

4-8 特別研究部門

藤田 誠（卓越教授（クロスアポイントメント*））（2018 年 4 月 1 日着任）

三橋 隆章（特任助教）

増田 道子（事務支援員）

* 東京大学国際高等研究所（2023 年 4 月 1 日～）

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) 結晶スポンジ法は，結晶スポンジと呼ばれる多孔性の結晶に解析対象物を染み込ませることで，解析対象物を結晶内で整列させ，X線回折法により構造解析を達成する手法である。結晶スポンジ法を用いることで，小分子の構造決定を迅速に達成することができる。この結晶スポンジ法の有力な応用先として，二次代謝酵素の機能解析研究を挙げることができる。なぜならば，二次代謝酵素の機能解析を行う際，二次代謝酵素から生産される酵素産物を構造決定する過程が研究のボトルネックになることがしばしばあるためである。こうした背景から，我々は，結晶スポンジ法を活用した二次代謝酵素の機能解析研究を展開しており，特に本年度は，昨年度から着目している巨大ウイルス由来の二次代謝酵素について，補因子の種類により酵素産物に変化する現象を見いだすなどより詳細な解析を達成するとともに，結晶スポンジ法を用いた二次代謝物のコンフォメーション解析や，結晶スポンジを活用した二次代謝研究の新しいワークフローの提案などをおこなった。

B-1) 学術論文

R. EBIHARA, T. NAKAMA, K. MORISHIMA, M. YAGI-UTSUMI, M. SUGIYAMA, D. FUJITA, S. SATO and M. FUJITA, “Physical Isolation of Single Protein Molecules within Well-Defined Coordination Cages to Enhance Their Stability,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(7), e202419476 (2025). DOI: 10.1002/anie.202419476

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Host-in-Host Complexation: Activating Classical Hosts through Complete Encapsulation within an M_9L_6 Coordination Cage,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(6), e202422143 (2025). DOI: 10.1002/anie.202422143

E. TSUNEKAWA, M. FUJITA and T. SAWADA, “A Discrete Four-Stranded β -Sheet through Catenation of M_2L_2 Metal-Peptide Rings,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(4), e202416442 (2025). DOI: 10.1002/anie.202416442

Y. DOMOTO, R. NAKABAYASHI, T. TSURUMI, K. YAMAMOTO, H. HAYASHI, Y. NAKAMURA and M. FUJITA, “Fine-Tuning of the Sequential Self-Assembly of Entangled Polyhedra by Exploiting the Side-Chain Effect,” *Chem. –Asian J.* **20**(6), e202401378 (2025). DOI: 10.1002/asia.202401378

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Template and Solid-State-Assisted Assembly of an M_9L_6 Expanded Coordination Cage for Medium-Sized Molecule Encapsulation,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(47), 32311–32316 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c14509

C. PARK, T. MITSUHASHI, N. WADA, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “New Workflow for the Structure Elucidation of Trace Amount Natural Products with Microgram-Scale Crystalline Sponge Method: A Scaled-Down Genome-Mining Study,” *Chem. Lett.* **53(11)**, upae202 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae202

Y. JUNG, T. MITSUHASHI, K. KAGEYAMA, T. KIKUCHI, S. SATO and M. FUJITA, “Conformational Analysis of (+)-Germacrene D-4-ol Using the Crystalline Sponge Method to Elucidate the Origin of its Instability,” *Chem. –Eur. J.* **30(39)**, e202400512 (2024). DOI: 10.1002/chem.202400512

Y. JUNG, T. MITSUHASHI, T. KIKUCHI and M. FUJITA, “Functional Plasticity of a Viral Terpene Synthase, OILTS, that Shows Non-Specific Metal Cofactor Binding and Metal-Dependent Biosynthesis,” *Chem. –Eur. J.* **30(31)**, e202304317 (2024). DOI: 10.1002/chem.202304317

H. TAMURA, T. NAKAMA, A. ROSSEN, H. ISHIKITA and M. FUJITA, “Organic Solvent-Induced Structural Changes in a Protein Confined in a Giant Coordination Cage,” *Chem. Lett.* **53(5)**, upae101 (2024). DOI: 10.1093/chemle/upae101

B-4) 招待講演

M. FUJITA, “Self-Assembly of Gigantic Coordination Polyhedra: From Synthetic to Peptidic,” The International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC 2024), Hangzhou (China), May 2024.

M. FUJITA, “Molecular Confinement Effects in Self-assembled Cages,” 8th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands, Cassis (France), June 2024.

M. FUJITA, “Molecular confinement effects in self-assembled cages,” Curious 2024, Mainz (Germany), July 2024.

M. FUJITA, “Coordination Self-assembly: From Origins to the Latest Advances,” European Winter School on Physical Organic Chemistry, Bressanone (Italy), February 2025.

