計測を行う実験系を構築した。本手法をメリビオース輸送タンパク質に適用し、メリビオースやグルコースが含まれる緩衝液に急速交換することで、時間分解赤外スペクトルを得た。本研究は、スペインのバレンシア大学の Victor Lorenz-Fonfria 博士との共同研究として進めている。
- f) 多くの動物は、視覚以外にも概日時計の調節などの用途に光情報を用いている。最近の研究から、Opn3 という光受容タンパク質が無脊椎動物の脳内光受容に関わることが示されている。そこで、種々の無脊椎動物の Opn3 の吸収波長特性を調べた結果、紫外領域から緑色光領域まで、動物種によって大きく異なることを見出した。また、環形動物ゴカイの Opn3 については、紫外光受容をもたらすアミノ酸残基を特定し、細胞内に紫外光シグナルを伝達するメカニズムを明らかにした。

#### B-1) 学術論文

**M. SRISA-ART and Y. FURUTANI**, “Simple and Rapid Fabrication of PDMS Microfluidic Devices Compatible with FTIR Microspectroscopy,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **89**, 196–202 (2016).

**A. SAKAMOTO, T. TSUKAMOTO, Y. FURUTANI, Y. SUDO, K. SHIMADA, A. TOMITA, H. KIYOI, T. KATO and T. FUNATSU**, “Live-Cell Single-Molecule Imaging of the Cytokine Receptor MPL for Analysis of Dynamic Dimerization,” *J. Mol. Cell Biol.* **8**, 553–555 (2016).

**K. KUROI, F. SATO, Y. NAKASONE, K. ZIKIHARA, S. TOKUTOMI and M. TERAZIMA**, “Time-Resolved Fluctuation during the Photochemical Reaction of a Photoreceptor Protein: Phototropin1LOV2-Linker,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 6228–6238 (2016).

**T. NAKAJIMA, K. KUROI, Y. NAKASONE, K. OKAJIMA, M. IKEUCHI, S. TOKUTOMI and M. TERAZIMA**, “Anomalous Pressure Effects on the Photoreaction of a Light-Sensor Protein from *Synechocystis*, PixD (Slr1694), and the Compressibility Change of Its Intermediates,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 25915–25925 (2016).

#### B-3) 総説, 著書

古谷祐詞, 「光誘起赤外差分分光法による微生物型ロドプシンのイオン輸送機構の研究」, *日本レーザー医学会誌* **36(4)**, 460–465 (2016).

古谷祐詞, 「菌類のロドプシン」, 「光と生命の事典」, 朝倉書店, 154–155 (2016).

塚本寿夫, 「無脊椎動物オプシン」, 「光と生命の事典」, 朝倉書店, 176–177 (2016).

#### B-4) 招待講演

**Y. FURUTANI**, “Molecular Mechanisms of Retinal Proteins with Involvement of Water Molecules Studied by Light-Induced Difference Infrared Spectroscopy,” 26<sup>th</sup> IUPAC International Symposium on Photochemistry, Osaka City Central Public Hall, Osaka (Japan), April 2016.

古谷祐詞, 「赤外分光計測によるカリウムチャネルのイオン選択機構の研究」, 第1回イオンチャネル研究会～チャンネルどんたく～, 福岡大学病院, 福岡, 2016年7月.

古谷祐詞,「オプトジェネティクスで活躍する微生物型ロドプシンの分子機構研究」, 生化学若い研究者の会第56回生命科学夏の学校, 旅館かつら, 宮城県白石市, 2016年8月.

**Y. FURUTANI and H. TSUKAMOTO**, “Amide I vibrations could be fingerprints of ion–protein interactions of potassium ion channels with alkali metal cations,” The 9<sup>th</sup> Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Commodore Hotel, Gyeongju (Korea), November 2016.

塚本寿夫,「無脊椎動物における繊毛型オプシンの分子特性と非視覚の光受容」, 第19回日本光生物学協会年会, 東京大学, 東京, 2016年7月.

#### B-6) 受賞, 表彰

古谷祐詞, 平成19年度名古屋工業大学職員褒賞優秀賞 (2007).

古谷祐詞, 平成24年度分子科学研究奨励森野基金 (2012).

古谷祐詞, 第6回(2013年度)分子科学会奨励賞 (2013).

古谷祐詞, 木村哲就, 岡本基士, 第1回BIOPHYSICS Editor's Choice Award (2014).

古谷祐詞, 清水啓史, 浅井祐介, 老木成稔, 神取秀樹, 第3回Biophysics and Physicobiology Editor's Choice Award (2016).

塚本寿夫, 平成24年度日本生物物理学会中部支部講演会優秀発表者 (2013).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本生物物理学会委員 (2010–2011, 2012–2013), 理事 (2015–2016).

日本生物物理学会分野別専門委員 (2010–2013, 2015–2016).

日本物理学会領域12運営委員 生物物理 (2011–2012).

日本化学会東海支部代議員 (2011–2012, 2013–2014).

分子科学会顕彰委員会委員 (2014–2016).

日本分光学会中部支部幹事 (2012–2016).

学会の組織委員等

第15回レチナルタンパク質国際会議実行委員 (2012–2014), 座長 (2014).

学会誌編集委員

日本生物物理学会中部地区編集委員 (2007, 2010).

#### B-8) 大学での講義, 客員

名古屋大学大学院理学研究科,「生体物理学特別講義2」, 2016年9月21, 23日.

