

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）

HE, Wei（特任助教）

増田 道子（事務支援員）

野川 京子（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) 次世代型結晶スポンジ法の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

a) 結晶スポンジ法とは，結晶スポンジと呼ばれる結晶の中で解析対象となる化合物を整列させ，X線回折法によって構造解析を行なう手法である。結晶スポンジ法を用いることで，結晶化しない化合物であってもX線回折法による構造解析が可能になるといった利点があるものの，解析できる化合物は主に分子量 300 程度の疎水性化合物に限定されるという問題があった。そこで本研究課題では，この問題を克服するために，次世代型の結晶スポンジ（第二世代結晶スポンジ）の開発を行なった。第二世代結晶スポンジは，優れた分子捕捉力を持つかご型分子を結晶内に固定するという新しい設計に基づいて開発された。さらに第二世代結晶スポンジを使用した多数の構造解析によって，従来は解析困難であった分子量 1,000 を超える中分子や，高極性分子の構造解析が可能になったことを立証した。

B-1) 学術論文

K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA, “Medium-Sized-Molecule Encapsulation in Coordination Cages *via* Solid-State Mechanochemistry,” *J. Am. Chem. Soc.* **148**(4), 4588–4598 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c20185

R. EBIHARA, T. NAKAMA, K. MORISHIMA, M. YAGI-UTSUMI, M. SUGIYAMA and M. FUJITA, “Monomer Isolation from Oligomeric Proteins within Coordination Cages to Study Interface Ligand Binding,” *J. Am. Chem. Soc.* **148**(1), 1872–1880 (2026). DOI: 10.1021/jacs.5c19487

K. TSUKADA, F. SATO, T. MATSUYAMA, R. MATSUDA, T. OZAKI, Y. MORISHITA, S. FURUMURA, Y. HOMMA, H. SEKIYA, A. SUGAWARA, M. KUBOTA, T. MITSUHASHI, Y. YASUNO, T. SHINADA, R. NAGATA, T. KUZUYAMA, T. TANIGUCHI, M. FUJITA, M. UCHIYAMA and T. ASAI, “Vinigrol Tricyclic Scaffold Biosynthesis Employs an Atypical Terpene Cyclase and a Multipotent Cyclization Cascade,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(49), 45168–45177 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c14400

H. K. LIU, T. NAKAMA, S. FUNAMI, R. EBIHARA, T. MITSUHASHI and M. FUJITA, “Enzyme Immobilization in Porous Crystals *via* Cage Encapsulation,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(50), e202517027 (2025). DOI: 10.1002/anie.202517027

- C. PARK, S. TSUTSUMI, T. MITSUHASHI and M. FUJITA**, “Discovery of a New Type of Terpene Synthase Coded by an Orphan Gene in a Giant Virus,” *Biochemistry* **64**(18), 3866–3871 (2025). DOI: 10.1021/acs.biochem.5c00354
- R. TANAKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA**, “A Visible-Light-Responsive Octahedral Cage for Efficient and Selective Cross-[2 + 2] Cycloadditions,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(29), 25142–25147 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c07355
- S. YOSHIDA, S. BABA, N. MIZUNO, Y. NAKAMURA, S. SATO and M. FUJITA**, “Micro Crystalline Sponge Method Combined with Small-Wedge Synchrotron Crystallography for Nanogram Scale Molecular Structure Elucidation,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(27), 23917–23922 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c06360
- H. TAKEZAWA, Y. TAMURA and M. FUJITA**, “Step-by-Step Self-Assembly of a Double-Walled Knotted Cage with Increasing Topological Complexity,” *Chem. –Eur. J.* **31**(27), e202500009 (2025). DOI: 10.1002/chem.202500009
- Y. INOMATA, S. OGUMA, N. SAGARA, A. NISHIJIMA, Y. SABUROMARU, S. YOSHIDA, T. KAJITANI, K. SHIMOKAWA, S. SATO, M. YOSHIKAWA, M. FUJITA and T. SAWADA**, “An $M_{60}L_{60}$ Metal-Peptide Capsid with a 60-Crossing Woven Network,” *Chem* **11**(9), 102555 (2025). DOI: 10.1016/j.chempr.2025.102555
- T. NAKAMA, M. TADOKORO, R. EBIHARA, M. YAGI-UTSUMI, K. KATO and M. FUJITA**, “Proximity-Induced Saccharide Binding to a Protein’s Active Site within a Confined Cavity of Coordination Cages,” *Chem. Sci.* **16**(23), 10549–10554 (2025). DOI: 10.1039/d5sc00782h
- S. OGUMA, Y. INOMATA, A. HAYAKAWA, T. NAKAMA, M. FUJITA and T. SAWADA**, “Helical Sense Control of Metal-Peptide Torus Frameworks Leading to the Folding and Assembly of a $Ag_{21}L_{14}$ Braided Peptide Nanotube,” *J. Am. Chem. Soc.* **147**(11), 9098–9102 (2025). DOI: 10.1021/jacs.5c01458
- W. HE, H. TAKEZAWA, R. YAKUSHIJI, S. YOSHIDA, S. SATO and M. FUJITA**, “Host-Guest Chemistry in a Capillary Applied to the Facilitation of the Crystalline Sponge Method,” *Angew. Chem., Int. Ed.* **64**(20), e202501025 (2025). DOI: 10.1002/anie.202501025
- W. HE, Y. YU, K. IIZUKA, H. TAKEZAWA and M. FUJITA**, “Supramolecular Coordination Cages as Crystalline Sponges through a Symmetry Mismatch Strategy,” *Nat. Chem.* **17**, 653–662 (2025). DOI: 10.1038/s41557-025-01750-x