B-6) 受賞, 表彰

藤田 誠, Van't Hoff Award (2024).

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

科研費基盤研究(S), 「フェムトからピコグラム量の極微量代謝物構造解析法の開発」, 藤田 誠 (2024年度–2029年度).

C) 研究活動の課題と展望

昨年度から続けている巨大ウイルス由来二次代謝酵素の結晶スポンジ法を用いた解析は、本年度も一定の成果があった一方、まだ解析すべき酵素が多数存在しており、引き続き研究を続けていくことで今後も様々な発見があると期待している。また今後は、結晶スポンジ法自体を、より微量の化合物をより簡便に構造解析することができる技術へと、更に発展させる研究にも力を入れていきたい。結晶スポンジ法をより強力な手法へと発展させることで、その応用の幅も大きく広がるものと期待している。

木村 真一（教授(クロスアポイントメント*)）(2020年4月1日～2025年3月31日)

栗田 佳子（事務支援員）

*大阪大学大学院生命機能研究科

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性が現れる固体・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

Y. CHEN, T. NAKAMURA, H. WATANABE, T. SUZUKI, Q. REN, K. LIU, Y. ZHONG, T. KANAI, J. ITATANI, K. OKAZAKI, H. S. SUZUKI, S. SHIN, K. IMURA, N. K. SATO and S. KIMURA, “Photo-Induced Nonlinear Band Shift and Valence Transition in SmS,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **94**(1), 013702 (2025). DOI: 10.7566/JPSJ.94.013702

K. WANG, S. KIMURA, K. YAMAUCHI, H. YAMAHARA, H. MURAKAMI, M. SEKI, T. OGUCHI, H. TABATA and M. TONOUCHI, “Temperature Dependence of Low-Frequency Phonon Behavior in Gadolinium Gallium Garnet and Yttrium Aluminum Garnet,” *J. Appl. Phys.* **136**(24), 245105 (2024). DOI: 10.1063/5.0242789

H. WATANABE, Y. TAKENO, Y. NEGORO, R. IKEDA, Y. SHIBATA, Y. CHEN, T. NAKAMURA, K. YAMAGAMI, Y. HIRATA, Y. ZHANG, R. TAKAHASHI, H. WADATI, K. TAMASAKU, K. IMURA, H. S. SUZUKI, N. K. SATO and S. KIMURA, “Photoinduced Phase Transition on Black Samarium Monosulfide,” *Phys. Rev. B* **110**(24), 245133 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevB.110.245133

J. H. PARK, M. T. PARK, G. W. BAEK, S. KIMURA, M. H. JUNG and K. J. KIM, “Unraveling the Origin of Conductivity Change in Co-Doped FeRh Phase Transition,” *Commun. Mater.* **5**(1), 250 (2024). DOI: 10.1038/s43246-024-00694-y

R. IKEDA, H. WATANABE, M. J. HEON, M. H. JUNG, K. TAKASAN and S. KIMURA, “Light-Field-Driven Non-Ohmic Current Generation by an Intense THz Pulse in a Weyl Semimetal,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **93(5)**, 053701 (2024). DOI: 10.7566/JPSJ.93.053701

B-3) 総説, 著書

中村拓人, 木村真一, 「単原子層重い電子系の実現—単原子層物質における近藤効果—」, *固体物理*, **59(6)**, 331–339 (2024).

B-4) 招待講演

S. KIMURA, “Anisotropic Non-Fermi Liquid and Dynamical Planckian Scaling of Quasi-Kagome Kondo Lattice Systems,” American Physical Society Joint March & April Meeting: Global Physics Summit 2025, Anaheim (USA), March 2025.

S. KIMURA, “Light-Field-Driven Non-Ohmic Current and Keldysh Crossover in a Weyl Semimetal,” 2024 MRS Spring Meeting & Exhibit, Seattle (USA), April 2024.

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 (2024–2026).

学会の組織委員等

国際ワークショップ「12th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources」国際諮問委員 (2024).

国際会議「International Conference on Low Energy Electrodynamics of Solids」, Organizing Committee Program Committee Member (2024–2025).

その他

アグネ技術センター「固体物理」誌友 (2023–2025).

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–.

大阪大学理学部, 講義「光物理学」, 2024年4月–9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」, 2024年4月–9月.

大阪大学全学教育推進機構, 講義「力学詳論II」, 2024年10月–2025年3月.

大阪大学理学部, 講義「現代物理学の最前線」, 2024年10月–2025年3月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 講義「基礎物理学I」, 2024年4月–6月.

大阪大学大学院生命機能研究科, 実習「基礎物理学実習I」, 2024年6月–8月.

大阪大学生命機能研究科, 講義「生体ダイナミクス概論III」, 2024年4月–9月.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A),「時間・スピン分解共鳴電子散乱法の確立と光励起電子・格子・スピン相関の直接観測」, 木村真一 (2023年度-2025年度).

