

# 日本化学会 第 106 春季年会 (2026)

## ハイライト講演集

会期：2026 年 3 月 17 日～20 日

会場：日本大学工学部船橋キャンパス



## 1. ハイライトシンポジウム

1. 3月18日(水)13:00~15:40  
[A1423-2pm] A1423 (14号館 [2階] 1423)  
シーケンシャル物質化学：秩序と無秩序の時空間制御  
オーガナイザー：植村 卓史 (東京大学)

## 2. ハイライト講演 (日付順)

1. 3月17日(火) 13:40 ~ 14:00  
[A1458-1pm-03] A1458 (14号館 [5階] 1458)  
配位子設計による金超原子の電子親和力の制御  
○伊藤 駿<sup>1</sup>、小安 喜一郎<sup>1</sup>、佃 達哉<sup>1</sup> (1. 東京大学)
2. 3月17日(火) 13:20 ~ 13:40  
[A1454-1pm-02] A1454 (14号館 [5階] 1454)  
メカノケミカル法によるPFASのフッ素化合物へのアップサイクル  
○服部 雅史<sup>1</sup>、清野 達希<sup>2</sup>、趙 正宇<sup>2</sup>、Debarshi Saha<sup>1</sup>、Muhamad Bacho<sup>1</sup>、東 昌弘<sup>3</sup>、藤代 萌<sup>3</sup>、岸川 洋介<sup>3</sup>、柴田 哲男<sup>1,2</sup> (1. 名工大院工 共同ナノメディシン科学専攻、2. 名工大院工 工学専攻、3. ダイキン工業)
3. 3月17日(火) 15:00 ~ 15:20  
[A1453-1pm-07] A1453 (14号館 [5階] 1453)  
溶解性改善を指向したエチレンジアンモニウム塩のカウンターアニオン交換とペロブスカイト太陽電池への効果  
○長谷川 晃央<sup>1</sup>、田中 颯人<sup>1</sup>、平 翔太<sup>1</sup>、松重 優子<sup>1</sup>、Chien-Yu Chen<sup>1</sup>、中村 智也<sup>1</sup>、Minh Anh Truong<sup>1</sup>、Richard Murdey<sup>1</sup>、若宮 淳志<sup>1</sup> (1. 京大化研)
4. 3月18日(水) 9:20 ~ 9:40  
[F1233-2am-02] F1233 (12号館 [3階] 1233)  
過冷却液体状態で塗れる液晶接着材料の開発  
○大野 滉太<sup>1,2</sup>、須賀 健介<sup>1</sup>、齊藤 尚平<sup>1</sup> (1. 大阪大学、2. 京都大学)
5. 3月18日(水) 9:20 ~ 9:40  
[A1457-2am-02] A1457 (14号館 [5階] 1457)  
PVP安定化Au閉殻超原子のスパッタ法による合成  
平井 稜真<sup>1</sup>、○小安 喜一郎<sup>1</sup>、佃 達哉<sup>1</sup> (1. 東京大学)

6. 3月18日(水) 9:40 ~ 9:50  
[A1456-2am-01] A1456 (14号館 [5階] 1456)  
結晶構造予測と構造相転移予測の統合ワークフローの開発  
○谷口 卓也<sup>1</sup>、深澤 亮<sup>1</sup> (1. 早大)
7. 3月18日(水) 15:00 ~ 15:20  
[E1132-2pm-06] E1132 (11号館 [3階] 1132)  
キラル対称性の破れを伴う単結晶-単結晶構造転移と円偏光発光特性  
○桶谷 龍成<sup>1</sup>、岡田 武蔵<sup>1</sup>、池田 紗希<sup>1</sup>、柚山 健一<sup>2</sup>、中嶋 琢也<sup>2</sup>、久木 一朗<sup>1</sup> (1. 阪大院基礎工、2. 阪公大院理)
8. 3月18日(水) 14:20 ~ 14:40  
[F1231-2pm-05] F1231 (12号館 [3階] 1231)  
ケイ素 FLP 触媒を用いたアミド・エステルの触媒的  $\alpha$ -重水素化反応の開発  
○古賀 祐之介<sup>1</sup>、福元 良空<sup>1</sup>、舛井 顕丞<sup>1</sup>、田中 津久志<sup>1</sup>、永縄 友規<sup>2</sup>、林 幹大<sup>3</sup>、大嶋 孝志<sup>1</sup>、矢崎 亮<sup>1,4</sup> (1. 九大院薬、2. 産総研 IRC3、3. 名工大院工、4. 九大高等研)
9. 3月18日(水) 17:15 ~ 17:25  
[A1455-2vn-09] A1455 (14号館 [5階] 1455)  
PTFE の解体・再生メカニズムを示唆する赤外スペクトルの変化  
○大貫 友椰<sup>1</sup>、荒木 泰介<sup>1</sup>、松田 大<sup>1</sup>、塩谷 暢貴<sup>1</sup>、長谷川 健<sup>1</sup>、Yao Li<sup>2</sup>、西村 祥吾<sup>2</sup>、平野 翔<sup>2</sup>、仙波 祐太<sup>2</sup>、火原 彰秀<sup>2</sup>、加納 純也<sup>3</sup> (1. 京大化研、2. 東京科学大学、3. 東北大多元研)
10. 3月18日(水) 17:05 ~ 17:25  
[H932-2vn-04] H932 (9号館 [3階] 932)  
アンフィジノール3の短縮人工アナログの合成と構造活性相関研究  
○保野 陽子<sup>1,2</sup>、若宮 佑真<sup>1</sup>、三田 祐輔<sup>1</sup>、山下 祐輝<sup>1</sup>、松森 信明<sup>1</sup>、大石 徹<sup>1</sup> (1. 九州大学、2. 大阪公立大学)
11. 3月19日(木) 9:30 ~ 9:40  
[E1133-3am-04] E1133 (11号館 [3階] 1133)  
電解酸化とフローマイクロリアクターの集積によるリポース型オキソニウムカチオンの発生と反応  
○工藤 拓満<sup>1</sup>、芦刈 洋祐<sup>1</sup>、足立 萌衣<sup>1</sup>、宅見 正浩<sup>1</sup>、永木 愛一郎<sup>1</sup> (1. 北大院理)

12. 3月19日(木) 11:10 ~ 11:30  
[A1453-3am-06] A1453 (14号館 [5階] 1453)  
分子シャトルの分析を活用した探究型実験教材の開発  
○加藤木 智哉<sup>1</sup>、吉川 晶子<sup>2</sup>、東屋 功<sup>2</sup>、今井 泉<sup>3</sup> (1. 東邦大院理、2. 東邦大薬、3. 岐阜聖徳学園大学)
13. 3月19日(木) 14:00 ~ 14:20  
[E1122-3pm-04] E1122 (11号館 [2階] 1122)  
2つのペンタセンを有する  $\pi$  クラスターの合成と機能解明  
○楨原 優太<sup>1</sup>、西内 智彦<sup>1,2</sup>、久保 孝史<sup>1,2,3</sup> (1. 阪大院理、2. 阪大 ICS-OTRI、3. 阪大 SRN-OTRI)
14. 3月20日(金) 10:50 ~ 11:10  
[E1112-4am-06] E1112 (11号館 [1階] 1112)  
計算化学的アプローチによる光励起パラジウム触媒の配位子設計：アルキルケトン由来ケチルラジカルの効率的生成  
○田中 耕作三世<sup>1,2,3</sup>、山田 蓮<sup>4</sup>、Debbarma Suvankar<sup>2,3</sup>、神名 航<sup>4</sup>、林 裕樹<sup>2,3</sup>、松岡 和<sup>2,3</sup>、前田 理<sup>2,3,4</sup>、美多 剛<sup>2,3</sup> (1. 乙卯研究所、2. 北大 WPI-ICReDD、3. JST-ERATO、4. 北大院理)
15. 3月20日(金) 10:50 ~ 11:10  
[E1123-4am-06] E1123 (11号館 [2階] 1123)  
銀担持酸化チタンを用いたパーフルオロアルキル化合物の触媒的光分解  
○豊田 悠斗<sup>1</sup>、Rahat Javaid<sup>2</sup>、Jochen Lauterbach<sup>2</sup>、小林 洋一<sup>1,3</sup> (1. 立命館大生命科学、2. サウスカロライナ大工・計算、3. JST さきがけ)
16. 3月20日(金) 11:20 ~ 11:40  
[H937-4am-07] H937 (9号館 [3階] 937)  
細胞内超分子化学：人工オルガネラの構築  
Qinxuan Yang<sup>1</sup>、齊藤 知恵子<sup>2</sup>、相田 卓三<sup>1,3</sup>、○三木 卓幸<sup>1</sup> (1. 東大院工、2. 東大院医、3. 理研 CEMS)

## 「シーケンシャル物質化学：秩序と無秩序の時空間制御」

企画担当：植村卓史（東大院工）

uemurat@g.ecc.u-tokyo.ac.jp / 03-5841-2761

### 企画趣旨文

本企画では、独自の分子設計や分析法を駆使し、無秩序状態からの秩序の発現や、ナノからミクロスケールでの序列形成を探索することで、これまでにない機能の発現を可能にする最新の研究を講演していただく。高分子、生体分子、ナノクラスター、金属錯体など多彩なナノ物質群を取り上げ、サイズの・時間的階層の視点に立脚し、各階層間の秩序性・連動性に着目した材料開発と機能制御に向けた実りある討論を行う。

### 企画のポイント

これまでの「シーケンシャル物質化学」の中長期シンポジウムでは、「原子・分子の精密序列配置に向けた新アプローチ」（2023年）、「原子・分子の精密序列配置による機能発現」（2024年）、「最先端分析法によるブレイクスルー」（2025年）を開催してきた。すなわち、シンポジウムのフォーカスとして、物質創製における新たな方法論から始まり、機能・物性開拓、解析法や測定技術の開発へと展開してきた。第4回目となる今回は、物質や生命の原点ともいえる「秩序性」に焦点を据えたシンポジウムを企画している。「秩序」と「無秩序」の間に潜むあいまいさや予測不能な現象など、謎に満ちた研究領域に独自の手法で挑む先生方に講演を依頼している。有機化学、無機化学、材料化学、超分子化学、生命科学の分野を代表する5名の先生方に魅力的な講演をしていただくことで、活発な討論が展開されることを期待している。

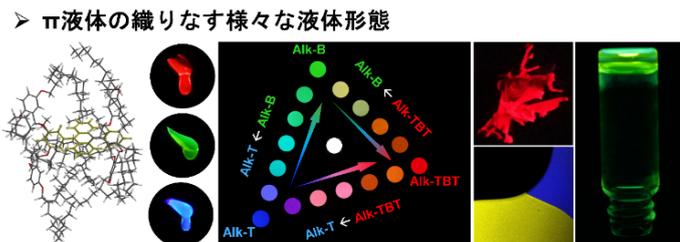
### 講演プログラム

3月18日（水）午後

13:00~ 開会挨拶

13:05~「機能性液体材料」中西 尚志（物質・材料研究機構）

分岐側鎖で被覆された $\pi$ 共役分子は側鎖の超高エントロピーの効果により常温で $\pi$ 液体となる。レオロジーではNewtonian液体として振る舞うが、動的な $\pi$ - $\pi$ 相互作用が内在し、液体物性を支配している。本講演では、 $\pi$ 共役分子をコアとする等方性/過冷却液体、過冷却ゲル、均質混和/不混和液体などの織りなす先端液体化学を議論する。