大阪大学大学院工学研究科,「CSC 集中講義」, 2016年12月8日–9日.

#### B-10) 競争的資金

科研費若手研究(スタートアップ),「ATR-FTIR 分光法によるロドプシンのタンパク質間相互作用の解析」, 古谷祐詞 (2006年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究),「光駆動プロトンポンプの動作機構の解明」, 古谷祐詞 (2007年–2008年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究),「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明」, 古谷祐詞 (2007年–2008年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「孤立ナノ空間に形成された水クラスターの水素結合ダイナミクス解析」,古谷祐詞(2008年–2009年).

科研費特定領域研究「革新的ナノバイオ」(公募研究),「光駆動イオン輸送蛋白質の動作機構の解明」,古谷祐詞(2009年–2010年).

科研費特定領域研究「細胞感覚」(公募研究),「古細菌型ロドプシンの新奇情報伝達機構の解明と光応答性カリウムチャネルの開発」,古谷祐詞(2009年–2010年).

科研費特定領域研究「高次系分子科学」(公募研究),「孤立ナノ空間を有する有機金属錯体での特異な光化学反応の分光解析」,古谷祐詞(2010年–2011年).

科研費若手研究(B),「赤外差スペクトル法によるイオン輸送蛋白質の分子機構解明」,古谷祐詞(2010年–2011年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「膜輸送蛋白質によるイオン選択・透過・輸送の分子科学」,古谷祐詞(2010年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「イオンチャネル蛋白質のイオン認識および開閉制御の分子機構解明」,古谷祐詞(2011年).

科学技術振興機構ささきかけ研究,「様々な光エネルギー変換系における水分子の構造・機能相関解明」,古谷祐詞(2011年–2014年).

科研費挑戦的萌芽研究,「哺乳動物イオンチャネルの機能的発現と分子機構解析」,古谷祐詞(2012年–2013年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「イオンチャネル蛋白質の物理・化学刺激によるゲート開閉の分子機構解明」,古谷祐詞(2013年).

科研費挑戦的萌芽研究,「膜電位存在下での膜タンパク質の赤外分光解析系の開発」,古谷祐詞(2014年–2016年).

科研費若手研究(A),「膜タンパク質の分子機構解明に資する新規赤外分光計測法の開発」,古谷祐詞(2014年–2017年).

総合研究大学院大学学融合推進センター公募型研究事業事業枠II「学融合共同研究」,「動物が「見えない光」を受容するメカニズム——化学と生理学を融合したアプローチ——」,古谷祐詞(2015年–2016年).

ノバルティス科学振興財団研究奨励金,「部位特異的蛍光標識を用いたGタンパク質共役受容体の動的構造変化の解析」,塚本寿夫(2012年).

科研費若手研究(B),「哺乳動物が環境光を感知するためのメラノプシンの分子特性の解明」,塚本寿夫(2013年–2014年).

上原記念生命科学財団研究奨励金,「メラノプシンを用いたカルシウムシグナリングの光制御」,塚本寿夫(2015年).

科研費研究活動スタート支援,「温度圧力条件下の赤外分光法による耐熱性ロドプシンの光反応機構の解明」,黒井邦巧(2015年–2016年).

### C) 研究活動の課題と展望

これまで赤外分光法を基軸に様々な膜タンパク質の分子機構研究に取り組んできた。光受容タンパク質ロドプシンだけでなく、分子研着任後に開始したイオンチャネルやトランスポーターなど光が関与しない膜タンパク質についての研究が着実に進展している。ほ乳動物由来のカリウムチャネルは、生理研の久保教授との共同研究として、助教の塚本博士が中心になって進めている。チャネル活性が確認できる試料および実験条件を確立することに成功したので、来年度には成果として取りまとめることができるものと期待している。IMS フェローの黒井博士は、高温条件や高圧条件などでの時間分解赤外分光計測を行うなど、膜タンパク質としては極限条件下での計測に成功している。今後も赤外分光法を基軸とした研究を発展させたいが、新規計測系の構築や新たな膜タンパク質の計測などを試みることで、新たな研究の方向性を模索したい。

## 錯体触媒研究部門

魚住 泰 広 (教授) (2000年4月1日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学

A-2) 研究課題：

- a) 不均一反応メディア中での触媒反応システムの構築
- b) 自己集積型金属錯体触媒の設計・開発
- c) 新しい遷移金属錯体触媒・ナノ構造触媒の創製

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) パラジウム，ロジウム，銅錯体触媒などを両親媒性高分子に固定化するとともに機能修飾することで，これら遷移金属錯体触媒有機変換工程の多くを完全水系メディア中で実施することに成功した。水中不均一での高立体選択的触媒反応の開発を世界にさきがけて成功した。
- b) 金属架橋高分子の自己集積触媒（架橋構造と触媒機能のハイブリッド）を開発し，さらにマイクロ流路内の層流界面での自己集積錯体触媒膜の創製に成功した。前項で開発した高分子触媒をカラムカートリッジ化することで実用性に富む連続フロー反応システムを構築した。
- c) 新しいピンサー錯体の合成方法論を確立し，それらピンサー錯体分子が自発的に集積することで形成する分子集合体の三次元高次構造に立脚した新しい触媒機能システムの開拓に注力しつつある。
- d) 水中での反応加速，連続フローシステムに依る効率化，ピンサー錯体触媒化学における新しい反応形式などに立脚して各種反応の ppm-ppb 触媒化を進めつつある。

B-1) 学術論文

**Y. M. A. YAMADA, A. OHNO, T. SATO and Y. UOZUMI**, "Instantaneous Click Chemistry by a Copper-Containing Polymeric Membrane-Installed Microflow Catalytic Reactor," *Chem. -Eur. J.* **21**, 17269–17273 (2015).