科研費挑戦的研究(開拓),「ナノスピン角度分解共鳴非弾性電子散乱法を用いた運動量依存スピン流のオペランド観測」, 木村真一 (2024年度-2027年度).

科研費基盤研究(A),「局所場における光テラヘルツ波変換モデルリングと半導体分析応用」(代表者: 斗内政吉), 木村真一(研究分担者) (2023年度-2025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（クロスアポイントメント*））（2021 年 11 月 1 日着任）

栗田 佳子（事務支援員）

*神戸大学大学院理学研究科

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による計測評価②氷と不凍液体が接する界面のナノ力学計測が本年度の成果である。

B-1) 学術論文

Y. H. CHEW, N. SAIJO, Y. KUMABE, T. TACHIKAWA and H. ONISHI, “Unravelling the Influence of Major Seawater Salt Ions on the Photogenerated Charge Carriers in a Sr-Doped NaTaO₃ Photocatalyst via ATR-FTIR,” *J. Phys. Chem. C* **129**(7), 3531–3538 (2025). DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c07833

C.-M. FUNG, B.-J. NG, Y.-H. CHEW, C.-C. ER, J. LOW, X. GUO, X. Y. KONG, L.-L. TAN, H. ONISHI, A. R. MOHAMED and S.-P. CHAI, “MXene Quantum Dot-Sensitized Heterostructures for Broad Solar Spectrum CO₂ Reduction,” *Cell Rep. Phys. Sci.* **5**, 102296 (2024). DOI: 10.1016/j.xcrp.2024.102296

R. YANAGISAWA, T. UEDA, K. NAKAMOTO, Z. LU, H. ONISHI and T. MINATO, “The Interface between Ice and Alcohols Analyzed by Atomic Force Microscopy,” *J. Chem. Phys.* **161**(2), 024702 (2024). DOI: 10.1063/5.0211501

T. OTAKE, R. KAJITA, I. OGASAWARA, M. IWAKI, H. ONISHI and K. AMANO, “Theoretical Investigation of Interaction Measurements in Liquid Systems with Viscosity Distributions,” *Phys. A* **647**, 129918 (2024). DOI: 10.1016/j.physa.2024.129918

Y. H. CHEW and H. ONISHI, “Infrared Absorption of Zn_{0.5}Cd_{0.5}S Photocatalyst Bandgap-Excited Under an Aqueous Environment,” *J. Phys. Chem. C* **128**(11), 4535–4543 (2024). DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c08343

B-4) 招待講演

大西 洋, 湊 丈俊, 「市販AFM 装置を用いた水-液体界面の計測」, 次世代ナノプローブ技術委員会第5回研究会, 東京, 2025年1月.

森口志穂, 大西 洋, 平山朋子, 山下直輝, 「潤滑油における添加剤吸着膜の分子スケール構造と摩擦特性」, 第20回高分子表面研究討論会, 神戸, 2024年11月.

大西 洋, 「水中で進む触媒反応のオペランド計測: 赤外分光とマイクロ電気化学」, 触媒学会西日本支部第15回触媒科学研究発表会, 神戸, 2024年11月.

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 (2022-2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構創発的研究支援事業アドバイザー (創発AD) (2023-).

北海道大学触媒科学研究所運営協議会委員 (2024-).

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-).

その他

水-不凍液界面のナノ力学計測を報告した原著論文 (*J. Chem. Phys.* 誌) とプレスリリース (分子研および神戸大学) が広く注目され, *Physics Today* (アメリカ物理協会広報誌), JST サイエンスポータル, Yahoo ニュースなど, 国内外 30 以上のウェブ媒体で二次報道された。

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).

科研費基盤研究(S), 「境界潤滑の科学-添加剤吸着層の構造・物性に基づく低摩擦現象の本質的理解」 (代表者: 平山朋子), 大西 洋 (研究分担者) (2023年度-2027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。有限の厚さをもつ水-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】 広い意味での潤滑油-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用いたナノ力学計測を進めていく。

高谷 光（准教授（兼任*¹））（2022 年 3 月 1 日～2022 年 3 月 31 日）
（教授（兼任*²））（2022 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日）

神谷 美穂（事務支援員）

*1 京都大学

*2 帝京科学大学生命環境学部

A-1) 専門領域：有機合成化学，有機金属化学，ペプチド科学，バイオマス有効活用，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
- d) 未利用バイオマス由来有機分子を基盤とする高機能バイオマテリアル創出

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 年度に不安定な 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。これらの成果を基盤として、2023-2024 年度では様々な有機金属種の構造・反応機構解析に成功した。
- 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、このよう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。こ