B-4) 招待講演

- M. FUJITA**, “Molecular Confinement Effects,” Gordon Research Conference Self-Assembly and Supramolecular Chemistry, Vaud (Switzerland), May 2025.
- M. FUJITA**, “Molecular Confinement Effects by Self-Assembled Cages,” ISMSC 2025, Kyoto (Japan), May 2025.
- M. FUJITA**, “Cavity-controlled photoreactions within self-assembled coordination cages,” 14th SolTech Conference, Bayreuth (Germany), September 2025.
- M. FUJITA**, “Molecular Confinement Effects in Self-Assembled Cages,” SAOG 40th anniversary meeting, Fribourg (Switzerland), February 2026.

B-6) 受賞, 表彰

- 藤田 誠, American Academy of Arts & Sciences 外国人名誉会員 (2025).
- 藤田 誠, The Palladium Global Science Award (2025).

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

本年度の研究によって、結晶スポンジ法を用いて構造決定できる化合物の範囲を大幅に拡大することに成功した。分子の正確な構造を決定することは、分子に関わるあらゆる分野で重要である一方、大変な困難が伴うことが多く、仮に構造決定が可能な場合であっても手間と時間がかかる作業であることが知られてきた。今後は結晶スポンジ法によって分子の迅速な構造決定が容易に達成されるようになり、科学の広い分野の研究が大幅に加速すると期待される。

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。液体分子と固体分子が接触する場所（分子論的な界面）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（外界との接続領域）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半導体光触媒（物質変換）と液体潤滑（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。①電子励起状態にあるタンタル酸ナトリウム光触媒の量子化学シミュレーション②氷と不凍液体が接する界面をナノ力学計測するために原子間力顕微鏡を冷却する技術の開発が本年度の主な成果である。

B-1) 学術論文

R. MORIMOTO, H. URATANI, H. ONISHI and H. SATO, “Dopant Distributions and Band-Edge Positions in Sr-Doped NaTaO₃: A First-Principles Study,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **28(8)**, 5111–5118 (2026). DOI: 10.1039/D5CP04385A

H. URATANI and H. ONISHI, “Quantum-Chemical Molecular Dynamics Study of Polaron Formation in Perovskite NaTaO₃ as a Water-Splitting Photocatalyst,” *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27(28)**, 14748–14753 (2025). DOI: 10.1039/D5CP01859E

Z. LU, R. YANAGISAWA, S. MORIGUCHI, T. UEDA, K. NAKAMOTO, T. MINATO and H. ONISHI, “Frequency-Modulation AFM in Sub-Zero Antifreeze Liquid,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **64(5)**, 05SP05 (2025). DOI: 10.35848/1347-4065/adcccc

M. YANAGI, J. CASANOVA-CHÁFER, T. HARA, Y. H. CHEW, T. YOSHIDA, H. ONISHI, C. BITTENCOURT and N. ICHIKUNI, “Calcination-Driven Co⁴⁺ Incorporation in Hydrothermally Synthesized NaTaO₃,” *Chem. Lett.* **54(4)**, upaf053 (2025). DOI: 10.1093/chemle/upaf053

B-4) 招待講演

大西 洋, 「半導体光触媒による酸素生成反応：マイクロ電極計測と酸素拡散シミュレーションの融合」, 電気化学会北陸支部秋季大会, 富山大学, 富山, 2025 年 11 月.