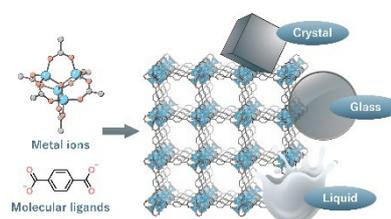


**13:35~「分子集合体の構造揺らぎと実時間成長観測」中室 貴幸（東京大学）**

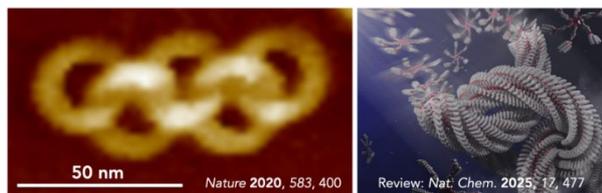
ナノ物質の機能を理解・設計するには、揺らぎを伴う構造変化を動的に捉えることが重要である。本講演では、透過電子顕微鏡による分子集合体の実時間観察を通じて、秩序形成過程に現れるナノスケール非平衡動態の意義について議論する。

**14:05~「金属と分子からなる構造体のガラス、液体の構造秩序と機能」堀毛 悟史（京都大学）**

配位高分子や MOF は結晶材料として知られてきたが、近年はガラスや液体相という不規則相でも特異な機能を示すことが分かってきた。本発表ではこれらアモルファス状態に内在する構造制御と伝導・機械特性を議論する。特に一次元鎖状の配位高分子が示す熱的・機械的応答を有機高分子と比較し、その本質的な違いを議論する。

**14:40~「階層的分子集合体が発現する高次協同性」矢貝 史樹（千葉大学）**

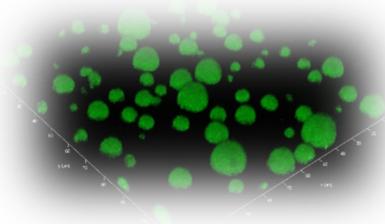
10 ナノメートルから 1 マイクロメートルの領域はメゾ領域と呼ばれ、トップダウン/ボトムアップ両アプローチにおいても構造設計が困難な領域である。本講演では、当研究室が開拓してきた「湾曲創発型超分子重合」を基軸に、高次構造の形成に伴って現れる協働性を鍵として、メゾ領域における新しいモノづくりの一例を紹介する。



高次協働性によって実現するメゾスケールカテナン構造

**15:10~「自律的に進化する人工細胞の創出に向けたボトムアップ分子システム」野地 博行（東京大学）**

生命とは自然による分子工学である。これまで生命に新しい分子工学を発見し驚く時代であった。これからは「生命を創る」ことで生命の分子工学を拡張する時代である。



日本化学会第 106 春季年会ハイライト

## コーティング剤が決める！「金超原子」が電子を惹きつける力

講演タイトル：配位子設計による金超原子の電子親和力の制御 (A1458-1pm-03)

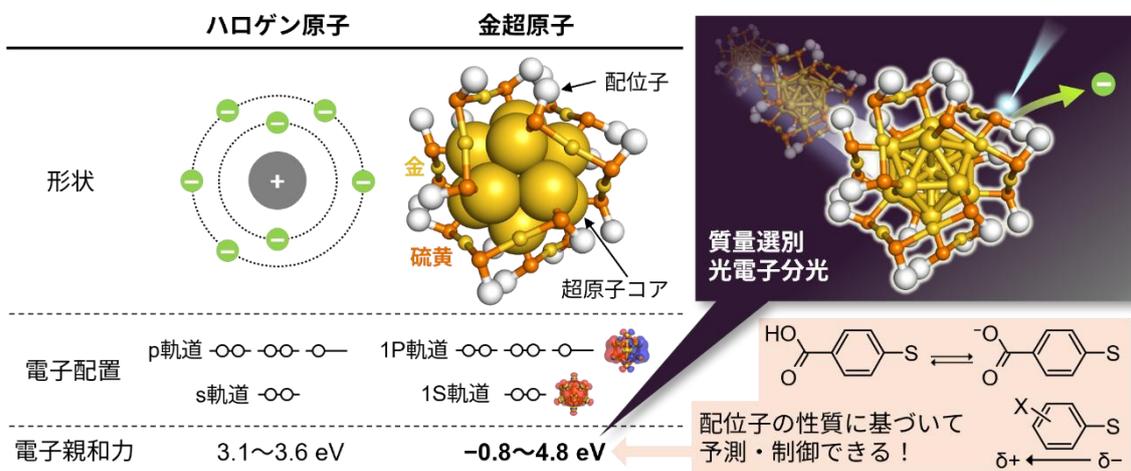
○伊藤 駿、小安 喜一郎、佃 達哉 (東京大学)

### 1. 研究の概要

原子はあらゆる物質を作る最小の構成単位である。原子の内部では飛び飛びのエネルギーを持つ軌道が原子核の周りに形成され、電子を収容している。一方、特定の数の金原子でできた超微粒子(例えば、 $\text{Au}_{13}$ )でも、粒子全体に広がった軌道が電子を収容することから、これらを「**金超原子**」と位置づけることができる。我々のグループでは、有機分子で表面が被覆された金超原子を原子精度で合成する手法を開発し、その幾何構造と基礎物性との関係を調べてきた。本研究では、**金超原子固有の物性である電子親和力(電子を惹きつける力)が表面配位子(コーティング剤)の性質によって劇的に変調できることを見出した**。決め手となったのは、さまざまな配位子で保護された  $\text{Au}_{13}$  超原子の化学合成と、電子親和力を測定するための装置開発である。本成果は、金超原子を設計可能な人工元素として活用した超原子物質科学の学術的基盤につながるものと期待される。

### 2. ポイント

金超原子の電子親和力を測定するための装置は市販されていないので、そのための分析装置を設計・自作した。この装置を用いて、合成した  $\text{Au}_{13}$  超原子を溶液中から真空中に取り出し、溶媒・対イオン・不純物など外界からの影響がない状態で、光電子分光法によって電子親和力を決定した。まず、 $\text{Au}_{13}$  超原子の電子親和力が、ハロゲン原子と同程度かそれ以上であったことから、「超ハロゲン」とみなせることが分かった。さらに、配位子の種類と電子親和力の関係を調べたところ、**金超原子の電子親和力は、表面配位子の双極子モーメント(電気的な偏り)と、配位子に局在する電荷に基づいて予測・設計できることを見出した**。



### 3. 今後の展開

本研究で明らかにした金超原子の電子親和力を変調するための構造設計指針は、金超原子を設計可能な人工元素として扱うための基盤となる。周期表から原子を選んで分子や物質を作る従来の物質科学に対して、**性質を設計した超原子から物質を組み立てる超原子物質科学の学術的基盤となる成果である**。

#### 【問い合わせ先】

東京大学大学院理学系研究科化学専攻 特任助教 伊藤 駿 s.ito@chem.s.u-tokyo.ac.jp

教授 佃 達哉 tsukuda@chem.s.u-tokyo.ac.jp

## PFAS をフッ素原料として捉える分解と再利用法の開発

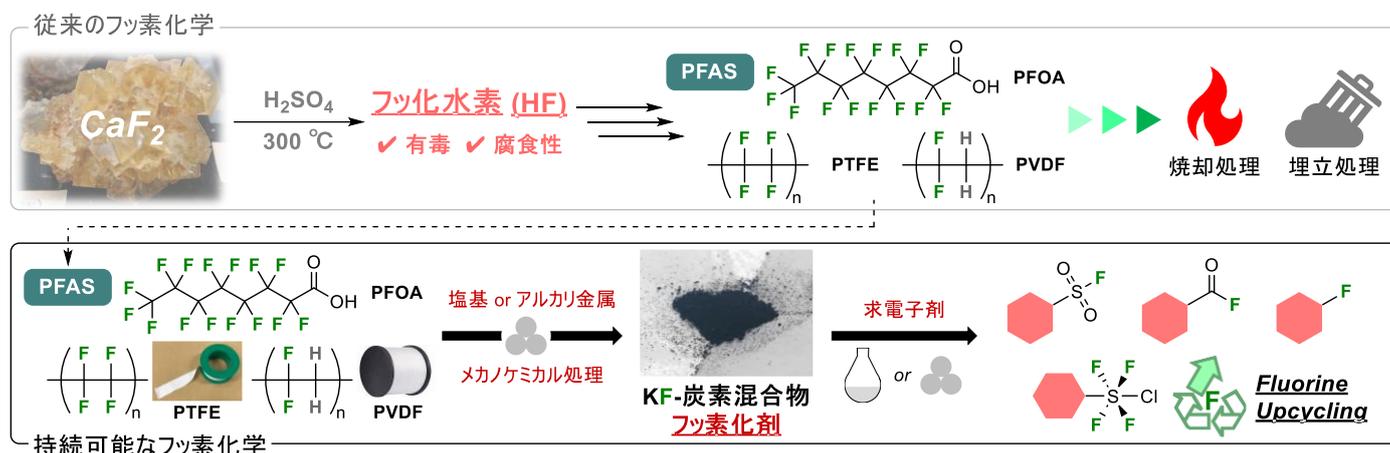
講演番号 A1454-1pm-02 「メカノケミカル法による PFAS のフッ素化合物へのアップサイクル」

○服部 雅史<sup>1</sup>, 清野 達希<sup>2</sup>, 趙 正宇<sup>2</sup>, Debarshi Saha<sup>1</sup>, Muhamad Zulfaqar Bacho<sup>1</sup>, 東 昌弘<sup>3</sup>, 藤代 萌<sup>3</sup>, 岸川 洋介<sup>3</sup>, 柴田 哲男<sup>1,2</sup> (<sup>1</sup>名工大院工 共同ナノメディシン科学専攻, <sup>2</sup>名工大院工 工学専攻, <sup>3</sup>ダイキン工業)

### 【研究概要】

PFAS (per- and polyfluoroalkyl substances) は分子内に多くのフッ素を有する化合物であり、強力な C-F (炭素-フッ素) 結合に起因する高い安定性から、日用品から先端産業に至るまで、幅広い分野で利用されてきた。一方で、この長所である高い安定性は環境中では、分解が困難であるという短所に反転し、焼却・埋め立て以外の簡便な処理方法開発が喫緊の課題となっている。そこで本研究では、PFAS を産業廃棄物としてではなく、新たなフッ素源として捉えることで課題の解決を図る。PFAS を新たなフッ素源として捉え直すことで、有限な天然資源である蛍石 (CaF<sub>2</sub>) や、蛍石の高温硫酸処理によって生じる取扱いが難しいフッ化水素 (HF) を経由することなくフッ素化合物を合成することが可能になり、持続可能なフッ素化学を実現することができる。

本研究では、①塩基を用いた PVDF (ポリビニリデンフルオリド) の分解および再利用、②アルカリ金属を用いた PFAS の完全分解および再利用の 2 つのメカノケミカル手法を開発した。



### 【ポイント】

#### ✓ メカノケミカル法による環境調和型合成法

近年、有機溶媒をほとんど必要としない環境調和型合成法としてメカノケミカル法が注目を集めている。本報告で紹介する 2 つの手法は従来の溶液反応とは異なり、物理的衝撃によって固体状態のまま反応を進行させるため、環境負荷を伴う溶媒を最小限、あるいは全く必要としない。またメカノケミカル法では溶解度に依存しない反応設計が可能であるため、PFAS の中でも溶解性の低いフッ素系高分子などにも適用可能である。

#### ✓ 分解と再利用をワンポットで実現可能

アルカリ金属による PFAS 分解においては、分解処理後に試薬を添加し、メカノケミカル法を用いることで同じ容器内でそのまま再利用反応を進行させることが可能であり、より簡便に PFAS をフッ素資源として利用することができる。

### 【今後の展開】

本手法はフッ素系低分子から高分子までの幅広い PFAS を効率的にフッ素原料へ変換し、高付加価値なフッ素化合物の簡便な合成を可能にする。今後は工業スケールへの展開や、更なるアップサイクリング法の開発を通じて持続可能なフッ素化学の実現への貢献を目指す。