これらの成果を背景に、2022–2024 年度ではマイクロ波と様々な有機金属種の創発現象に基づく反応開発に成功した他、環境省の革新的な省 CO₂ 実現のための部材や素材の社会実装・普及展開加速化事業「CO₂ 削減に貢献する大電力高効率 GaN マイクロ波加熱装置」に採択された。本課題では、上述の装置を用いて「マイクロ波反応『その場』観察装置の開発」に取り組む。

- 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。2022–2024 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に取り組んだ結果、廃棄木材および廃棄生花（ロスフラワー）からの高付加価値な医薬品原料（2025 年 5 月上梓予定）の抽出・製造および製品化に成功した他、廃棄自動車由来 PE/PP の高効率分解と循環資源化に成功し、特許出願を行った。

B-1) 学術論文

S. NAKAJIMA, T. HASHIMOTO, S. LU, D. HASHIZUME, H. MATSUDA, T. HATAKEYAMA, K. ISOZAKI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA*, “SciPROP-R: An Effective Bisphosphine Ligand for the Chemo-Selective Iron-Catalyzed Suzuki–Miyaura Coupling of Alkyl Chlorides,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **96**, 1298–1309 (2023). (BCSJ Award)

F. PINCELLA, K. ISOZAKI,* R. SATO, T. TERANISHI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA*, “Reusable Magnetite Nanoparticle (Fe₃O₄ NP) Catalyst for Selective Oxidation of Alcohols under Microwave Irradiation,” *ACS Omega* **9**, 24477–24488 (2024).

E. KANAO, H. OSAKI, T. TANIGAWA, H. TAKAYA, T. SANO, J. ADACHI, K. OTSUKA, Y. ISHIHAMA and T. KUBO*, “Rational Supramolecular Strategy via Halogen Bonding for Effective Halogen Recognition in Molecular Imprinting,” *Anal. Chem.* **95**, 9304–9313 (2023).

R. TOYODA, N. FUKUI, H. TANIGUCHI, H. URATANI, J. KOMEDA, Y. CHIBA, H. TAKAYA, H. NISHIHARA and R. SAKAMOTO*, “Discrete Coordination Nanochains Based on Photoluminescent Dyes Reveal Intrachain Exciton Migration Dynamics,” *Nat. Commun.* **16**, 1367 (2025).

S. KIMURA, K. ADACHI, Y. ISHII, T. KOMIYAMA, T. SAITO, N. NAKAYAMA, M. YOKOYA, H. TAKAYA, S. YAGAI, S. KAWAI, T. UCHIHASHI and M. YAMANAKA, “Molecular-Level Insights into the Supramolecular Gelation Mechanism of Urea Derivative,” *Nat. Commun.* **16**, 3758 (2025).

B-4) 招待講演

高谷 光, 「放射光による文化財分析」, 奈良教育大学公開シンポジウム「科学からみえる伝統のかたち」, 奈良教育大学, 奈良, 2024 年 10 月.

高谷 光, 「文化財と放射光科学」, 第 3 回茨城大学 KEK DAY 「量子線科学講座_量子の目でモノを見る」, 茨城大学, 水戸, 2024 年 1 月.

高谷 光,「放射光計測の高度化学利用：軟X線で拓く物質・材料科学」, 分子研 UVSOR 極端紫外光研究施設 40 周年記念行事記念講演会, 分子科学研究所, 岡崎コンファレンスセンター, 岡崎, 2023 年 12 月.

H. TAKAYA, “Multimetal-Catalyzed One-Stop Chain Transfer Oligomerization of Ethylene/Propylene for Synthetic Lubricants,” International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2023 (C&FC2023), Tokyo (Japan), December 2023.

B-6) 受賞, 表彰

S. NAKAJIMA, T. HASHIMOTO, S. LU, D. HASHIZUME, H. MATSUDA, T. HATAKEYAMA, K. ISOZAKI, H. TAKAYA* and M. NAKAMURA, 日本化学会論文誌 BCSJ 賞 (2023).

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 (2017–2024).

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 105 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 104 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 (2024–2025).

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 (2020–2024).

環境省「革新的な省 CO₂ 実現のための部材や素材の社会実装・普及展開加速化事業」有識者委員会委員 (大学) (2024).

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

足立区「足立区ブランド」認定選考委員 (2023–2024).

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, 客員教授, 2023 年 3 月–2024 年 3 月.

筑波大学数理物質系物質工学域, 客員教授, 2023 年 4 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,「社会課題解決を志向した革新的計測・解析システムの創出」領域,「分子・情報技術の創発による液相分離の限界突破と社会実装」(代表:久保 拓也),高谷 光(主たる共同研究者)(2023年度-2028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(研究分担者)(2021年度-2025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,カネカ(株),「マイクロ波反応の開発」,高谷 光(2024年-).

共同研究,ENEOS(株),「潤滑油成分の物性・構造解析」,高谷 光(2022年-2024年).