大西 洋, 「半導体光触媒による水分分解反応：どうしてそんなに収率が高いのか？」, 日本学術会議公開シンポジウム「カーボンニュートラルに向けた水素の多面的な利活用～第1回水素を作る～」, 東京(ハイブリッド開催), 2025 年 8 月.

大西 洋,「非水液体中での原子間力顕微鏡 (AFM) 計測」, 埼玉大学, さいたま, 2025 年 6 月.

大西 洋,「表面科学研究者から見たトライボロジー」, 分子研研究会「トライボロジーの分子科学」, 岡崎, 2025 年 4 月.

H. ONISHI, “High-speed analysis of oxygen evolution kinetics in water using microamperometry,” 2nd RIST International Symposium: Carbon Value Science & Technology, Noda, March 2026.

H. ONISHI, “Transient Amperometry for Unveiling the Fundamental Nature of Water-Oxide Interactions in Photocatalysis,” 107th Workshop IUVESTA-ZCAM-UNIZAR Oxides for Energy Applications: Bridging Experiment and Theory to Understand Functionality, zaragoza (spain), July 2025.

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–).

学会の組織委員等

33rd International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM33) 実行委員長 (2025–2026).

16th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-16) / 34th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM34) プログラム委員会委員長 (2025–2027).

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–).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究 (A), 「半導体光触媒による水の 4 電子酸化: 水中オペランド計測によるミリ秒反応化学の解明」, 大西 洋 (2025 年度–2028 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】液体–固体界面 (不凍液–氷界面と潤滑油–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。

澤井 仁美 (准教授(クロスアポイントメント*¹)) (2024年4月1日～2025年3月31日)
(教授(クロスアポイントメント*²)) (2025年4月1日着任)

村木 めぐみ (技術支援員)

野村 潤子 (事務支援員)

*1 長崎大学大学院総合生産科学研究科

*2 大阪公立大学大学院理学研究科

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) 密着型軟X線顕微鏡を用いた赤血球内の鉄分布イメージング
- b) 細胞内鉄輸送タンパク質のヘム鉄との相互作用による細胞内ヘム恒常性制御機構
- c) 病原菌のヘムセンサータンパク質を標的とする新規抗菌素材としてのVHH抗体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 生体内の鉄は主に Fe^{2+} の状態で存在するが、 Fe^{2+} はフェントン反応を促進し活性酸素種を発生させ、 Fe^{2+} 依存的細胞死フェルトーシスを引き起こす。近年、フェルトーシスは癌や虚血性疾患の起因となることが明らかになっており、細胞内の鉄の局在と分布を定量的に可視化することは医学的にも有益な情報をもたらす。本研究では、UVSOR-IIIにて岩山グループが開発中の「密着型軟X線顕微鏡」を用いて、非破壊の状態の生細胞に対して鉄の分布を定量的に検出できるイメージング法の確立を目指した。赤血球をモデル細胞として、鉄のL吸収端付近のエネルギー領域の軟X線を用いてエネルギー依存的な軟X線透過像を収集し、それらの画像上の各ピクセルにおけるX線吸収スペクトルを抽出して機械学習によりクラスター解析することで、赤血球中の相対的な鉄濃度分布をイメージングする方法を確立した。
- b) 細胞内で鉄イオンの輸送を介助するタンパク質として報告されているPCBPが、 Fe^{2+} だけではなくポルフィリン鉄錯体であるヘムを結合する新たな性質を見出した。各種分光解析により、PCBPは1分子あたり3分子までのヘムを結合することがわかった。最近、タンパク質のヘム結合解析のために開発されたヘム修飾プローブを用いてPCBPのヘム結合部位を探索するとともに、部位特異的変異体解析により、PCBPに結合する3分子のヘムはそれぞれ異なる部位に結合し、それらの配位構造が異なることを明らかにした。また、PCBPはヘムを安定に結合できることから、ヘム結合型PCBPがアポ型のヘム分解酵素HO1にヘムを渡し、HO1によるヘム分解過程を介助する「ヘム挿入タンパク質」として機能するかを、各種複合体解析ならびに分光解析により検討した。その結果、ヘム結合型PCBPのみがアポ型HO1と複合体を形成することが明らかになったが、PCBPからアポ型HO1にヘムが移行して挿入される速度は、遊離ヘムがアポ型HO1に挿入される速度よりもかなり遅かった。したがって、PCBPは、アポ型HO1にヘムを挿入するのではなく、鉄栄養素として食物から獲得したり、細胞内で生合成した貴重なヘムがHO1に奪われて分解されないようにするための「ヘム捕捉タンパク質」として機能する新たな可能性を見出した。
- 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、ヘムセンサータンパク質の機能を阻害する分子は抗菌薬の開発に有用であると考え、ヘムセンサータンパク質に対する抗体を作製した。各種タンパク質間相互作用解析により、作製した抗体の機能を詳細に検討した結果、この抗体はヘムセンサータンパク質に特異的かつ強く結合するだけでなく、ヘム感知能を阻害できることを明らかにした。