【問い合わせ先】柴田 哲男 nozshiba@nitech.ac.jp 052-735-7543

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町 名古屋工業大学

日本化学会第 106 春季年会ハイライト

## 溶解性の高い表面修飾材料の開発 —高性能ペロブスカイト太陽電池作製の再現性を向上—

講演番号 A1453-1pm-07 「溶解性改善を指向したエチレンジアンモニウム塩のカウンターアニオン交換とペロブスカイト太陽電池への効果」

(京大化研) ○長谷川 晃央、田中 颯人、平 翔太、松重 優子、

Chien-Yu Chen、中村 智也、Minh Anh Truong、Richard Murdey、若宮 淳志

### 【研究の概要】

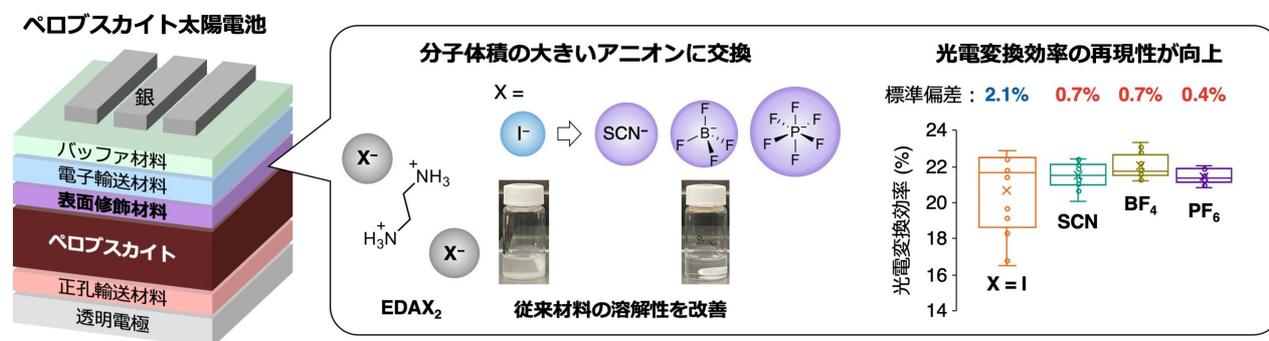
次世代の太陽電池として社会実装が強く期待されている「ペロブスカイト太陽電池」において、その発電効率を高めるためには、発電層であるペロブスカイト薄膜の「表面修飾」が極めて重要な技術である。当研究グループでは、これまでに表面修飾材料として「エチレンジアンモニウムジヨウ化物 (EDA<sub>2</sub>)」が開放電圧の向上に有効であることを報告し、現在では世界中の研究グループで使用される標準材料となっている。しかし、EDA<sub>2</sub>には汎用溶媒であるイソプロパノールに溶けにくいという欠点があり、厳密な濃度調整が難しく、その結果として太陽電池性能にばらつきが生じやすいという課題があった。そこで本研究では、対アニオンをヨウ化物イオンから、より分子体積の大きな SCN<sup>-</sup>、BF<sub>4</sub><sup>-</sup>、PF<sub>6</sub><sup>-</sup> へと置き換えることで、溶解性を高め、表面修飾の再現性を向上させることに成功した。

### 【ポイント】

かさ高いアニオンを有する一連の EDA 塩を合成し、対アニオンのイオン半径が大きくなるにつれてイソプロパノールへの溶解性が著しく向上することを確認した。これらを鉛系ペロブスカイト太陽電池に適用した結果、いずれの場合もエネルギー変換効率は 22%を超え、性能のばらつきを示す標準偏差は EDA<sub>2</sub> の場合の 2.1%から、EDA(SCN)<sub>2</sub> で 0.7%、EDA(BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub> で 0.7%、EDA(PF<sub>6</sub>)<sub>2</sub> で 0.4%へと大幅に減少した。さらに特筆すべきは、溶解性の向上により、酢酸エチルなどの低極性溶媒が使用可能になった点である。これにより、従来の溶媒ではダメージを受けやすかったスズ系ペロブスカイト太陽電池への適用も可能である（鉛スズ混合系で変換効率 23.3%を達成）ことを実証した。

### 【今後の見通し】

本研究は、材料の母骨格がもつ機能を維持しつつ溶解性を改善し、塗布プロセスへの適合性を高める手法を確立したものである。この知見は、ペロブスカイト太陽電池のさらなる高性能化や製造プロセスの安定化に寄与し、社会実装に向けた研究開発を大きく加速させるものと期待される。



【問い合わせ先】 〒611-0011 京都府宇治市五ヶ庄 京都大学 化学研究所

中村 智也 tomoya@scl.kyoto-u.ac.jp

若宮 淳志 wakamiya@scl.kyoto-u.ac.jp

日本化学会第 106 春季年会ハイライト

講演番号 F1233-2am-02

## 過冷却液体状態で塗れる液晶接着材料の開発

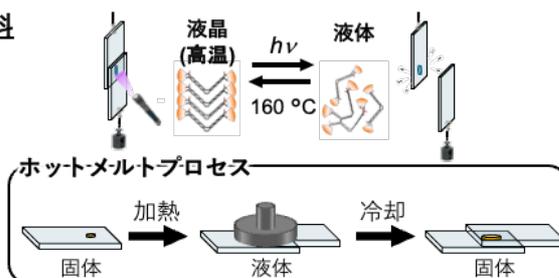
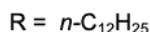
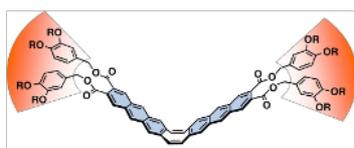
<sup>1</sup> 阪大院理, <sup>2</sup> 京大院理) ○大野 滉太<sup>1,2</sup>・須賀健介<sup>1</sup>・齊藤尚平<sup>1</sup>

## 【研究の概要】

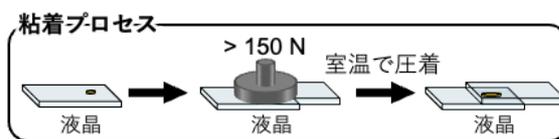
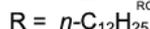
当研究グループではこれまで、自発的な分子集積によって高い凝集力を示すカラムナー液晶を、光で剥がせる接着材料として応用する道を模索してきた。しかしながら、その接着過程においては一度加熱して液晶を融かすホットメルトプロセスが必要であった(先行研究1)。これを解消するため、化学的な外部刺激を用いずに室温で押し付けるだけで貼り付けられる液晶粘着剤も開発しているが、依然として基板に綺麗に塗り広げるにはかなりの圧力や少量の有機溶媒を用いる必要があった(先行研究2)。

本研究では、室温で過冷却液体から液晶への相転移を示す液晶材料を用いて、より簡単に基板に塗布でき、なおかつ自発的に固化する液晶接着材料を開発した。これは、液晶接着材料の新たな可能性を拓くものである。

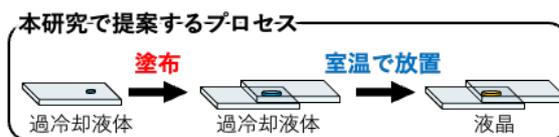
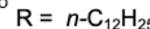
## 先行研究1. 光融解する液晶接着材料



## 先行研究2. 液晶粘着材料



## 本研究. 過冷却液体状態で塗れる液晶接着材料



## 【ポイント】

液晶はその分子設計により様々な集積構造や相転移挙動を示し、過冷却性もその一つである。過冷却の性質をうまく利用することにより、室温で基板に塗り広げられ、放置するだけで基板を貼り付けられる新たな液晶接着材料を開発した。

## 【今後の見通し】

高い凝集力だけでなく、室温で過冷却状態を示し、塗布のための適切なポットライフ (可使時間) を備えた分子設計に必要な条件を突き止める。それにより液晶接着材料の接着プロセスを簡易化し、液晶特有の機能もちあわせた新規接着材料の開発に繋げる。

[問い合わせ先] 齊藤尚平 大阪大学 理学研究科 化学専攻 教授 saito.shohei@chem.sci.osaka-u.ac.jp

日本化学会第 106 春季年会ハイライト

## 幻の金超原子を高分子で補足することに成功

講演タイトル「PVP 安定化 Au 閉殻超原子のスパッタ法による合成」 (A1457-2am-02)

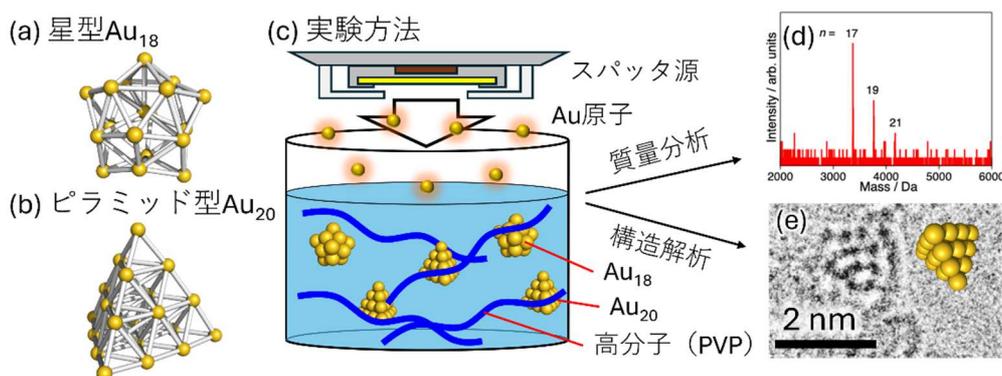
(東京大学大学院理学系研究科) 平井 稜真・○小安 喜一郎・佃 達哉

### 【研究の概要】

数個～数 10 個程度の金原子が会合した**金超原子**は、その安定性や物性が構成原子数によって制御できることから、**新しい機能性物質として期待されている**。なかでも**魔法数**と呼ばれる特定の個数の金原子でできた  $\text{Au}_{18}$ ,  $\text{Au}_{20}$  (図 a, b) は、最小の金超原子としてその存在が真空実験や理論計算によって提唱されてきた。しかし、凝集に対して極めて不安定であることからこれまで合成例がなく、どのような物性を示すかもわかっていない。我々は、マグネトロンスパッタ法によって発生した Au 原子を高分子 (ポリビニルピロリドン) 中で成長させることにより、 $\text{Au}_{18}$  および  $\text{Au}_{20}$  超原子を**安定化合物として合成することに成功した**。

### 【ポイント】

金塊をターゲットとしたスパッタ法によって Au 原子を発生し、**量を制御しながら高分子を含むポリエチエングリコール溶液中に供給したところ**、金超原子  $\text{Au}_{18}$ ,  $\text{Au}_{20}$  を含む褐色溶液を得た (図 c)。得られた金超原子の質量分析を行ったところ (図 d) イオン化に際して 1 原子が解離した  $\text{Au}_{17}^-$  や  $\text{Au}_{19}^-$  として検出された。また高分解能透過型電子顕微鏡観察 (図 e) によって、 $\text{Au}_{20}$  超原子に対して理論的に予想されるピラミッド状の最密充填構造を確認した。



### 【今後の展開】

今後は、合成面においては  $\text{Au}_{18}$  や  $\text{Au}_{20}$  の純度や生成量の向上を図り、X線吸収分光などによる構造解析を進める。また、**表面が部分的に露出していることを活かした表面修飾や触媒応用**を念頭において、化学的な性質を調査する。

【問い合わせ先】 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻

小安 喜一郎 (KOYASU Kiichirou) [kkoyasu@chem.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:kkoyasu@chem.s.u-tokyo.ac.jp)

03-5841-4559

佃 達哉 (TSUKUDA Tatsuya)