共同研究,本田技研工業(株),高谷 光(2022年-2024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 反応解析に注力した研究を行う。特に,未利用バイオマスである廃棄木材や廃棄生花等や廃棄自動車や家電製品由来のプラスチックを研究対象として,触媒・分解反応開発を行うとともに,in situ XAF 測定を利用した分解・脱重合機序の解明を目指す。

中村 彰彦 (准教授(クロスアポイントメント*)) (2022年8月1日～2024年12月31日)
(教授(クロスアポイントメント*)) (2025年1月1日～3月31日)

川口 律子 (事務支援員)

野村 潤子 (事務支援員)

*静岡大学農学部

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) PET 分解酵素の高効率スクリーニングを行うために，ファージ表面に活性型の PET 分解酵素を提示する方法の開発をおこなった。直接ファージのタンパク質と PET 分解酵素を連結すると，立体障害によりファージに生産が確認できなかったため，ファージに SpyCatcher タンパク質，PET 分解酵素に Spytag を連結し，ペリプラズム領域で結合させる方法を試みた。各種プロモーターを検討したところ，コールドショックプロモーターを用いて，ファージの生産量を少し抑えながら PET 分解酵素を誘導することで高い提示率を占めすファージを生産することができた。
- b) 作成した PET 吸着タンパク質のライブラリを RFP と連結し，小スケールでの可溶性酵素生産性の解析を行い，生産可能な変異体のライブラリを取得した。シーケンスを確認し，5 種の変異体を取得した。キチン及びセルロースに対する吸着はほとんど確認できず，また PET への吸着親和性は天然型吸着タンパク質と比較して 2.7 倍向上していた。セルロース，キチン及び PET 粉末をガラス上に配置し，RFP 融合吸着タンパク質で染色したところ，天然型タンパク質では全てが染色されたのに対し，変異体吸着タンパク質では PET のみが強い蛍光を示したことから，PET 染色タンパク質が開発が確認できた。

B-1) 学術論文

R. KUSHIHARA, A. NAKAMURA, K. TAKEGAMI, Y. SETO, Y. KATO, H. DOHRA, T. OHNISHI, Y. TODOROKI and J. TAKEUCHI, “Structural Requirements of KAI2 Ligands for Activation of Signal Transduction,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **122(8)**, e2414779122 (2025). DOI: 10.1073/pnas.2414779122

S. TSUJINO, Y. YAMADA, M. SENDA, A. NAKAMURA, T. SENDA and T. FUJIWARA, “Structural Characterization of Pyruvic Oxime Dioxygenase, a Key Enzyme in Heterotrophic Nitrification,” *J. Bacteriol.* **207(2)**, e00342-24 (2025). DOI: 10.1128/jb.00342-24

Y. OGURA, Y. HASHINO and A. NAKAMURA, “Direct Screening of PET Hydrolase Activity in Culture Medium Based on Turbidity Reduction,” *ACS Omega* **9(31)**, 34151–34160 (2024). DOI: 10.1021/acsomega.4c05488

B-5) 特許出願

WO2025013877(A1), “Protein, and Method for Decomposing Polyethylene Terephthalate,” T. MATSUZAKI, F. YAMAZAKI, T. SAEKI, A. NAKAMURA, R. IINO and N. KOGA (National Institutes of Natural Sciences), 2024年.

B-6) 受賞, 表彰

中村彰彦, 日本応用糖質科学会奨励賞 (2024).

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–2025年度).

科研費挑戦的研究 (萌芽), 「高活性リグニン分解菌を用いた新規リグニンリファイナリー技術の構築」 (代表者: 平井浩文), 中村 彰彦 (研究分担者) (2023年度–2024年度).

B-11) 産学連携

共同研究, 静岡大学, キリンホールディングス (株), 大阪大学, 「結晶性PET 分解活性の高い酵素の開発」, 中村彰彦 (2023年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

開発したPET 分解酵素提示ファージベクターに変異導入を行い, PET 分解酵素変異体ライブラリーの作成を行う。得られたライブラリーを用いて顕微鏡下でPET 分解活性の計測を行い高活性変異体の取得を試みる。また作成したPET 吸着タンパク質はPET 分解酵素との融合体を作成し, PET 分解活性に与える影響を確認する。