**G. SHEN, H. ZHOU, P. DU, S. LIU, K. ZOU and Y. UOZUMI**, "Brønsted Acid-Catalyzed Selective C–C Bond Cleavage of 1,3-Diketones: A Facile Synthesis of 4(3H)-Quinazolinones in Aqueous Ethyl Lactate," *RSC Adv.* **5**, 85646–85651 (2015).

**Y. -H. KIN, J. HAN, B. Y. JUNG, H. BAEK, Y. M. A. YAMADA, Y. UOZUMI and Y. -S. LEE**, "Production of Valuable Esters from Oleic Acid with a Porous Polymeric Acid Catalysts without Water Removal," *Synlett* **27**, 29–32 (2016).

**J. -C. HIERSON and Y. UOZUMI**, "Cluster Preface: Heterogeneous Catalysis," *Synlett* **27**, 1177–1178 (2016).

**A. OHTAKA, T. KOTERA, A. SAKON, K. UEDA, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA**, "Fluoride-Free Hiyama Coupling Reaction Catalyzed by Linear Polystyrene-Stabilized PdO Nanoparticles in Water: Specific Reactivity of PdO Nanoparticles over Pd Nanoparticles," *Synlett* **27**, 1202–1206 (2016).

**S. YAN, S. PAN, T. OSAKO and Y. UOZUMI**, "Recyclable Polystyrene-Supported Copper Catalysts for the Aerobic Oxidative Homocoupling of Terminal Alkynes," *Synlett* **27**, 1232–1236 (2016).

**A. OHTAKA, M. KOZONO, K. TAKAHASHI, G. HAMASAKA, Y. UOZUMI, T. SHINAGAWA, O. SHIMOMURA and R. NOMURA**, “Linear Polystyrene-Stabilized Pt Nanoparticles Catalyzed Indole Synthesis in Water via Aerobic Alcohol Oxidation,” *Chem. Lett.* **45**, 758–760 (2016).

**H. BAEK, M. MINAKAWA Y. M. A. YAMADA, J. W. HAN and Y. UOZUMI**, “In-Water and Neat Batch and Continuous-Flow Direct Esterification and Transesterification by a Porous Polymeric Acid Catalyst,” *Sci. Rep.* **6**, 25925 (2016).

**G. HAMASAKA and Y. UOZUMI**, “The Development of a Vesicular Self-Assembled Amphiphilic Platinum NCN-Pincer Complex and Its Catalytic Application to Hydrosilylation of Alkenes in Water,” *Chem. Lett.* **45**, 1244–1246 (2016).

#### B-4) 招待講演

**Y. UOZUMI**, “Amphiphilic polymeric transition metal catalyzed for coupling reaction in water,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

**Y. UOZUMI**, “Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of an amphiphilic palladium pincer complex,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2015, Honolulu (U.S.A.), December 2015.

**T. OSAKO**, “Development green-sustainable transition-metal catalyzed reaction systems,” 日本化学会第96回春季年会若い世代特別講演会, 京田辺(日本), 2016年3月.

**Y. UOZUMI**, “Molecular architecture-based administration of catalysis in water via self-assembly of amphiphilic palladium pincer complexes,” JST-NTU Joint Seminar on Sustainable Synthesis and Catalysis, Singapore, August 2016.

**Y. UOZUMI**, “Highly active self-assembled polymeric transition metal catalysts for coupling reactions,” The 51<sup>st</sup> Conference: Advances in Organic, Bioorganic and Pharmaceutical Chemistry “LIBLICE2016,” Lázně Bělohrad (Czech), November 2016.

#### B-6) 受賞, 表彰

魚住泰広, 有機合成化学協会研究企画賞 (1992).

魚住泰広, 日本薬学会奨励賞 (1997).

山田陽一, 日本薬学会奨励賞 (2005).

魚住泰広, 第6回グリーン・サステイナブル・ケミストリー賞, 文部科学大臣賞 (2007).

魚住泰広, 平成18年度日本化学会学術賞 (2007).

山田陽一, 文部科学大臣表彰若手科学者賞 (2008).

山田陽一, Thieme Chemistry Journal Award (2008).

魚住泰広, 井上学術賞 (2010).

浜坂 剛, 第1回「名古屋大学石田賞」(2012).

大迫隆男, 有機合成化学協会研究企画賞 (2013).

魚住泰広, 文部科学大臣表彰科学技術賞 (2014).

大迫隆男, 第4回自然科学研究機構若手研究者賞 (2015).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

地球環境産業技術研究機構 (RITE) 技術評価分科会委員会 (2002–2004).

コンビナトリアル・ケミストリー研究会代表幹事 (1998–2009).

有機合成化学協会支部幹事 (1998–).

#### 学会の組織委員等

名古屋メダル実行委員 (2000–).

International Conference on Organic Synthesis 実行委員 (2002–2004).

IUPAC meeting “Polymer in Organic Chemistry 2006” 実行委員 (2004–2006).

OMCOS 14 組織委員 (2006–2007).

触媒学会創設50周年記念国際シンポジウム組織委員 (2007–2009).

#### 文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

日本学術振興会第 116 委員会委員 (1998–).