[tsukuda@chem.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:tsukuda@chem.s.u-tokyo.ac.jp)

03-5841-4363

## 温度まで考える結晶構造予測 — 相転移を見通す計算ワークフロー

講演番号 A1456-2am-01 「結晶構造予測と構造相転移予測の統合ワークフローの開発」

(<sup>1</sup>早大データ科学センター・<sup>2</sup>早大院先進理工) ○谷口卓也<sup>1</sup>・深澤亮<sup>2</sup>

### 1. 研究の概要

本研究では、機械学習による探索空間削減とニューラルネットワークポテンシャルを組み合わせた結晶構造予測法「SPaDe-CSP」を、有限温度の自由エネルギー評価まで拡張した統合ワークフローを開発した。これにより、有機結晶の多形予測に加え、温度依存の構造相転移挙動を理論的に評価することを可能にした。

### 2. 背景

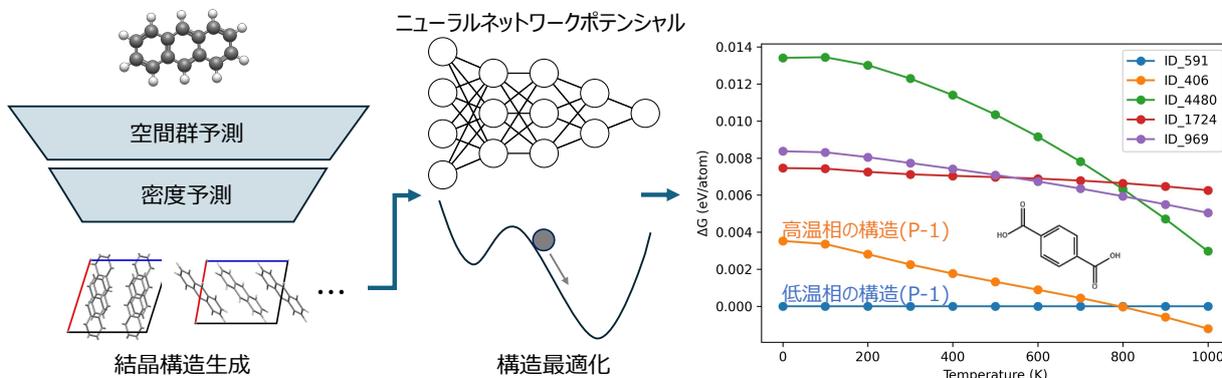
有機分子結晶は弱い分子間相互作用により多形性や相転移を示しやすいが、従来の結晶構造予測は静的な安定構造探索に留まり、温度効果を考慮した相挙動の予測は困難であった。機械学習と統計熱力学を統合した予測手法の確立が強く求められていた。

### 3. ポイント

空間群や密度などの結晶学的パラメータを機械学習で事前推定し、探索空間を大幅に削減することで、80%の高い結晶構造予測成功率を達成した。さらに準調和近似を導入し、複数多形間のギブズ自由エネルギー交差を捉えることで、構造相転移を定性的に再現した点が特徴である（下図）。

### 4. 今後の展開

今後は、対象分子の多様化や異方的熱膨張を考慮した自由エネルギー評価への拡張、ならびに実験データとの体系的比較を進める。これにより、有機半導体や医薬品結晶など、機能的有機固体における相安定性・相転移設計への応用が期待される。



#### 【問い合わせ先】

〒169-8050 東京都新宿区西早稲田 1-6-1

早稲田大学データ科学センター

谷口卓也 (TANIGUCHI, Takuya) takuya.taniguchi@aoni.waseda.jp

## 単結晶中で進行する新しいキラル対称性の破れ現象の発見

講演番号 E1132-2pm-06 「キラル対称性の破れを伴う単結晶－単結晶構造転移と円偏光発光特性」

(大阪大学大学院基礎工学研究科、大阪公立大学大学院理学研究科)

桶谷 龍成・岡田 武蔵・池田 紗希・柚山 健一・中嶋 琢也・久木 一郎

### 【研究の概要】

我々の研究グループでは、有機分子であるフェノチアジン誘導体の結晶において、右手型と左手型の分子が混在するアキラル結晶を加熱すると、分子が結晶の中でキラリティを揃えながら、キラル結晶へと変化する現象を発見しました(図1)。この現象は溶液を一切必要とせず、たった一つの結晶の中だけで完結する、新しいキラル対称性の破れ現象です。さらに、種結晶を用いることで右手型・左手型のどちらに変化するかを制御することにも成功しました。

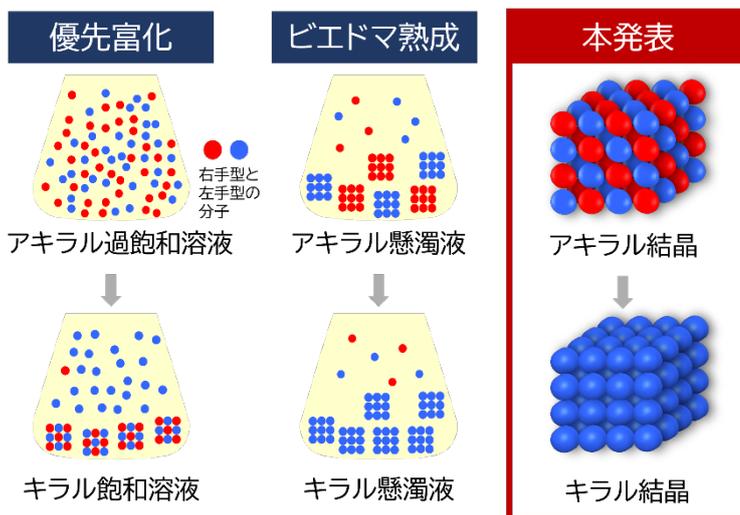


図1. これまでの自発的キラル対称性の破れをとまなう結晶化現象と、我々が発見した新しい現象。

### 【研究の背景】

私たちの体を構成するアミノ酸は、右手型と左手型が存在しうるにもかかわらず、生体内にはほぼ左手型しか見られません。なぜ片方だけに偏っているのかは生命のホモキラリティの謎として長年の未解決問題です。これまでに、結晶化に関わるキラル対称性の破れ現象は、優先富化とビエドマ熟成の2種類しか知られていませんでした(図1)。しかし、いずれも溶液中で起こる複雑な現象であり、大量の溶媒分子が絡むため、なぜどのように対称性が破れるのかを分子レベルで解明することは困難でした。

### 【ポイント】

本研究の最大の特徴は、溶媒を使わず結晶中だけで対称性の破れが完結する点です。従来の2つの現象は固体と液体が混在する複雑な系でしたが、今回の現象は単一成分の結晶内で進行するため、きわめてシンプルなモデル系となります。結晶であるためX線回折法で分子レベルで現象を可視化でき、対称性の破れの原理解明に大きく貢献できます。また、構造転移後のキラル結晶は円偏光発光(CPL)を示し、加熱をきっかけにCPL発光を発現するターンオン型CPL材料としての応用も期待されます。

### 【今後の見通し】

今回発見したシンプルなモデル系を活用し、キラル対称性の破れがなぜ起こるのか、その原理の理論的・実験的な解明を進めます。分キラル分子は医薬品や先端材料の中核であり、本研究の知見はキラル化合物を効率的に得る新しい手法の基盤技術としても期待されます。

【問い合わせ先】〒560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3 大阪大学大学院基礎工学研究科 物質創成専攻

桶谷龍成 (Oketani Ryusei)

r.oketani.es@osaka-u.ac.jp

06-6850-6227

久木一郎 (Hisaki Ichiro)

i.hisaki.es@osaka-u.ac.jp

06-6850-6225

日本化学第 106 春期年会ハイライト (講演番号 F1231-2pm-05)

## ケイ素 FLP 触媒で医薬品と高分子をやさしく重水素化

「ケイ素 FLP 触媒を用いたアミド・エステルの触媒的  $\alpha$ -重水素化反応の開発」  
 (九大院薬・産総研 IRC3・名工大院工・九大高等研) ○古賀 祐之介・福元 良空・  
 舛井 顕丞・田中 津久志・永縄 友規・林 幹大・大嶋 孝志・矢崎 亮

### 1. 研究の概要

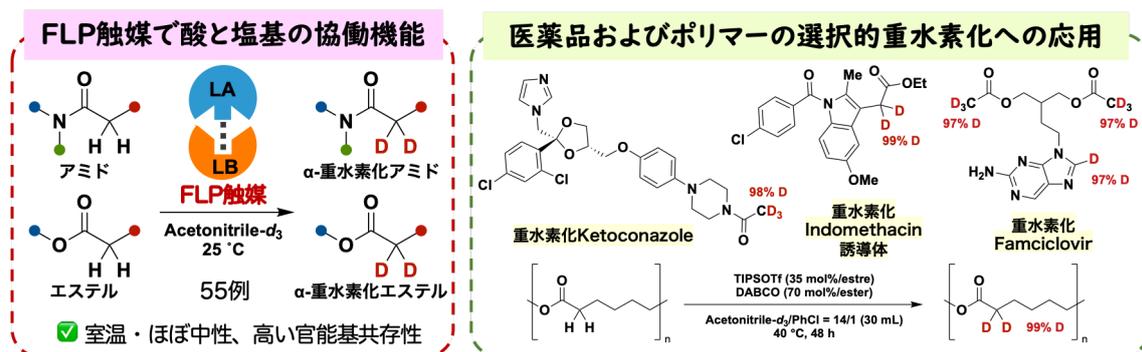
**重水素 (D)** は水素の安定同位体であり、化学的性質はほぼ同じであるが、**わずかに重い**という特徴を持つ。この「わずかな違い」が**医薬品の作用持続や高分子材料の物性制御**に活用されている。しかし、医薬品や高分子材料に広く含まれるアミドやエステルの特定位置に、穏やかな条件で直接重水素を導入する方法は確立されていなかった。本研究では、ケイ素化合物と有機塩基を組み合わせた新しい触媒を開発し、室温・ほぼ中性条件下でアミドおよびエステルを高効率に重水素化することに成功した。**本手法は複雑な医薬品分子やポリエステルなどの高分子にも直接適用可能**である。

### 2. 研究の背景

従来の重水素化反応は、強い塩基や高温条件を必要とすることが多く、分子の分解や副反応が問題であった。特にアミドやエステルは反応性が低く、選択的に重水素を導入することは困難とされてきた。高分子では主鎖切断の懸念もあり、「**分子を壊さずに、穏やかな条件で、狙った位置のみを選択的に重水素化する**」技術の確立が長年の課題であった。

### 3. 本研究のポイント

本研究の鍵は、**ケイ素 Lewis 酸 (TIPSOTf) と有機塩基 (DABCO) をフラストレーテッド・ルイスペア (FLP) として機能させた点**にある。通常、酸と塩基を混ぜると安定な塩を生成し失活してしまうが、**両者を適度な距離に保ちながら協働させる**ことで、高い反応性と高い選択性を実現した。本触媒反応は幅広い基質に適用可能で最大 99% の重水素導入率を達成した。また、複雑な医薬品分子の最終段階で性質を改良する**合成後期修飾**にも適用可能であり、さらに、ポリエステルを主鎖切断なしで直接重水素化することにも成功した。