澤井 仁美（准教授（クロスアポイントメント*））（2024 年 4 月 1 日着任）

村木 めぐみ（技術支援員）

川口 律子（事務支援員）

野村 潤子（事務支援員）

*長崎大学大学院総合生産科学研究科

A-1) 専門領域：生物無機化学，生命金属科学，生化学

A-2) 研究課題：

- a) 生体内「鉄」動態の分子科学
- b) 軟X線顕微鏡による生細胞の元素イメージング
- c) ヘムセンサータンパク質を標的とする新規抗菌剤の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 鉄はすべての生物の生命維持に必須の金属元素である。生体内の鉄は Fe^{2+} または Fe^{3+} で存在するが，種々のタンパク質を介して方向性と選択性をもって受け渡しされることで，細胞毒性を抑えつつ，鉄の動態（吸収・輸送・貯蔵・排泄など）が制御されている。しかし，そのような生体内「鉄」動態の分子機序は精密に解明されていない。本研究課題では，鉄イオンの受け渡し機構に関与する各種タンパク質を対象として，タンパク質間相互作用ならびに立体構造の解析により鉄イオンの授受機構を解明することを目的としている。鉄貯蔵タンパク質 Ferritin の H 鎖に対して鉄輸送タンパク質 PCBP が結合して Fe^{2+} を渡し，アポ型になった PCBP は速やかに Ferritin から解離する新しい機構を明らかにした。
- b) UVSOR の岩山グループで開発中の密着型軟X線顕微鏡を用いて，生きている（含水状態）の細胞における元素分布をイメージングする手法の開発に着手した。数種類の接着系培養細胞を蛍光シンチレーター板上で培養した結果，形状がそろった状態で蛍光板に強く接着したイヌの正常腎臓尿管上皮細胞について実験した。炭素ならびにリンの吸収端では，細胞の輪郭（形質膜）や核などの小器官の存在がわかる解像度で観察することができ，XAFS スペクトルを抽出した。鉄については，細胞内濃度が低いため，XAFS 解析までは至っていない。今後，鉄栄養強化細胞や潜在的に鉄量が多い肝細胞などを用いて，鉄の分布を観察する。
- c) 動物の血液に感染する病原菌の多くは，宿主動物の赤血球を破壊し，鉄栄養源としてヘム（ポルフィリン鉄錯体）を奪取して増殖する。しかし，栄養であるはずのヘムが菌体内で余剰になると毒性を示すため，溶血性の病原菌は余剰なヘムを感知して排除するためにヘムセンサータンパク質を有している。したがって，病原菌のヘムセンサータンパク質の機能を阻害する薬剤は抗菌薬の開発に有用となる。本研究課題では，新生児の敗血症や髄膜炎の起因となるだけでなく，乳牛の乳房炎を引き起こし日本の酪農経済に年間 100 億円以上の損失を与える病原菌 *Streptococcus agalactia* のヘムセンサータンパク質 PefR を対象とした。PefR に対して特異的に結合し，ヘム感知能を阻害する素材として VHH 抗体を作製し，各種相互作用解析により PefR に対する VHH 抗体の親和性や結合特異性を明らかにした。

B-3) 総説, 著書

澤井仁美,「膜貫通型鉄還元酵素 Dcytb の構造機能解析により明らかになった細胞への鉄取り込みメカニズム」, 生体の科学, **75**(2), 112–115 (2024).

B-4) 招待講演 (* 基調講演)

H. SAWAI, “Iron as a nutrient: the molecular and cellular mechanisms of dietary iron absorption in humans,” French-Japanese symposium in BioInorganic Chemistry and FrenchBIC annual meeting, Marseille (France), April 2024.

H. SAWAI, “Structural insights into the sensing of iron nutrients as a basis for the development of new drugs,” Gordon Research Conference—Metals in Medicine, Andover (USA), June 2024.

H. SAWAI, “Sensing of iron nutrients as a new target for antibiotic development,” The 11th Asian Biological Inorganic Chemistry (AsBIC11), Guilin (China), December 2024.*

澤井仁美,「生体内におけるヘムおよび鉄イオンの動態と制御について」, 第31回日本血液代替物学会年次大会, 京都, 2024年12月.*

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本鉄バイオサイエンス学会代議員 (2024–).

学会の組織委員等

UK/Japan meeting and workshop on dynamic crystallography, Program Committee (2023–2024).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

九州シンクロトン光応用研究センター会議委員 (2023–2024).

理科教育活動

夢ナビ講義ビデオ (大学受験生向けオンデマンド講義)(2024).

夢ナビLIVE2024 (大学受験生向けオンライン研究室ツアー)(2024).

高大連携公開講座: 教科書の化学実験を体験しよう (2023–).

高校生・大学受験生のための化学・物質関連分野の実験実習 (2023–2024).

出前授業ならびに実験講座, 大村高等学校 (2024).

出前授業ならびに実験講座, 諫早高等学校 (2024).

出前授業ならびに実験講座, 純心女子高等学校 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

長崎大学大学院工学研究科,「化学・物質工学総合演習」, 2022年5月–.

長崎大学大学院工学研究科／総合生産科学研究科,「実践英語 ABCD」, 2022年5月–.

長崎大学工学部,「技術英語 III」, 2022年9月–.