日本学術振興会科学研究費補助金第一次審査員 (2002–2006).

科学振興調整費審査委員 (2003–2004).

振興調整費「新機能材料開発に資する強磁場固体NMR」研究運営委員 (2004–2007).

#### 学会誌編集委員

日本化学会速報誌編集委員 (2001–2002).

SYNLETT 誌アジア地区編集主幹 (2002–).

Tetrahedron Asymmetry 誌アドバイザーボード (2002–).

SYNFACTS 誌編集委員 (2005–).

ACS Combinatorial Science 誌エディトリアルアドバイザーボード (2010–).

The Chemical Record 編集委員 (2010–).

#### その他

科学技術振興機構CREST 研究「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創製」 研究リーダー (2002–2007).

理化学研究所研究チームリーダー (2007–).

経済産業省グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発プロジェクト 研究チームリーダー (2008–2012).

科学技術振興機構CREST 研究「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」 研究副リーダー (2011–2016).

科学技術振興機構ACCEL 研究「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」 研究代表 (2014–2019).

#### B-8) 大学での講義, 客員

中国湖北省三峡大学, 楚天学者講座教授, 2014年8月–.

#### B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A) (一般研究), 「水中で機能する高分子分散型複合金属ナノ触媒の創製」, 魚住泰広 (2003年–2007年).

科研費特定領域研究 (計画研究: 研究項目番号 A03), 「理想化学変換プロセスを実現する新しい水中機能性個体触媒の開発」, 魚住泰広 (2006年–2009年).

経済産業省・戦略的技術開発グリーンサステナブルケミカルプロセス基盤技術開発, 「高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発」, 魚住泰広 (2009年–2012年).



科学技術振興機構CREST 研究,「水中での精密分子変換を実現するナノ遷移金属触媒創造」, 魚住泰広 (2002年–2008年), 科研費若手研究(B),「水中分子変換を実現する高分子担持銅触媒の創製」, 大迫隆男 (2010年–2011年), 科学技術振興機構CREST 研究,「反応媒体駆動原理の確立と革新的触媒プロセスの開発」, 魚住泰広 (2011年–2016年), 科研費新学術領域研究(研究領域提案型),「触媒膜導入マイクロ流路反応デバイスの創製」, 魚住泰広 (2010年–2013年), 科研費挑戦的萌芽研究,「ユビキタス金属ナノ粒子の触媒機能開発」, 魚住泰広 (2014年–2015年), 科研費若手研究(B),「ポリマー担持ユビキタスメタル触媒による高環境調和型水中フロー酸素酸化工程の開発」, 大迫隆男 (2014年–2015年), 科学技術振興機構ACCEL 研究,「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」, 魚住泰広 (2014年–2019年), 科研費新学術研究,「高活性高分子触媒の創製と連続フローシステム化」, 魚住泰広 (2016年–), 科研費基盤研究(C),「二酸化炭素を用いた有機分子変換の環境調和型高効率フロー反応化」, 大迫隆男 (2016年–).

### C) 研究活動の課題と展望

2000年にゼロからのスタートを切った精密有機分子変換反応のaqueous-switching, heterogeneous-switching の試みも十分な成果と蓄積を得てきた。これまでに水中機能性固定化触媒に関するCREST 研究が2008年3月に終了, 続いてその成果を実践的に発展させる経済産業省(NEDO)プロジェクト(2008年9月–2012年2月)を展開した。一方, 環境調和型触媒反応開発からの発展的研究課題がCRETS 研究「元素戦略」に採択され(2011年10月開始)2016年度内まで継続展開中である。さらに2014年12月からACCEL 研究(5年間)に採択され「超活性固定化触媒開発に立脚した基幹化学プロセスの徹底効率化」研究を進めつつある。また, 自己集積錯体触媒研究は2007年以降, 理化学研究所フロンティア研究に指名され同研究所に場所を移して展開中である。現時点では競争的研究資金の獲得も順調であり, 大学院生ならびに博士研究員の確保も問題ない。魚住の本拠地である分子科学研究所に於いては, 次の研究の萌芽を見いだし育てる研究に注力しており, 幾つかの新機軸候補課題の中から大きな発展に繋がる新課題を見いだしたいと考えている。なかでも最近では未開拓元素群の触媒反応性の探索と確立, さらには分子の自己集積化に立脚した触媒機能の自発的獲得など目指した研究開発を推進しつつある。これまでの高活性触媒の設計概念と駆動原理を駆使し, 従来パーセント量の利用が常識であった化学変換触媒をppm-ppb 量のレベルへと転換すべく研究に取り組んでいる。これは触媒活性の $10^4$ – $10^7$ 向上を意味し, 「改善」を凌駕する「飛躍」が要求される圧倒的な高活性化である。

## 楳山 儀 恵 (准教授) (2014年6月1日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- プロトン触媒とする不斉骨格転位反応
- 水素結合を鍵とする不斉分子触媒の設計・開発
- ハロゲン結合供与体触媒の設計・開発と有機分子変換

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- トリフルオロ酢酸による 1,2,2-置換ブテニルアミンの 1,3-アルキル移動反応に成功した。特に、1位の炭素上が光学的に純粋なブテニルアミンを用いた場合に良好な不斉転写率でプレニルアミンが得られることを見出した。本成果は、不斉 1,3-アルキル移動反応に成功した世界初の例である。
- 異なる2つの酸性官能基を有するキラルプレンステッド酸触媒を設計・開発した。特に、ピリジノアゾエステルとジエン類とのヘテロ Diels–Alder 反応において、カルボン酸–リン酸を触媒として用いることにより、位置選択性、エナンチオ選択性、ジアステレオ選択性の完全制御を達成した。
- ペンタフルオロヨードベンゼンが、ピリジンとアリルシラトランとのアリル化反応の触媒として機能することを見出した。本成果は、ハロゲン結合供与体が有機分子変換の触媒として機能することを示唆する重要な知見である。