B-1) 学術論文

A. HORIKAWA, R. OKUBO, N. HISHIKURA, R. WATANABE, K. KURASHIMA-ITO, P. M. SAYEESH, K. INOMATA, M. MISHIMA, H. KOTEISHI, H. SAWAI, Y. SHIRO, T. IKEYA and Y. ITO, “Backbone and Side Chain ^1H , ^{13}C and ^{15}N Resonance Assignments and Secondary Structure Determination of the Rhizobial FixJ,” *Biomol. NMR Assignments* **19**, 77–82 (2025). DOI: 10.1007/s12104-025-10221-w

H. SAWAI, “The Importance of Ferric Reductases for Iron Uptake in Humans,” *Front. Chem. Biol.* **4**, 1724624 (2025). DOI: 10.3389/fchbi.2025.1724624

B-2) 国際会議のプロシーディングス他

N. HISHIKURA, A. HORIKAWA, K. KURASHIMA-ITO, R. OKUBO, R. WATANABE, P. M. SAYEESH, K. INOMATA, M. MISHIMA, T. MIKAWA, H. KOTEISHI, H. SAWAI, Y. SHIRO, T. IKEYA and Y. ITO, “A Dynamic Homodimer Structure of the Response Regulator FixJ from *Bradyrhizobium japonicum* in Its Phosphorylated State in Aqueous Solution,” *SSRN*, 6297199 (2026). DOI: 10.2139/ssrn.6297199

B-3) 総説、著書

Y. SHIRO, H. SAWAI and T. TOSHA, *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective) (2025). ISBN: 978-1-83767-440-4

I. YANATORI and H. SAWAI, “Introduction to Iron Dynamics in Human Cells: Fundamental Mechanisms and Their Updates,” in *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective), Chapter 1-1, 1–10 (2025).

H. SAWAI, H. SUGIMOTO and Y. SHIRO, “Iron Absorption in Human Duodenum by Dcytb and DMT1,” in *Iron in Biology: Molecular Structures, Cellular Processes and Living Systems*, RSC book series (Coordination Chemistry Perspective), Chapter 2-1, 73–88 (2025).

澤井仁美, 「生体鉄の分子科学: 鉄イオンとヘム鉄の生体内における動態と制御」, *人工血液*, **33**, 55–63 (2025).

B-4) 招待講演

澤井仁美, 「病原菌のヘム応答センサータンパク質の感知機能を特異的に『操る』抗菌薬の開発」, 第98回日本生化学会大会, 京都, 2025年12月.

H. SAWAI, “Heme sensing is a new target for antibiotic development,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu (USA), December 2025.

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-).

生命金属科学研究会常任幹事 (2025-).

学会の組織委員等

第4回生命金属科学シンポジウムプログラム委員 (2025).