長崎大学工学部,「生化学 I」, 2023年4月–.

長崎大学医学部医学科／医学部保健学科／歯学部／情報データ学部? 環境学部,「教養モジュール b13: 生体分子の構造と機能」, 2023年6月–.

長崎大学大学院工学研究科,「生命金属ダイナミクス」,2023年8月－.
長崎大学大学院工学研究科／総合生産科学研究科,「生命金属科学特論」,2023年10月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「医工連携B：先端医用材料・創薬」,2024年4月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「細胞機能生化学特論」,2024年4月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「特別研究I」,2024年4月－.
長崎大学工学部,「蛋白質工学」,2024年6月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「機能性錯体化学特論」,2024年6月－.
長崎大学大学院総合生産科学研究科,「細胞機能分子メカニズム特論」,2024年10月－.
理化学研究所,客員研究員,2006年10月－.
Lund Institute of Advanced Neutron and X-ray Science (LINXS), LINXS Core Group Fellow, 2023年9月－.

B-10) 競争的資金

(公財)旭硝子財団 2024年度研究助成,「鉄トランスポーターと鉄輸送シャペロンの相互作用による安全で効率的な細胞内 Fe^{2+} 制御機構の解明」,澤井仁美(2024年–2025年).
(公財)アサヒグループ財団学術研究助成 食・生活部門,「鉄栄養素の吸収効率を高める新たな食品成分の探索とその作用機序の解明」,澤井仁美(2024年).
長崎大学令和6年度研究費獲得支援事業,「鉄リレーシステムにより制御される二価鉄イオンの細胞内動態の可視化」,澤井仁美(2024年).

B-11) 産学連携

共同研究,(株)レフェインジャパン,「タンパク質の分子量分布解析」,澤井仁美(2022年度－).

C) 研究活動の課題と展望

これまでに鉄を中心に生体内金属の吸収・輸送・貯蔵の分子機序について、タンパク質レベルでの研究を展開してきた。しかし、試験管内にとり出した個々のタンパク質間の相互作用だけでは説明がつかない現象があることを、細胞レベルでの研究を取り入れることで実感した。つまり、細胞内では金属イオンの局所的な濃度変化により、タンパク質や核酸に対する金属の結合解離が起こり、それに伴い生体分子が離合集散しながら生体内金属の動態を制御しているように観える。細胞内で起きている「真の金属動態」を追跡するために、密着型軟X線顕微鏡を用いて生きている細胞内の金属イオンの分布を(特に Fe^{2+} と Fe^{3+} を区別して)イメージングする方法を確立したい。生細胞内の各金属イオンの分布が、金属関連タンパク質の局在・形状・活性などと、どのようにリンクするのかを解明することで、分子科学的な理解が進んでいない「金属毒性の閾値(栄養か毒かの境界)」を浮き彫りにしていきたい。

畑中 美穂（准教授（クロスアポイントメント*））（2024 年 6 月 1 日着任）

増田 道子（事務支援員）

千葉 史朱香（事務支援員）

*慶應義塾大学理工学部

A-1) 専門領域：理論化学，マテリアルズインフォマティクス

A-2) 研究課題：

- a) 触媒および高分子材料の反応経路のデータベース化と機械学習への応用
- b) ベイズ最適化を活用した円錐交差点の探索手法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年，データ駆動科学を触媒や高分子材料に応用する試みが注目を集めている。しかし，限られたデータセットで予測精度の高い機械学習モデルを構築するには，材料に対する適切な特徴量の開発が不可欠である。我々は，二元共重合体の特徴量として，モノマーペアの重合初期段階における素過程の反応エネルギーや活性化障壁を含む DFT 計算値が有用であることを示した。また，この考え方を触媒にも拡張し，遷移金属錯体触媒の素反応のエネルギーを特徴量に用いるべく，DFT 法による計算結果の収集を実施している。現在，1648 種のホスフィン配位子を持つパラジウム錯体の構造と素反応の中間体データの収集まで完了している。
- b) 従来，ポテンシャルエネルギー曲面（PES）上における分子構造の探索には，量子化学計算によって求めたエネルギーとエネルギー勾配が使われてきた。だが，エネルギー計算を量子コンピュータ上での測定に置き換えた場合，エネルギー値には測定誤差が含まれるので滑らかな PES が描けない，つまり，従来のエネルギー勾配を用いる構造探索法が適用できないという問題が出てきた。この問題に対処するために，我々は，機械学習的手法の一つであるベイズ最適化（BO）を用いて光機能発現の鍵となる最安定円錐交差点を探索する手法の開発を行い，エチレンやホルムアルデヒド，ベンゼンなどの小分子の最安定円錐交差点構造を精度良く求めることに成功した。