B-1) 学術論文

- N. MOMIYAMA, H. TABUSE, H. NODA, M. YAMANAKA, T. FUJINAMI, K. YAMANISHI, A. IZUMISEKI, K. FUNAYAMA, F. EGAWA, S. OKADA, H. ADACHI and M. TERADA**, “Molecular Design of a Chiral Brønsted Acid with Two Different Acidic Sites: Regio-, Diastereo-, and Enantioselective Hetero-Diels–Alder Reaction of Azopyridinecarboxylate with Amidodienes Catalyzed by Chiral Carboxylic Acid–Monophosphoric Acid,” *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 11353–11359 (2016).
- J. KIKUCHI, N. MOMIYAMA and M. TERADA**, “Chiral Phosphoric Acid-Catalyzed Diastereo- and Enantioselective Mannich-Type Reaction between Enamides and Thiazolones,” *Org. Lett.* **18**, 2521–2523 (2016).
- N. MOMIYAMA, H. OKAMOTO, J. KIKUCHI, T. KORENAGA and M. TERADA**, “Perfluorinated Aryls in the Design of Chiral Brønsted Acid Catalysts: Catalysis of Enantioselective [4+2] Cycloadditions and Ene–Reactions of Imines with Alkenes by Chiral Mono-Phosphoric Acids with Perfluoroaryls,” *ACS Catal.* **6**, 1198–1204 (2016).
- N. MOMIYAMA, K. FUNAYAMA, H. NODA, M. YAMANAKA, N. AKASAKA, S. ISHIDA, T. IWAMOTO and M. TERADA**, “Synthetic Method for 2,2’-Disubstituted Fluorinated Binaphthyl Derivatives and Application as Chiral Source in Design of Chiral Mono-Phosphoric Acid Catalyst,” *ACS Catal.* **6**, 949–956 (2016).

B-4) 招待講演

楳山儀恵, 「キラル分子の建築家をめざして」, 豊秋奨学会平成28年度国際学生交流同窓会, ホテルキャッスルプラザ, 名古屋, 2016年11月.

N. MOMIYAMA, "Asymmetric Reaction Space Created by Hydrogen and Halogen Atom," The Winter School of Asian CORE Program, Beijing (China), February 2016.

榎山儀恵, 「ペルフルオロ有機物を活用する有機分子変換」, フルオラス科学研究会第9回シンポジウム, 名古屋大学ベンチャービジネスラボラトリー, 名古屋, 2016年10月.

榎山儀恵, 「水素原子・ハロゲン原子が創り出す不斉空間・不斉反応」, 有機合成のニュートレンド2016, 大阪科学技術センター, 大阪, 2016年2月.

#### B-6) 受賞, 表彰

榎山儀恵, 大学女性協会第17回守田科学研究奨励賞 (2015).

榎山儀恵, 有機合成化学協会セントラル硝子研究企画賞平成26年度 (2014).

榎山儀恵, Thieme Chemistry Journals Award (2008).

榎山儀恵, Damon Runyon Cancer Research Foundation Post Doctoral Research Fellowship (2005).

榎山儀恵, Abbott Laboratories Graduate Fellowship (2005).

榎山儀恵, The Elizabeth R. Norton Prize for Excellence in Research in Chemistry (2003).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本化学会東海支部代議員 (2015, 2016).

学会の組織委員等

総研大アジア冬の学校主催 (2015, 2016).

その他

出前授業愛知県立岡崎北高等学校 (2016).

出前授業「中学生のためのサイエンスセミナー」岡崎市立翔南中学校 (2014).

#### B-8) 大学での講義, 客員

豊橋技術科学大学環境・生命工学大学院, 特別講義II, 博士前期1・2年, 2016年.

#### B-10) 競争的資金

2016年度学術・研究助成・住友電工グループ社会貢献基金, 「多点間水素結合相互作用を活用する高活性キラル分子性触媒の創製」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

2016年度基礎科学研究助成・住友財団, 「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒による触媒的不斉連続反応の開発」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

公益財団法人豊秋奨学会平成28年度研究助成, 「異なる酸性官能基の隣接位導入による超高活性キラル分子性触媒の開発」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

平成28年度(第26回)自然科学系学術研究助成・大幸財団, 「異種酸性官能基複合型キラル分子性触媒の創製と精密合成反応の開発」, 榎山儀恵 (2016年-2017年).

2015年度内藤記念科学奨励金・研究助成,「ペルフルオロピナフチル誘導体の分子修飾に基づくキラルハロゲン結合供与体触媒の設計・開発」, 榎山儀恵 (2016年–2017年).

第28回ノバルティス研究奨励金,「不斉1,3-アルキル移動反応の開発を基軸とする医薬品候補化合物の合成」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

平成27年度徳山科学技術振興財団研究助成,「ハロゲン化ペルフルオロアリーの創製と触媒機能創出」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

2015年度ヨウ素研究助成金,「キラルヨウ素結合供与体触媒の設計・開発を基盤とする不斉合成」, 榎山儀恵 (2015年–2016年).