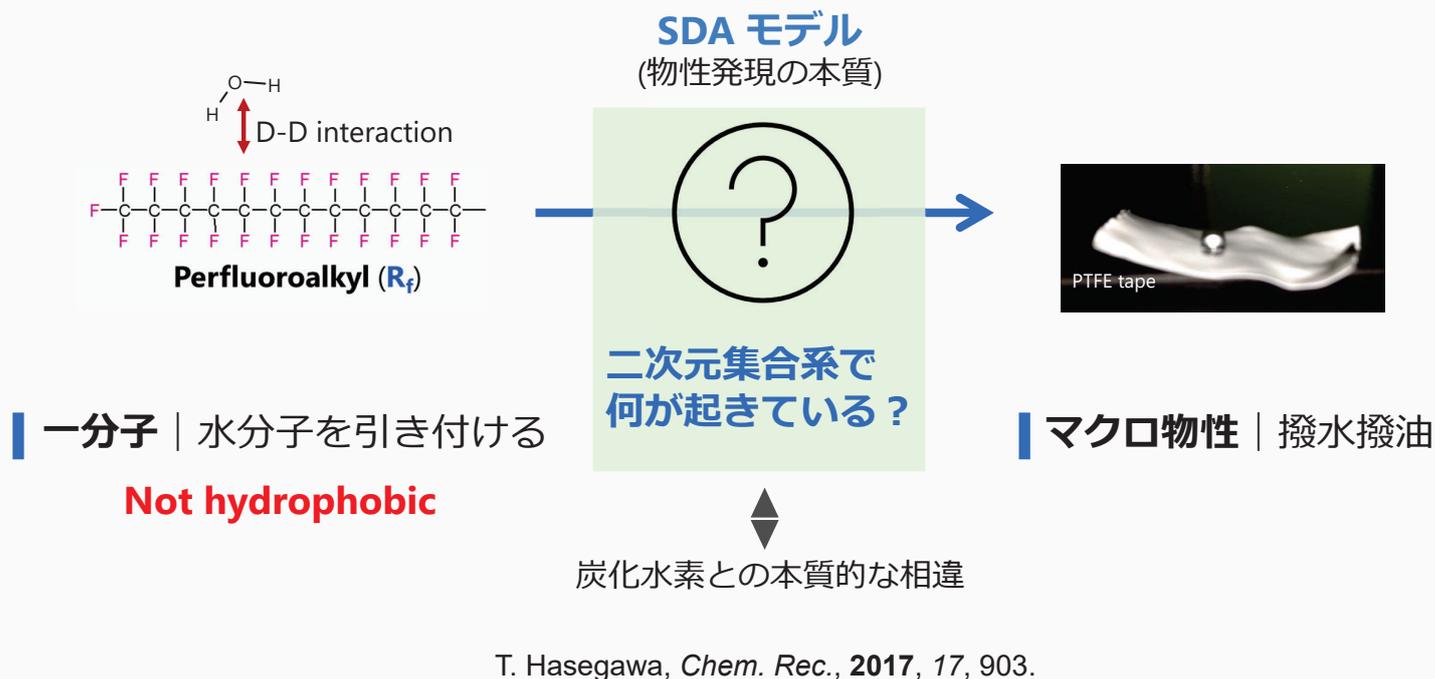
### 4. 今後の展開

本手法は、**重水素医薬品の開発や代謝安定性向上戦略への応用**が期待される。また、**高分子材料の精密改質**や、将来的な同位体標識技術への展開も視野に入る。創薬科学と材料化学を横断する基盤技術として、大きな波及効果が期待される成果である。

【問い合わせ先】 〒812-8582 福岡県福岡市東区馬出 3-1-1 九州大学大学院薬学研究院  
 大嶋 孝志 (OHSHIMA, Takashi) ohshima@phar.kyushu-u.ac.jp 092-642-6650  
 矢崎 亮 (YAZAKI, Ryo) yazaki@@har.kyushu-u.ac.jp 092-642-6669

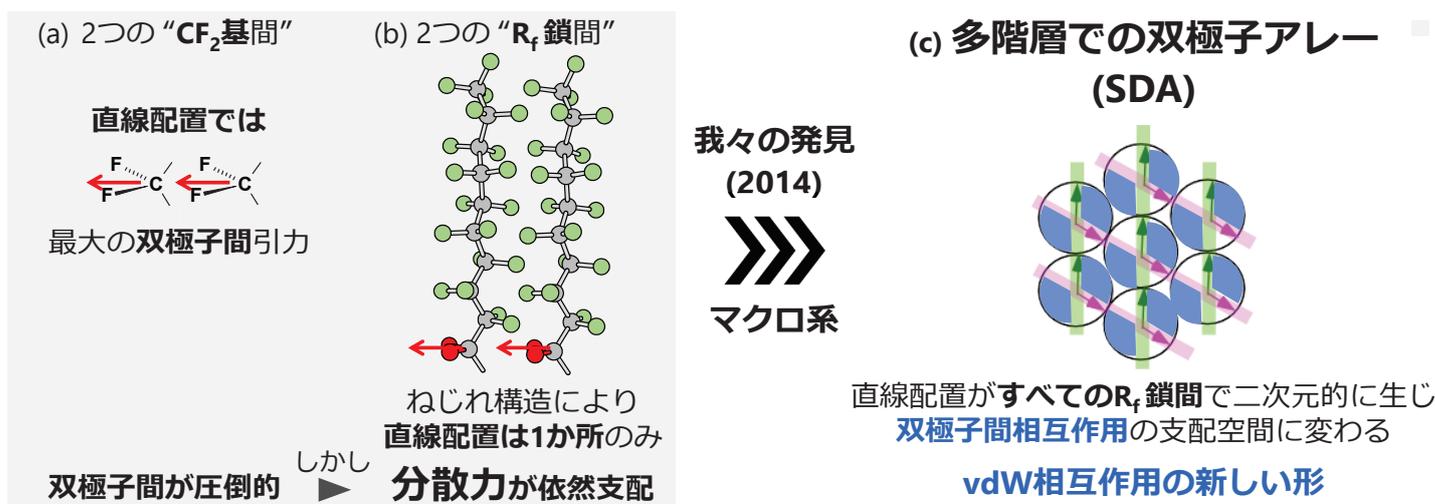


# SDAモデル | 長年の謎を統一的に説明



3

## 単一分子をバルク物質と結びつけるには？



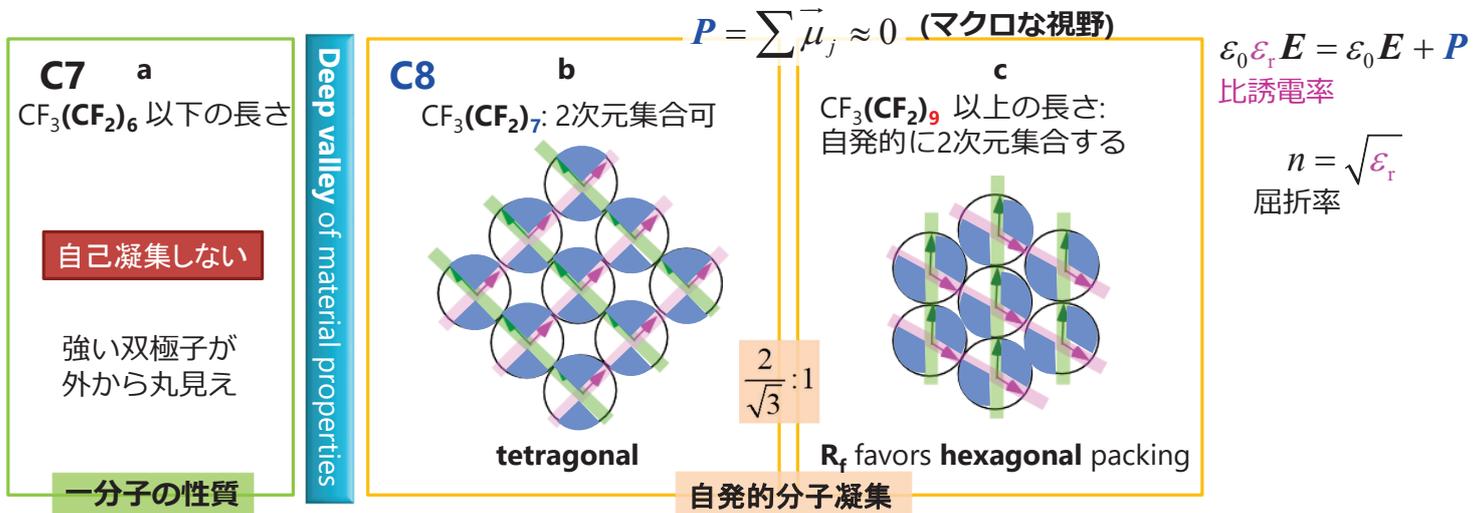
従来の見方 |  $R_f$ 鎖は炭化水素と大差なし！？

$R_f$ 鎖で発見された新原理 ▶ リサイクルにも適用可

4

## 双極子アレー | Stratified Dipole-Arrays (SDA) Model

マクロな視野で見ると,  $\mu$  が小さく見える ▶ 配向効果: 小さい  
 分子分極率  $\alpha$  はもともと小さい ▶ 分散効果: 小さい ▶ 撥水撥油  
 低誘電率

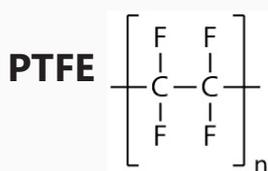


T. Hasegawa et al. *ChemPlusChem* **79**, 1421 (2014).

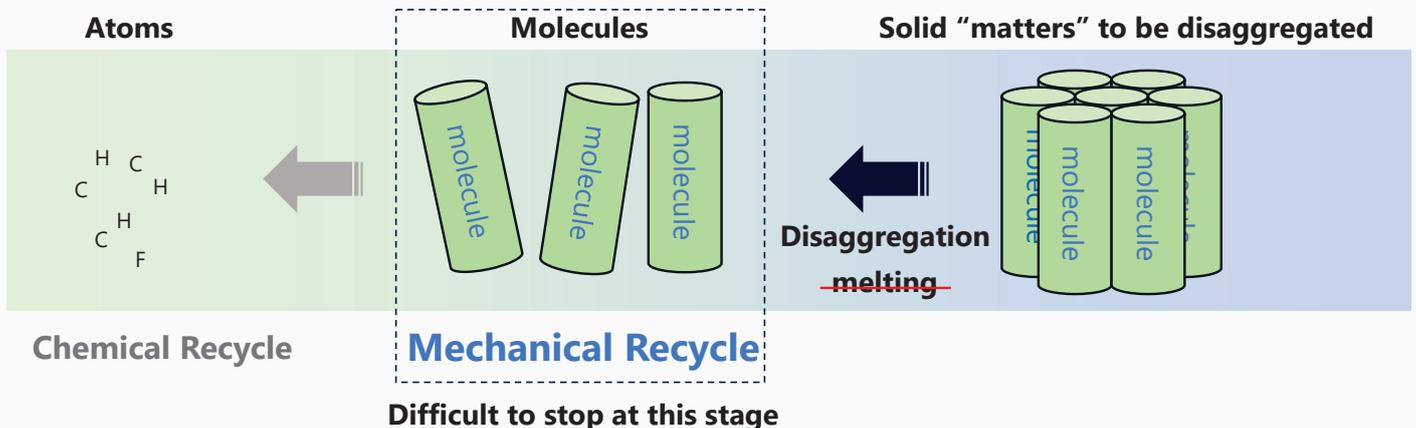
T. Hasegawa *Chem. Rec.* **10**, 903 (2017).