第49回日本鉄バイオサイエンス学会学術集会学術奨励賞審査員 (2025).

第98回日本生化学会大会若手優秀講演賞審査員 (2025).

14th International Vanadium Symposium, Organizing Committee (2025).

学会誌編集委員

Frontiers in Chemical Biology, Associate Editor (2025-).

理科教育活動

地域連携事業「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

高大連携事業「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

生涯学習公開講座「化学セミナー」大阪公立大学 (2025).

B-8) 大学等での講義、客員

大阪公立大学理学部, 「先端研究探索」, 「無機化学演習」, 2025年10月-.

大阪公立大学理学部, 「化学実験」, 「化学卒業研究」, 「化学海外卒業研究」, 2025年4月-.

大阪公立大学大学院理学研究科, 「化学特別演習」, 「研究企画ゼミナール」, 「プロポーザルディフェンス」, 「無機化学特論」, 2025年4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」, 2025年10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」, 2025年4月-.

奈良先端科学技術大学院大学物質創成科学研究科, 「物質科学特論B」, 2025年10月-.

Lund Institute of Advanced Neutron and X-ray Science (LINXS), LINXS Core Group Fellow, 2023年9月-2025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Fe²⁺ 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-2025年).

(公財) 上原記念生命科学財団研究助成, 「軟X線顕微鏡による生細胞内金属の可視化技術の革新」, 澤井仁美 (2026年-2027年).

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と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」を追跡するための新しい方法を確立したい。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~2025年3月31日)
(教授(クロスアポイントメント*)) (2025年4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) ランタノイド錯体の高励起状態のポテンシャルエネルギー曲面を記述する近似手法の開発
- b) 配糖化酵素による C-グリコシル化反応の選択性機構の解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 近年, 遷移金属錯体に続く光触媒として, ランタノイドの一種であるセリウム錯体が注目を集めている。望む機能を有するセリウム錯体の設計には, その機能発現機構の理解が不可欠である。しかし, セリウム系の励起状態のポテンシャルエネルギー曲面 (PES) の計算は困難であり, これまでほとんど検討されてこなかった。本研究では, セリウム錯体の低励起状態に加え, 高励起状態の PES を近似的に記述する手法 (イオンエネルギーシフト法) を開発した。本手法により, セリウム錯体の 4f-5d 励起状態や, 4f から配位子への電荷移動型励起状態の PES 上の重要な構造 (遷移状態や円錐交差点) の探索が可能になった。さらに, 機構解明とデータ駆動型の錯体設計の融合を目指し, セリウム錯体の構造や励起状態に関する計算データのデータベース化も進めている。
- b) 近年, 医薬品や機能性分子における C-配糖体の重要性が高まり, 配糖化酵素を用いた C-グリコシル化反応が注目されている。特に糖転移酵素 GgCGT は, フロレチンに対して高い C-配糖化選択性を示すが, その反応機構および選択性発現機構は未解明である。本研究では, GgCGT と UDP グルコースによる配糖化反応を対象に, 計算化学的手法を用いた機構解析を行った。その結果, 従来説とは異なり, 酵素残基ではなく, 糖供与体が塩基として機能する新たな機構を提案した。また, 従来説においてプロトンを引き抜くと考えられていたヒスチジンと, 隣接するアスパラギン酸の二残基が, C/O-配糖体の選択性の鍵となることも見出した。

B-1) 学術論文

Y. OSADA, R. SATO, T. NISHIKAWA, M. TOKITA, T. KAMOSHIDA, T. MASUBUCHI, M. SHIBUTA, M. HATANAKA and A. NAKAJIMA, "From Si₁₆ to Ge₁₆: Geometric Origins of Robustness in Binary Cage Superatoms on Organic Substrates," *J. Phys. Chem. C* **130**(9), 3518–3525 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c07801

S. IKUTA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, "An Approximate Method for Exploring Nonradiative Decay Pathways from Highly Excited States of Lanthanide Complexes: Application to Luminescent Cerium Complexes," *J. Comput. Chem.* **47**(5), e70327 (2026). DOI: 10.1002/jcc.70327

D. TERADA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, "Mechanistic Origin of C- over O-Glycosylation in Glycosyltransferase GgCGT: A QM/MM Study," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **99**(2), uoag026 (2026). DOI: 10.1093/bulcsj/uoag026