科研費基盤研究(C),「有機分子アリル化剤の開発を基軸とする革新的不斉有機分子触媒反応の開拓」, 榎山儀恵 (2011年–2013年).

科研費若手研究(B),「ペルフルオロフェニル基の特性を利用した不斉有機酸触媒の開発とアリル化反応への応用」, 榎山儀恵 (2009年–2010年).

科研費特定領域研究「協奏機能触媒」,「 $\pi$ -アリル・O価鉄複合体—キラルプレンステッド酸触媒による新規アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2008年–2009年).

科研費若手研究(スタートアップ),「酵素模倣型キラル求核触媒の設計および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

公益信託林女性自然科学者研究助成基金,「アゾール/グアニジン2成分系キラル求核触媒の設計開発および不斉反応の探索」, 榎山儀恵 (2007年–2008年).

住友財団基礎化学研究助成,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉炭素-炭素結合形成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

東北大学理学研究科若手奨励研究基金,「アザ-コープ転位を基盤とする触媒的不斉アリル化反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

分子系高次構造体化学国際教育研究拠点若手奨励費研究,「高次構造アルカロイドの合成を指向した鍵中間体ピロリジンの触媒的不斉合成反応の開発」, 榎山儀恵 (2007年).

## C) 研究活動の課題と展望

地球上に生存する生命を特徴付ける性質のひとつがキラリティーである。ほとんど全ての生体系は、本来的にキラルでありエナンチオマー的に純粋である。このことは、物質のキラリティーが至るところで私たちの日常に浸透している所以である。私たちの社会に欠かすことのできない物質・材料にキラリティーを組み入れること、それを可能にする一連の方法論を開発することは、次世代の純粋化学と応用化学の両面、そして材料科学において、極めて大きな意味をもつ。

当グループでは、キラル分子を供給する方法論の開拓とその確立を目指し、不斉分子触媒の設計・合成と触媒的不斉合成反応の開発を進めている。これまでに、不斉空間の構築ならびに不斉反応において「金属-配位子錯結合」よりも弱い相互作用である「水素結合」や「ハロゲン結合」の潜在的有用性を明らかにしつつある。水素結合やハロゲン結合の「強さ」と「方向性」を利用する戦略を不斉分子触媒・不斉合成反応の開発において確立することを目標に、引き続き研究を遂行する。将来的には、機能性物質合成としてのキラル化学からキラル分子の振る舞いを明らかにするキラル分子科学への応用展開を目指したい。

## 錯体物性研究部門

正岡重行 (准教授) (2011年2月1日着任)

A-1) 専門領域：錯体化学

A-2) 研究課題：

- a) 多電子酸化還元反応を促進する金属錯体触媒の開発
- b) 金属錯体を対象とした光電気化学的挙動の評価
- c) 金属錯体の規則配列による反応場構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 鉄や銅などの安価な金属イオンを有する金属錯体を対象に、酸素発生触媒の開発に取り組んだ。その結果、多核構造と隣接基質活性化サイトを併せ持つ鉄錯体を利用することで、高活性な酸素発生触媒を創製できることを見出した。また、電気化学測定、分光化学測定および量子化学計算の結果から、多電子移動反応と結合生成反応がそれぞれ効率よく進行する反応機構が示唆された。
- b) 溶存する金属錯体分子が光吸収に伴って引き起こす電子移動過程を理解するため、照射下で電気化学測定が可能な光電気化学測定システムを開発した。また、開発した測定システムを用いて、光化学的なCO<sub>2</sub>還元反応に対して活性を示す種々の金属錯体触媒を対象に光電気化学測定を行い、照射が触媒反応に与える影響を電気化学的に観測した。
- c) 自己集合作用を利用した金属錯体の規則配列と反応場構築を試みた。具体的には、反応活性点と高い対称性 ( $D_{4h}$ ) を併せ持つパドルフィール型二核錯体に、分子間アレーン-パーフルオロアレーン相互作用が可能な官能基を導入し、自己集合を促すことで、反応活性点が細孔内に配置された多孔性フレームワークの構築に成功した。また、これらの多孔性フレームワークの物質変換機能についても評価した。

B-1) 学術論文

**M. OKAMURA, M. KONDO, R. KUGA, Y. KURASHIGE, T. YANAI, S. HAYAMI, V. K. K. PRANEETH, M. YOSHIDA, K. YONEDA, S. KAWATA and S. MASAOKA**, "A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation," *Nature* **530**, 465–468 (2016).

**V. K. K. PRANEETH, M. KONDO, P.-M. WOI, M. OKAMURA and S. MASAOKA**, "Electrocatalytic Water Oxidation by a Tetranuclear Copper Complex," *ChemPlusChem* **81**, 1123–1128 (2016).

**K. KITAMOTO, M. OGAWA, G. AJAYAKUMAR, S. MASAOKA, H.-B. KRAATZ and K. SAKAI**, "Molecular Photo-Charge-Separators Enabling Single-Pigment-Driven Multi-Electron Transfer and Storage Leading to H<sub>2</sub> Evolution from Water," *Inorg. Chem. Front.* **3**, 671–680 (2016).

B-3) 総説、著書

**M. KONDO and S. MASAOKA**, "Water Oxidation Catalysts Constructed by Bio-Relevant First-Row Metal Complexes," *Chem. Lett.* **45**, 1220–1231 (2016).