5

**Reversal process** is extremely difficult for PTFE



**Molecular aggregation blocks recycling**



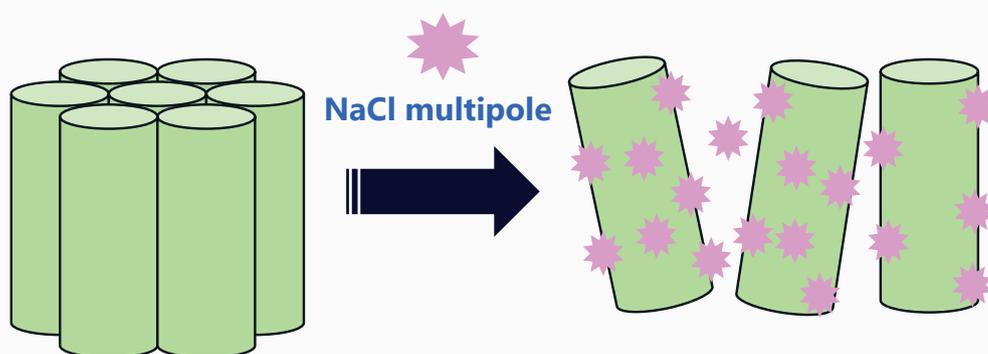
*J. Phys. Chem. B*, **2025**, 129, 4249.

6

## Our idea | Use of "solid solvent"

Use of **NaCl (solid)** instead of using fluoruous liquid solvent

- $\text{Na}^+\text{Cl}^-$  can be recognized to be a **dipole** → **solid solvent**
- For real, **multipoles** would work for the solvation purpose



7

## Experimental

### Samples

- 1) **PTFE**  
Commercial PTFE powder (AGC)
- 2) **Sample crush**  
Planetary ball-mill

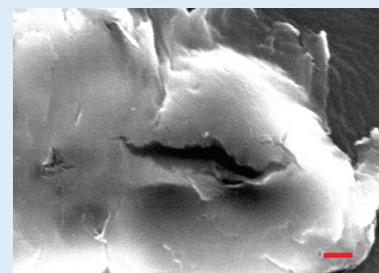
Planetary ball mill  
700 rpm, 8 h

NaCl additive  
(molar ratio)  
 $\text{CF}_2 : \text{NaCl} = 1:1$

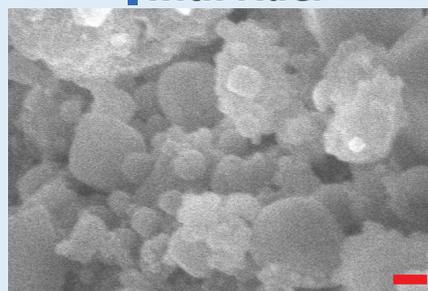


### SEM images after crush

without NaCl

10  $\mu\text{m}$ 

with NaCl

10  $\mu\text{m}$ 

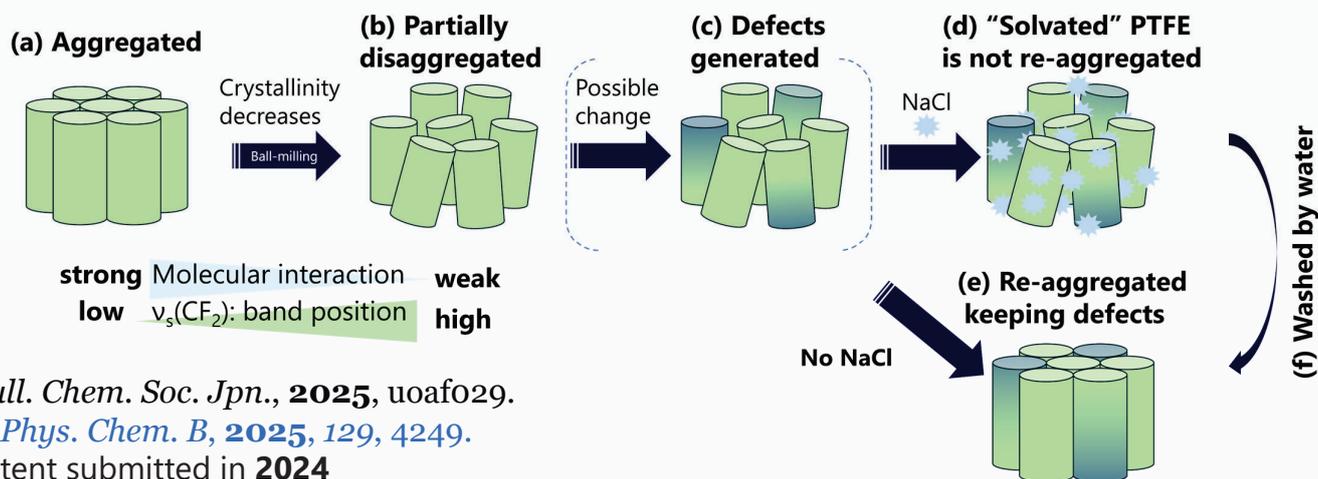
8

## Summary: Mechanical recycling of PTFE has first been realized on SDA model

#1: Crushed to be fine particles

#2: Disaggregation in individual particles

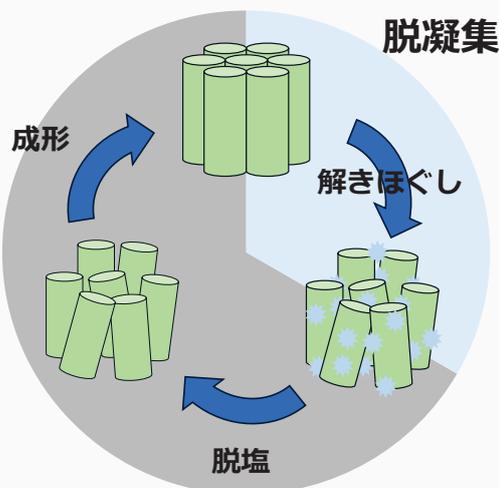
#3: Conformational defects are generated



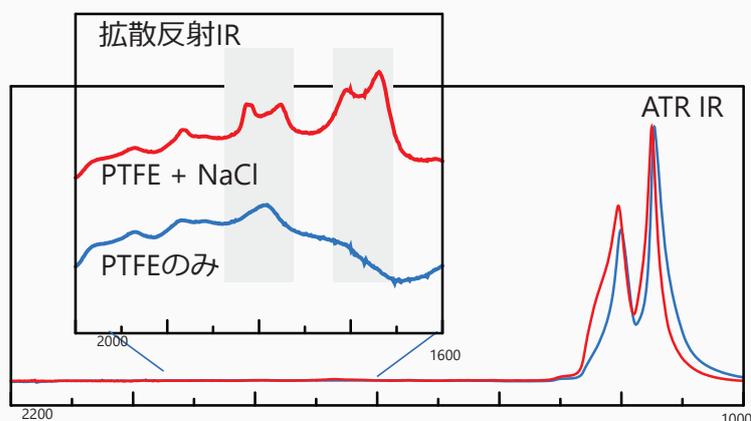
9

## 本発表 | NaClを助剤にすると想定外の反応が見られる

リサイクル一周を目指す



PTFEとNaClがわずかに反応する？



- 塩処理メカニズムの解明
- 添加剤の種類・量の最適化

日本化学会第 106 春季年会ハイライト

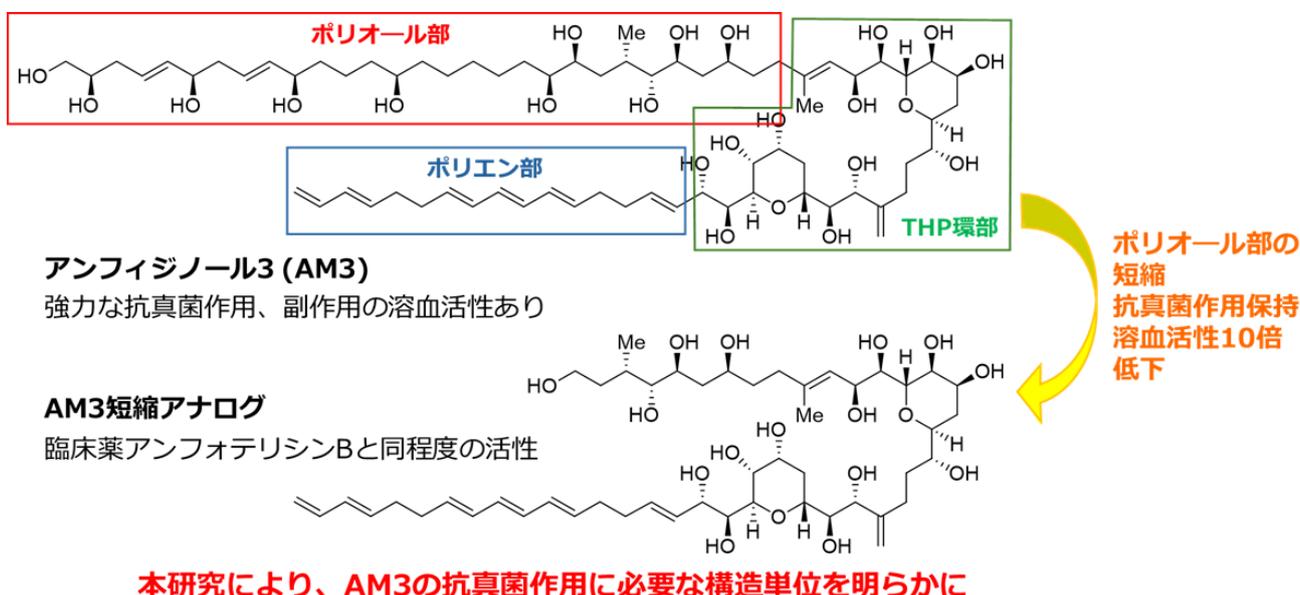
**アンフィジノール 3 の抗真菌作用発現部位を解明：新しい抗真菌薬の創製を目指して**

講演番号 H932-2vn 「アンフィジノール 3 の短縮人工アナログの合成と構造活性相関研究」

(九大院理・阪公大院理) 保野 陽子・若宮 佑真・三田 祐輔・山下 祐輝・松森 信明・大石 徹

## 1. 研究の概要

アンフィジノール 3 (AM3)は渦鞭毛藻の一種から見出された海洋天然物であり、強力な抗真菌作用を示す。AM3 はポリオール部、THP 環部、ポリエン部の 3 パーツから構成される。今回、AM3 よりポリオール部が短いアナログ (短縮アナログ) が、AM3 に匹敵する抗真菌作用を示すことを見出した。さらに THP 環部やポリエン部の構造を変えてみたところ、その効力は大きく低下し、短縮アナログの構造が抗真菌作用を示す最小単位であることを明らかにした。本研究成果は、これまでにない新しい抗真菌薬の創製に繋がるものであると期待される。



## 2. ポイント・今後の展開

現代でも感染症は人類にとって大きな脅威である。しかし真菌はヒトと同じ真核生物であるために選択的に効果を発揮できる薬物が少なく、抗真菌薬の開発は遅れている。さらに耐性菌の出現は社会問題となっており、より効果的な抗真菌剤の開発が求められている。AM3 は強力な抗菌作用を示すものの、非常に複雑な構造を持つ。また副作用として溶血活性 (赤血球破壊作用) を示す。そのため AM3 の抗真菌作用の発現に重要な構造を明らかにすることは、新しい薬剤開発において重要な課題であった。当研究グループは世界で唯一 AM3 の化学合成を達成しており、その合成法を駆使して人工分子を合成し、抗真菌作用を調査した。これにより、ポリオール部の長さを 2/3 縮めても抗菌活性は保持される一方で、溶血活性は 10 倍程度低下した。これらの活性は抗真菌薬として臨床的に用いられているアンフォテリシン B と同等である。さらに THP 環部やポリエン部の構造を変化させると活性が大きく低下することを明らかにした。これらの結果は耐性菌が出現しにくい次世代の抗真菌薬の開発を行う上で重要な知見である。

(問合せ先) 〒819-0395 福岡市西区元岡 744 九州大学大学院理学研究院 化学専攻

大石 徹 (おおいし とおる) oishi.tohru.708@m.kyushu-u.ac.jp

保野 陽子 (やすの ようこ) yasuno@omu.ac.jp (現所属：大阪公立大学大学院理学研究科)