T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Comprehensive Molecular-Level Understanding of MgO Hydration through Computational Chemistry,” *J. Phys. Chem. C* **130**(3), 1312–1326 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.5c06767

D. TERADA, T. INAGAKI and M. HATANAKA, “Mechanistic Elucidation of Enzymatic C-Glycosylation: Facilitation by Proton Transfer to UDP-Glucose,” *RSC Adv.* **15**(35), 28592–28600 (2025). DOI: 10.1039/d5ra02643a

H. YAMADA, S. TAKASUKA, S. OIKAWA, Y. HARASHIMA, T. TAKAYAMA, A. NAG, A. WAKIUCHI, T. ANDO, T. SUGAWARA, M. HATANAKA, T. MIYAO, T. MATSUBARA, Y. OHNISHI, H. AJIRO and M. FUJII, “Multi-Objective Bayesian Optimization for Experimental Design in Copolymerization and Revealing Chemical Mechanism of Pareto Fronts,” *ACS Appl. Eng. Mat.* **3**(8), 2402–2415 (2025). DOI: 10.1021/acsaenm.5c00309

B-4) 招待講演

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” The 6th CSJ-TSC Joint Symposium “Precision Chemistry for a Sustainable Future: Carbon Neutrality, AI, and Healthcare,” Taichung (Taiwan), March 2026.

M. HATANAKA, “Development of Feature Descriptors for Machine Learning Guided Design of Functional Materials,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025), Honolulu (USA), December 2025.

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” Computational Modeling of Catalysis Symposium, Tianjin (China), October 2025.

M. HATANAKA, “Development of Feature Descriptors for Machine Learning Guided Design of Functional Materials,” The 28th International Annual Symposium on Computational Science and Engineering (ANSCSE28), Bangkok (Thailand), July 2025.

M. HATANAKA, “Theoretical and Data-Driven Approaches to Lanthanide Photofunctional Materials,” The 13th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025), Oslo (Norway), June 2025.

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 (2022–2025).

日本化学会理論化学・情報化学・計算化学デビジョン幹事 (2025–).

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–).

文部科学省基礎研究振興部会委員 (2025–).

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 (2025).

B-8) 大学等での講義, 客員

慶應義塾大学理工学部,「化学A」,「分子量子化学」,「物理化学演習第1」,「化学実験第1」,2025年4月–7月.

慶應義塾大学理工学部,「量子化学基礎」,「電子状態理論」,「物理化学演習第2」,2025年10月–2026年1月.

慶應義塾大学大学院理工学研究科,「計算化学特論」,2025年10月–2026年1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」(代表者: 栄長泰明), 畑中美穂 (研究分担者) (2023年度–2025年度).

日本医療研究開発機構創薬基盤推進研究事業,「未開拓ケミカルスペースを狙う金属錯体創薬の基盤技術確立」(代表者: 野田秀俊), 畑中美穂 (研究分担者) (2025年度–2027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–2025年度).

C) 研究活動の課題と展望

ランタノイド系の光機能の理解には, 励起状態のポテンシャルエネルギー曲面 (PES) の把握が不可欠である。しかし, 従来法であるエネルギーシフト (ES) 法では, ランタノイドの 4f–4f 励起状態および配位子の三重項励起状態の PES しか記述できなかった。これに対し, 2025 年度に新たに提案したイオンエネルギーシフト (IES) 法は, 4f–5d 励起や電荷移動 (CT) 型励起状態の記述を可能にする手法である。そのため, 本手法はセリウム系にとどまらず, 発光材料として広く用いられるユウロピウム系における CT 励起状態の役割の解析にも適用可能であると考えられる。このように, ES 法と IES 法を併用することで, 幅広いランタノイド光機能材料の理解と設計の進展が期待される。一方で, IES 法には励起エネルギーの明示的な計算が必要であるが, 代表的な励起状態計算法である TDDFT 法では, 定性的にも誤った結果を与える場合があるという問題が残されている。したがって, 大規模なランタノイド錯体に対して, 励起エネルギーおよび励起状態の性質を高精度に評価可能な計算手法の開発が喫緊の課題であると言える。