B-4) 招待講演

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 8<sup>th</sup> Asian Biological Inorganic Chemistry Conference (AsBIC8), Auckland (New Zealand), December 2016.

**S. MASAOKA**, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” 5<sup>th</sup> International Symposium on Solar Fuels and Solar Cells (5<sup>th</sup> SFSC), Dalian (China), October 2016.

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Japan-Korea-Taiwan Bioinorganic Chemistry Symposium 2016, Okazaki (Japan), September 2016.

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Challenges for dream catalysis—Design of catalytically active centers from the concept of coordination, 66<sup>th</sup> JSCC conference, Fukuoka University, Fukuoka (Japan), September 2016.

**S. MASAOKA**, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” The 1<sup>st</sup> Japan-Australia Joint Symposium on Coordination Chemistry, Fukuoka University, Fukuoka (Japan), September 2016.

正岡重行, 「植物に学ぶ触媒デザイン: 水から酸素を作る鉄5核錯体」, 第4回バイオ関連化学シンポジウム若手フォーラム, 金沢駅東もてなしドーム地下イベント広場, 金沢, 2016年9月.

正岡重行, 「電子状態の柔軟性が生み出す触媒機能」, 第3回機能化学研究会「構造・電子状態の柔軟性が生み出す新機能」, 猿投温泉, 豊田, 2016年8月.

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 2<sup>nd</sup> UK-Japan Workshop on Solar Fuels and CO<sub>2</sub> Conversion: British Embassy Tokyo, Tokyo (Japan), June 2016.

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” 12<sup>th</sup> International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCPPI6), Ritsumeikan University, Kusatsu (Japan), June 2016.

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” The 21<sup>st</sup> iCeMS International Symposium “Emerging Science for Unlocking Cell’s Secrets,” iCeMS Main Building, Kyoto University, Kyoto (Japan), June 2016.

**S. MASAOKA**, “A Pentanuclear Iron Catalyst Designed for Water Oxidation,” The 2<sup>nd</sup> International Symposium on Chemical Energy Conversion Processes (ISCECP-2), Kyushu University, Fukuoka (Japan), May 2016.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」, 第9回中国四国地区錯体化学研究会(錯体化学若手の会中国四国支部第1回勉強会), 関西学院大学, 2016年5月.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 第3回応用化学談話会, 東京大学, 東京, 2016年4月.

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Asian International Symposium—Coordination Chemistry, Organometallic Chemistry—, Doshisha University, Kyotanabe (Japan), March 2016.

正岡重行, 「低温度星まわりの生命居住可能惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 第4回宇宙と生命ワークショップ, 一橋大学一橋講堂, 東京, 2016年3月.

**S. MASAOKA**, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” The 4<sup>th</sup> Frontier Chemistry Center International Symposium “Future Dreams in Chemical Science and Technology: Bridges to Global Innovations,” Hokkaido University, Sapporo, February 2016.

正岡重行, 「金属錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 第8回東北大学研究会プログラム「金属錯体の固体物性最前線——金属錯体と固体物性物理と生物物性の連携新領域を目指して——」, 東北大学, 仙台, 2016年2月.

正岡重行,「人工光合成を志向した金属錯体の化学」,ABC ミニワークショップ「極限環境の光合成」,立川グランドホテル,東京,2016年2月.

S. MASAOKA, “Molecular Catalysts Designed for Water Oxidation,” Symposium on Hierarchy and Holism in Natural Sciences, National Astronomical Observatory of Japan, Mitaka, February 2016.

正岡重行,「鉄五核触媒の分子構造制御に基づく低過電圧酸素発生」,新学術領域「人工光合成」第4回公開シンポジウム,東京理科大学,東京,2016年1月.

#### B-6) 受賞,表彰

榎本孝文, Dalton Transactions Prize (2016).

榎本孝文, 錯体化学会第66回討論会ポスター賞 (2016).

榎本孝文, 日本化学会東海支部長賞 (2016).

S. K. LEE, The Winter School of Asian-Core Program, Poster Award (2016).

榎本孝文, 第27回配位化合物の光化学討論会ポスター賞 (2015).

榎本孝文, 2015年度総研大物理科学学生セミナー Adobe 賞 (2015).

榎本孝文, 伊豆 仁, 深津亜里紗, 2015年度総研大物理科学学生セミナー優秀発表賞 (2015).

深津亜里紗, International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014), Excellent Poster Award (2014).

伊豆 仁, 第4回CSJ 化学フェスタ2014 優秀ポスター発表賞 (2014).

伊東貴宏, CrystEngComm Poster Prize (2014).

伊東貴宏, 錯体化学会第64回討論会ポスター賞 (2014).

岡村将也, 錯体化学会第63回討論会学生講演賞 (2013).

中村 豪, 平成25年度(第4回)総合研究大学院大学学長賞 (2013).

吉田将己, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

中村 豪, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

岡村将也, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

村瀬雅和, 第2回CSJ 化学フェスタ2012 優秀ポスター賞 (2012).

近藤美欧, 第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント (2012).

正岡重行, 若い世代の特別講演会講演賞 (2011).

正岡重行, 第53回錯体化学討論会ポスター賞 (2003).

正岡重行, 日本化学会第83回春季年会学生講演賞 (2003).

#### B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

錯体化学会副事務局長 (2015-).

錯体化学会理事 (2015-).

錯体化学会ホームページ委員 (2013-).

錯体化学会若手部会九州支部世話人 (2006-2010).

錯体化学会若手部会事務局 (2006).