日本化学会第 106 春季年会ハイライト

講演番号 E1133-3am-04

## 電気のかで核酸合成：電気化学とフロー法による核酸医薬品合成を目指す

電解酸化とフローマイクロリアクターの集積によるリボース型オキソニウムカチオンの発生と反応

(北大院理) ○工藤拓満・芦刈洋祐・足立萌衣・宅見正浩・永木愛一郎

### 1. 研究の概要

核酸は生物の遺伝情報を担う分子群であるため、その化学変換により得られる核酸類縁体は、従来の低分子医薬品とは異なるメカニズムにより、治療が難しかった遺伝性疾患やがんに対する新たな治療手段として期待されている。特に有機合成化学的に、リボースなどの五炭糖に対し多様な有機分子を結合させることで様々な核酸型の分子を創生可能である。今回我々は、**電気化学とフローマイクロ化学の融合により、リボース型オキソニウムカチオンという極めて不安定な化学種の発生とその反応を達成した**。これは次世代創薬分子の探索に繋がる成果である。

### 2. 背景

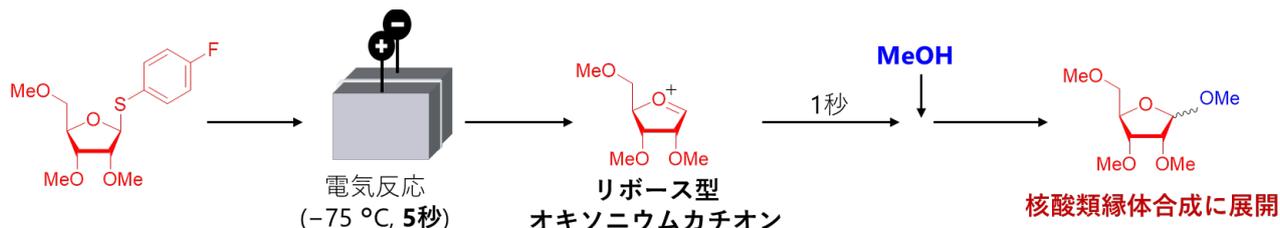
リボースの活性化によるグリコシル化など様々な核酸様分子の合成が知られており、リボース型オキソニウムカチオンを経由する求核的なグリコシル化が達成されている。我々は、より多様な核酸類縁体を合成するため、この中間体の性質解明を目的として研究に着手した。しかし、グルコースなど六炭糖由来のオキソニウムカチオンの発生および合成利用に適用されている電気化学的手法を用いてリボース型オキソニウムカチオンの発生を試みたが、本中間体が極めて不安定であることがわかったのみであった。

### 3. ポイント

**精密な化学反応が可能なフローマイクロ合成技術**を用いた。原料のリボースに対しフローマイクロリアクター中、 $-75\text{ }^{\circ}\text{C}$ で5秒間の通電によりオキソニウムカチオンを発生させ、その1秒後に求核剤と反応させることにより、目的の生成物を得ることができた。少しでも長い時間では収率が低下したことから、本中間体は秒スケールの時間で分解する極めて不安定な化学種だとわかった。すなわち**電気化学とフローマイクロ化学の融合**がこの合成に不可欠であると考えられる。

### 4. 今後の展開

今回新たに開発した合成手法を用いれば、従来技術では合成できなかった核酸類縁体のライブラリー合成が可能となる。不安定かつ高反応性な化学種を用いることから反応は数秒で完結し、高速な合成が可能である。難病の新規治療手段の早期確立および社会提供の基盤技術となることが期待される。



【問い合わせ先】 ☎060-0810 北海道札幌市北区北10条西8丁目 北海道大学大学院理学研究院  
芦刈洋祐 (ashikari@sci.hokudai.ac.jp)、永木愛一郎 (nagaki@sci.hokudai.ac.jp)

## 日本化学会第 106 春季年会ハイライト

## 高校化学とノーベル化学賞を接続する

分子シャトルを題材とした  $^1\text{H}$  NMR スペクトル導入教材の開発

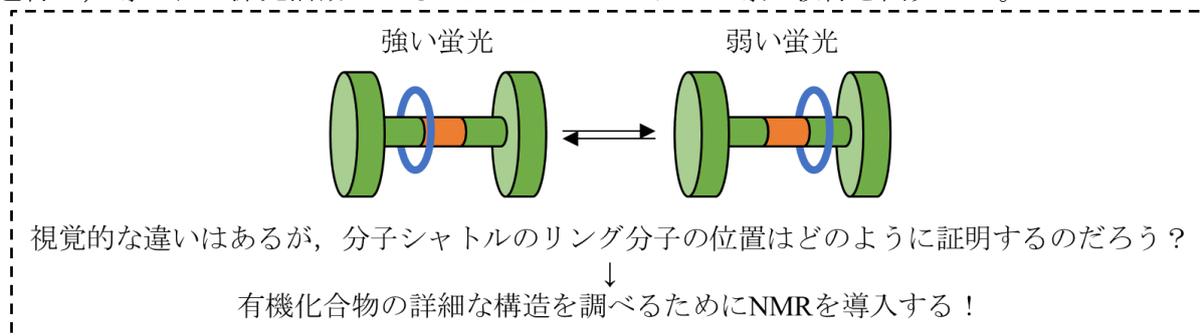
講演番号 C002463 「分子シャトルの分析を活用した探究型実験教材の開発」

(東邦大院理<sup>1</sup>・東邦大薬<sup>2</sup>・岐阜聖徳学園大学<sup>3</sup>)○加藤木 智哉<sup>1</sup>・吉川 晶子<sup>2</sup>・東屋 功<sup>2</sup>・今井 泉<sup>3</sup>

## 【研究の概要】

2021年に日本化学会は日本の高校生に必要な化学リテラシーに関して、制約のない理想的な教育課程を提言した。化学教育カリキュラムでは、高校化学の学習を行う前に化学の有用性を題材に「安全や製品の質を守る機器による分析」を扱っている。有機化合物の構造式は、従来、化学反応性に基づいて、官能基などの部分構造の特定を行うことにより、推定・決定されてきた。しかし、現在ではそのような古典的な方法はほとんど用いられず、核磁気共鳴 (Nuclear Magnetic Resonance: NMR) を利用した測定によって、分子構造を決定している。強力な磁場の下で、試料に照射する電磁場の周波数を変えていくと、特定の周波数において吸収に対応する水素原子  $^1\text{H}$  の信号が見られる。この周波数と信号強度の関係を表したものを  $^1\text{H}$  NMR スペクトルと呼ぶ。

我々は、高校化学の学習内容と化学の分野内で最も重要な発見あるいは改良を成し遂げた化学研究 (ノーベル化学賞) との関連性を体感できる教材を開発することで、高校生に化学を学ぶ魅力や意義を示すことができると考えた。2016年にノーベル化学賞を受賞した分子マシンの1つである分子シャトルは、軸分子とリング分子で構成され、リング分子が軸分子の2つ以上の部位に移動することができる。本研究では、酸と塩基に応答する蛍光分子シャトルのリング分子の動きを題材に、導かれた探究活動による  $^1\text{H}$  NMR スペクトルの導入教材を開発した。



## 【ポイント】

開発した教材は高校化学の学習内容とノーベル化学賞の研究過程とのつながりを高校生が自ら体感することができる。この教材によって、日本の高校生の科学技術の学習・活用に対しての自己効力感を高め、中等教育における理科の「学力と意識の乖離」を解決できると考える。

## 【今後の展開】

今後は、開発した分子シャトルの蛍光強度の違いがより明確に現れる溶媒の検討を予定している。また、このようなノーベル化学賞を題材とする高大接続を意識した教材の開発へと拡大していきたい。

問い合わせ先 〒274-8510 千葉県船橋市三山 2-2-1 東邦大学大学院 理学研究科 化学専攻

加藤木 智哉 (Tomoya Katogi) 6124004k@st.toho-u.ac.jp

吉川 晶子 (Shoko Kikkawa) s\_kikkawa@phar.toho-u.ac.jp

東屋 功 (Isao Azumaya) isao.azumaya@phar.toho-u.ac.jp

今井 泉 (Izumi Imai) izuimai@gifu.shotoku.ac.jp

日本化学会第 106 春季年会ハイライト

**ペンタセン  $\pi$  クラスタの創出に成功：未踏の  $\pi$  空間の機能解明に迫る**講演番号 E1122-3pm-04 「2つのペンタセンを有する  $\pi$  クラスタの合成と機能解明」(阪大院理<sup>1</sup>・阪大 ICS-OTRI<sup>2</sup>・阪大 SRN-OTRI<sup>3</sup>) ○榎原優太<sup>1</sup>・西内智彦<sup>1,2</sup>・久保孝史<sup>1,2,3</sup>

## 【研究の概要】

我々はこれまでに複数の芳香環を密に集積させた数々の「 $\pi$  クラスタ分子」を構築し、集積化によってはじめて観測される芳香環単体の時にはみられない独特の物性の発現とその解明について研究を行ってきた。例えば、二つのアントラセンを密接させた  $\pi$  クラスタ分子では、室温エキシマー発光、光や熱による可逆な異性化挙動を見出している。本研究では、より広い  $\pi$  平面を有するペンタセンを密接させた  $\pi$  クラスタ分子の創出に成功した。X線結晶構造解析により、ペンタセン間の最近接距離が 2.96 Å と極めて短いことを明らかにした。そして、アントラセンの系とは異なりエキシマー発光が観測されず、励起状態における緩和過程に大きな違いがあることが示唆された。本研究における高次アセンを密接化させる合成手法の確立により、新たな光機能分子や刺激応答分子の開発などへの波及が期待される。

## 【背景】

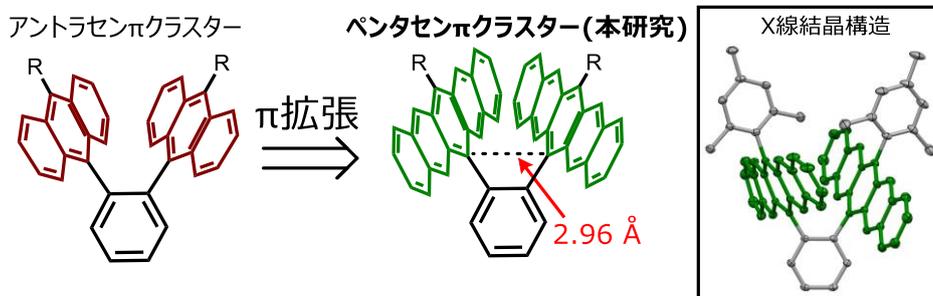
ペンタセンは有機半導体材料として注目されており、これまでに分子内に複数のペンタセンユニットを有する分子が数多く報告されてきた。その一方で、ペンタセン同士を高度に密接・集積させた分子については、ペンタセン自体が有する高い反応性や難溶性といった合成上の困難さから報告例が極めて限られている。そのためペンタセン同士の密接化がその物性に与える影響はほとんど検証されていない。

## 【ポイント】

ベンゼンを足場としてその隣接位に二つのペンタセン骨格を導入することで、 $\pi$ - $\pi$  相互作用を精密に制御した  $\pi$  クラスタ分子を構築した。反応性の高いペンタセン骨格に対して**安定な前駆体を用いた段階的合成戦略により、これまで未踏であったペンタセンの  $\pi$  クラスタ分子の構築を実現した**。結晶構造解析により高度に密接した構造を明らかにし、光物性測定から低次アセン骨格の系とは異なる励起状態挙動を明らかにした。

