

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/acsaelm.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。