#### 学会の組織委員等

日本化学会第5回CSJ 化学フェスタ実行委員 (2015).

総研大アジア冬の学校2013主催 (2013).

錯体化学若手の会夏の学校2008主催 (2008).

分子情報科学若手セミナー主催 (2006).

#### 学会誌編集委員

*Scientific Reports*, Nature Publishing Group, Editorial Board (2015-).

日本化学会「化学と工業」編集委員 (2013-).

#### B-8) 大学での講義, 客員

名城大学理工学部, 非常勤講師, 「錯体化学」, 2016年度後期.

名古屋大学大学院理学研究科, 客員准教授, 2013年4月-.

#### B-9) 学位授与

岡村将也, 「Development of New Transition Metal Complexes Designed for Water Oxidation」, 2016年3月, 博士(理学).

#### B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B), 「クラスター錯体によるエネルギーキャリアのテーラーメイド合成」, 正岡重行 (2016年-2018年).

科研費研究活動スタート支援, 「多核錯体への柔軟なプロトン移動能の導入と水の酸化反応への影響」, 岡村将也 (2016年-2017年).

科研費新学術領域(公募研究), 「鉄五核触媒の分子構造制御に基づく低過電圧酸素発生」, 正岡重行 (2015年-2016年).

科研費若手研究(A), 「反応性超分子フレームワーク: 反応場の構築と反応の可視化」, 近藤美欧 (2015年-2018年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「光合成モジュールの人為的再構成によるサイボーグ植物の創出」, 正岡重行 (2015年).

自然科学研究機構新分野創成センター宇宙における生命研究分野プロジェクト, 「低温度星まわりの生命居住可能惑星において起こり得る光合成反応の分子科学的考察」, 正岡重行 (2015年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「異種金属多核錯体による革新的電気化学物質変換」, 正岡重行 (2014年-2016年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「酸素発生型光合成への挑戦: 機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2014年).

科研費若手研究(A), 「配位不飽和な自己集合性多核錯体を触媒とする多電子酸化還元反応」, 正岡重行 (2013年-2015年).

科研費新学術領域(公募研究), 「水の酸化の超高効率化を目指した超分子錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2013年-2014年).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト, 「酸素発生型光合成への挑戦: 機構理解と新機能創出」, 正岡重行 (2013年).

科学技術振興機構先導的物質変換領域, 「超分子クラスター触媒による水を電子源としたCO<sub>2</sub>還元反応系の構築」, 近藤美欧 (2012年-2017年).

科研費挑戦的萌芽研究, 「二次元反応場への金属錯体集積と水を基質とする革新的多電子物質変換」, 正岡重行 (2012年-2013年).



科研費若手研究(B),「高効率触媒界面の構築を目指した錯体プラットフォームの開発」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

第5回資生堂女性研究者サイエンスグラント,「界面電子移動プログラミングによる水の完全光分解系の構築」, 近藤美欧 (2012年–2013年).

学融合推進センター公募研究事業事業枠③女性研究者支援,「界面電子移動反応を利用した水の完全光分解システムの創成」, 近藤美欧 (2012年).

科学技術振興機構さきかけ研究「光エネルギーと物質変換」領域,「水の可視光完全分解を可能にする高活性酸素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2012年).

科研費若手研究(B),「水の分解反応に対する非貴金属系高活性金属錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年–2010年).

科学技術振興機構重点地域研究開発推進プログラム「シーズ発掘試験A (発掘型)」,「有機–無機複合型超高活性酸素発生錯体触媒の創製」, 正岡重行 (2009年).

九州大学教育研究プログラム・研究拠点形成プロジェクト,「混合原子価2核錯体を用いた量子セルオートマトン材料の開発」, 正岡重行 (2009年).

(財)鉄鋼業環境保全技術開発基金第29回環境助成研究,「鉄–硫黄系金属錯体を用いた安価高活性水素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年–2009年).

(財)日産科学振興財団環境研究助成,「水の完全光分解を実現可能とする高活性酸素発生触媒の創成」, 正岡重行 (2008年).

科研費若手研究(B),「高度に組織化された球状水素発生触媒の創製」, 正岡重行 (2006年–2007年).

#### B-11) 産学連携

ライオン(株)研究開発本部寄付金,「金属錯体系電子移動反応触媒研究の発展を奨励する研究費」, 正岡重行 (2016年).

#### C) 研究活動の課題と展望

我々の研究グループでは、太陽光エネルギーを貯蔵可能な化学エネルギーに変換できる次世代科学技術「人工光合成」の達成に向けて、金属錯体を対象とした基礎研究を進めている。2016年は、a) 多電子酸化還元反応を促進する金属錯体触媒の開発、b) 金属錯体を対象とした光電気化学的挙動の評価、c) 金属錯体の規則配列による反応場構築、を並行して推進し、それぞれ重要な研究成果を得ることができた。今後は、a) に関しては、水の四電子酸化反応に対する触媒機能の向上(反応速度上昇、過電圧低下等)に加え、多電子還元反応(CO<sub>2</sub>還元、N<sub>2</sub>還元等)に対する触媒の開発にも取り組みたい。b) では、我々が開発した光電気化学測定システムをより多様な光電子移動系、光触媒反応系に展開したいと考えている。c) では、2016年までに構築した反応性フレームワークの触媒機能評価を行い、特異な反応場が触媒機能に与える影響を調査する。以上の研究を推進し、錯体型人工光合成システムの創出に向けた学術基盤を確立したい。