B-1) 学術論文

T. YOSHIMURA, H. KATO, S. OIKAWA, T. INAGAKI, S. ASANO, T. SUGAWARA, T. MIYAO, T. MATSUBARA, H. AJIRO, M. FUJII, Y. OHNISHI and M. HATANAKA, “CopDDB: A Descriptor Database for Copolymers and Its Applications to Machine Learning,” *Digital Discovery* **4**, 195–203 (2025). DOI: 10.1039/D4DD00266K

R. SOMAKI, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Exploration of the Global Minimum and Conical Intersection with Bayesian Optimization,” *Mol. Inf.* **44**(2), e202400041 (2025). DOI: 10.1002/minf.202400041

R. OHNO, K. OTA, N. NISHIMURA, K. TANIGUCHI, S. KUROKAWA, T. WAKABAYASHI, M. HATANAKA, A. ROSAS-SÁNCHEZ, D. HASHIZUME and T. MATSUO, “Silicon Analogues of Cyclopropyl Radical Derived from a Highly Stable Cyclic Disilene Compound Featuring a Si–Br Bond,” *J. Am. Chem. Soc.* **146**(36), 24911–24924 (2024). DOI: 10.1021/jacs.4c06111

- K. MUTO, M. HATANAKA, F. KAKIUCHI and T. KOCHI**, “Theoretical Studies on Relative Stability of Cationic 1,10-Phenanthroline Palladium Complexes Bearing Alkyl Groups by Using Designed Alkane Templates,” *Organometallics* **43**(14), 1528–1535 (2024). DOI: 10.1021/acs.organomet.4c00097
- S. KANNO, H. NAKAMURA, T. KOBAYASHI, S. GOCHO, M. HATANAKA, N. YAMAMOTO and Q. GAO**, “Quantum Computing Quantum Monte Carlo with Hybrid Tensor Network for Electronic Structure Calculations,” *npj Quantum Inf.* **10**, 56 (2024). DOI: 10.1038/s41534-024-00851-8
- A. WAKIUCHI, S. JASIAL, S. ASANO, R. HASHIZUME, M. HATANAKA, Y. OHNISHI, T. MATSUBARA, H. AJIRO, T. SUGAWARA, M. FUJII and T. MIYAO**, “Multiple Comonomer Concentrations Prediction from FTIR Spectra with Quantum Chemistry-Based Interpretation,” *MRS Commun.* **14**, 439–444 (2024). DOI: 10.1557/s43579-024-00568-x

B-4) 招待講演

- M. HATANAKA**, “A descriptor database for metal-phosphorus complexes to evaluate the catalytic abilities using machine learning,” The 8th Japan-Czech-Slovakia (JCS) International Symposium on Theoretical Chemistry, Sapporo (Japan), June 2024.
- M. HATANAKA**, “Understanding and Designing Lanthanide Photofunctional Materials,” The 8th ICRDD International Symposium + Rising Star Program, Sapporo (Japan), October 2024.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

理論化学会幹事 (2022–).

日本化学会関東支部幹事 (2023–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 ACT-X アドバイザー (2023–).

文部科学省量子科学技術委員 (2023–).

文部科学省 科学技術・学術政策研究所 (NISTEP) 専門調査員 (2019–).

理科教育活動

総合学習, 横浜雙葉高等学校 (2024).

B-8) 大学等での講義, 客員

慶應義塾大学理工学部, 「化学A」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「量子化学基礎」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「分子量子化学」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「電子状態理論」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第1」, 2024年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「物理化学演習第2」, 2024年10月–2025年1月.

慶應義塾大学理工学部化学科, 「化学実験第1」, 2024年4月–7月.

B-10) 競争的資金

科研費学術変革領域研究(A),「金属錯体触媒データベースの構築による触媒開発の加速」, 畑中美穂 (2024年度–2025年度).

科研費基盤研究(A),「電解発生活性化学種の利用による新物質変換系の構築」(代表: 栄長泰明), 畑中美穂 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

B-11) 産学連携

共同研究, ダイキン工業(株),「自動反応経路探索 GRRM プログラムに基づく計算化学と機械学習を活用した触媒配位子を提案するシステムの開発」, 畑中美穂 (2020年度–2024年度).

共同研究, DIC (株),「マテリアルズインフォマティクス(MI)活用によるアルキド樹脂用非コバルトドライヤの開発」, 畑中美穂 (2018年度–2024年度).

C) 研究活動の課題と展望

遷移金属錯体触媒の特徴量として、錯体構造とモデル分子との素反応で得られる生成物のデータ収集を完了したため、次は、遷移状態のデータ収集に取り掛かる。触媒の作用は遷移状態を安定化することであるため、遷移状態の安定性が、触媒に対する最も良い特徴量となると期待している。遷移状態を含む特徴量データベースの構築が完了し次第、触媒反応の実験結果の予測ができるか検証すべく、実験グループとの共同研究を開始する予定である。