

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Ga₂N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複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。