## 【今後の展開】

本研究で確立した合成手法を用いることにより、二つのペンタセン骨格をより密接させた**シクロファン型分子の創出を目指す**。距離と配向を精密制御したペンタセノファンにより、高次アセン間の独特な密接空間に生じる興味深い物性の解明を目指す。



【問い合わせ先】 〒560-0043 大阪府豊中市待兼山町 1-1 大阪大学大学院理学研究科化学専攻  
西内 智彦 (Tomohiko Nishiuchi) nishiuchit13@chem.sci.osaka-u.ac.jp 06-6850-5386

## 「実験」と「計算」の融合で新反応を開発！

### ～計算化学に基づく効率的な配位子選択でパラジウム触媒の新規反応を実現～

「計算化学的アプローチによる光励起パラジウム触媒の配位子設計：アルキルケトン由来ケチルラジカルの効率的生成」

田中 耕作三世<sup>1,2,3</sup>、山田 蓮<sup>4</sup>、Debbarma Suvankar<sup>2,3</sup>、神名 航<sup>4</sup>、林 裕樹<sup>2,3</sup>、松岡 和<sup>2,3</sup>、前田 理<sup>2,3,4</sup>、美多 剛<sup>2,3</sup>

(1. 乙卯研究所、2. 北大 WPI-ICReDD、3. JST-ERATO、4. 北大院理)

## 1. 研究の概要

我々の研究グループは、量子化学計算と実験検証を融合し、これまで困難とされてきた「アルキルケトン」の一電子還元反応を基盤とする新反応の開発に成功した。鍵となったのは、膨大な候補の中から最適な配位子をコンピュータ上で予測する手法「バーチャル配位子アシストスクリーニング (VLAS) 法」である。従来は実験的な試行錯誤に頼っていた触媒開発を、計算による論理的なプロセスへと転換することで、環境負荷を最小限に抑えた効率的な合成を実現した。

## 2. 背景と課題

アルキルケトンから生じる「ケチルラジカル」は、医薬品や天然物の合成に有用な重要中間体である。しかしアルキルケトンは反応性が低く、穏やかな条件でのケチルラジカル生成は困難だった。我々は光を照射することで強い還元力を発揮する光励起パラジウム触媒に着目し、反応性の低いアルキルケトンからもケチルラジカルを生成できると考えた。

①「見えない壁」逆電子移動 (BET) の存在 しかし、期待した反応が進行しなかった。その原因は、逆電子移動 (BET) にあった。BET とは反応の途中で生じた電子が触媒へ戻ってしまい、反応が元の状態に戻る現象である。反応は進みかけても最終的に出発物質へ戻るため、見かけ上は何も起きていないように見えるため、解析が困難だった。

② 膨大な探索空間 BET を抑えるには、配位子によって触媒の性質を調整する必要がある。しかし配位子の候補は多く各種配位子を用いた計算探索にも時間がかかる。実験では試行錯誤を重ねる必要があり、そのたびに試薬や溶媒を消費するため、廃棄物が発生するという問題があった。

## 3. 本研究のポイント

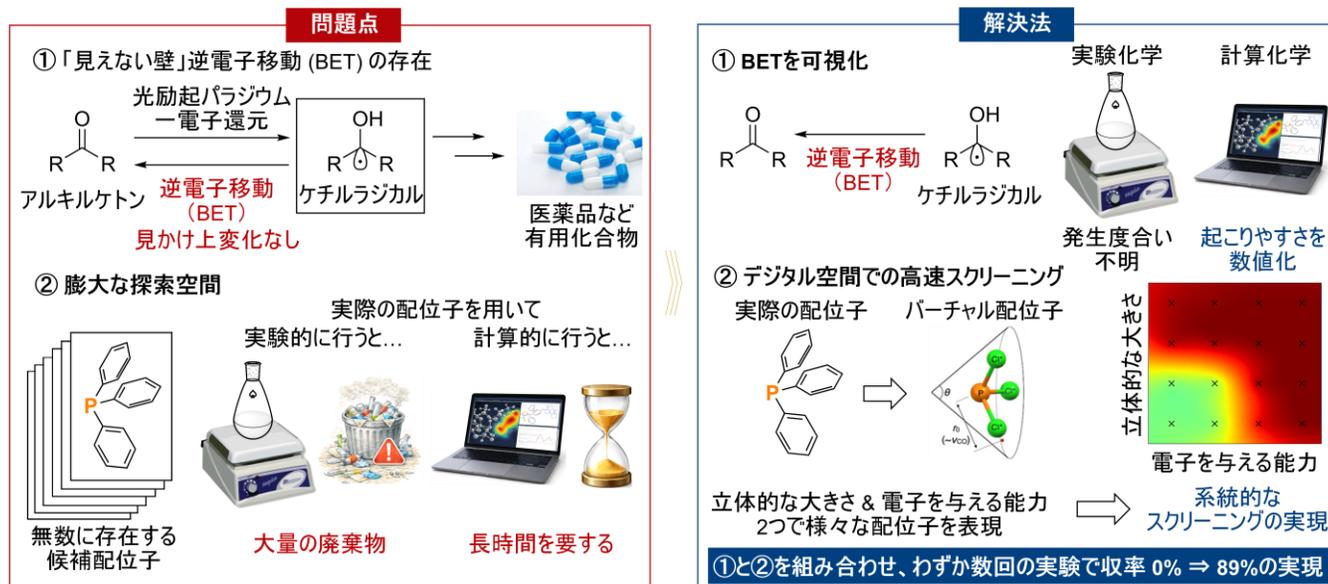
① BET を可視化 実験では見かけ上変化がなく、BET の発生度合いを検証することは困難である。そこで計算化学によりこの現象を可視化し、BET の起こりやすさを数値化することで反応の成否を事前に予測する新たな指標を確立した。

② デジタル空間での高速スクリーニング 金属触媒の性質に大きく影響する配位子の特性として、電子を与える能力と立体的な大きさを指標とし、これらをコンピュータ上で系統的に評価するスクリーニング (VLAS 法) を行った。結果をヒートマップとして可視化することで、BET を抑制できる配位子の特性領域を特定した。

その予測に基づいて実験を行ったところ、わずか数回の検討で最適な配位子を同定できた。従来一般的な配位子では進行しなかった反応が、最適化された配位子では最大 89% の高収率で進行することを実証した。

## 4. 今後の展開と社会的意義

本成果は経験則に頼っていた配位子の選択を、計算科学に基づく「合理的デザイン」へと変革するものである。今後は、様々な反応へと範囲を広げるとともに、廃棄物を最小限に抑えた「環境調和型」な次世代化学の加速に貢献する。



【問い合わせ先】北海道大学 総合イノベーション創発機構 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD)

特任助教：田中 耕作三世 (Kosaku Tanaka, III)

Email: k3tanaka@icredd.hokudai.ac.jp

TEL: 011-706-9654

## 銀担持酸化チタンで「永遠の化学物質」PFAS を分解：UV-LED で脱フッ素化を実現

講演番号：E1123-4am-06 「銀担持酸化チタンを用いたパーフルオロアルキル化合物の触媒的分解」

○豊田 悠斗<sup>1</sup>、Rahat Javid<sup>2</sup>、Jochen Lauterbach<sup>2</sup>、小林 洋一<sup>1,3</sup>

(1. 立命館大生命科、2. サウスカロライナ大工・計算、3. JST さきがけ)

## 1. 研究の概要

パーフルオロアルキル化合物 (PFAS) は、耐熱・耐薬品性に極めて優れており、工業製品などに幅広く使われてきた。一方、自然環境中ではほとんど分解されず蓄積しやすいことから、近年大きな課題となっている。本研究では、銀ナノ結晶を担持した酸化チタン ( $\text{Ag}/\text{TiO}_2$ ) を光触媒として用い、365 nm の LED 光を照射することにより、代表的な PFAS であるペルフルオロオクタンスルホン酸 (PFOS) をフッ化物イオンにまで分解できることを示した。

## 2. 背景

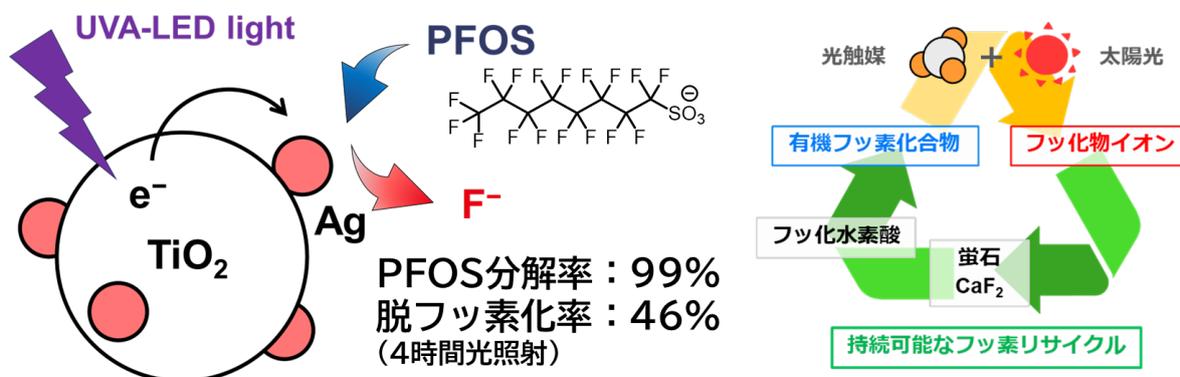
PFAS は耐熱性、耐薬品性、撥水・撥油性などの優れた性質により、さまざまな産業用途で利用されている。しかし、PFAS の強固な炭素-フッ素 (C-F) 結合は極めて切れにくく、環境中で分解されにくいいため、残留性・生体蓄積性が問題になっている。これまで当研究グループは、硫化カドミウムナノ結晶と可視光で PFAS 分解ができることを報告している。一方で、カドミウムの毒性や強い光が必要といった課題がある。そこで本研究では、より環境負荷の小さい材料として  $\text{Ag}/\text{TiO}_2$  に着目した。

## 3. ポイント

$\text{Ag}/\text{TiO}_2$  を光触媒として用い、365 nm の LED 光を 4 時間照射すると 99% の PFOS が分解した。さらに、フッ化物イオンの生成を確認し、PFOS が持つ 17 本の C-F 結合のうち約 46% が切断されたことを示した。さらに、銀と酸化チタンを組み合わせることで電子移動と電荷分離が促進され、還元的な経路で反応が進行することを示した。

## 4. 今後の展開

$\text{Ag}/\text{TiO}_2$  によって PFAS が分解される反応原理をより詳細に解明する。また、その知見を基に高い分解性能を保ちつつ可視光に応答する触媒の開発を進める。さらに、実社会での利用を見据え、反応系や運用条件の設計に取り組む。



【問い合わせ先】〒525-8577 滋賀県草津市野路東1丁目 1-1 バイオリンク B805

小林 洋一 (KOBAYASHI Yoichi) [ykobayas@fc.ritsumei.ac.jp](mailto:ykobayas@fc.ritsumei.ac.jp)

日本化学会第 106 春季年会ハイライト

## 細胞内で人工オルガネラを設計構築

講演番号 H937-4am-07 「細胞内超分子化学：人工オルガネラの構築」

(東大院工<sup>1</sup>・東大院医<sup>2</sup>・理研 CEMS<sup>3</sup>)Qinxuan Yang<sup>1</sup>・齊藤 知恵子<sup>2</sup>・相田 卓三<sup>1,3</sup>・三木 卓幸<sup>1</sup>

生命の基本単位である細胞には、脂質膜で覆われたオルガネラや非膜オルガネラといった区画構造が存在し、それぞれが特有の分子環境を形成することで多様な細胞機能を支えている。これらの区画を細胞内で **bottom-up** 的に人工構築することができれば、新たな細胞工学ツールの創出につながると期待される。筆者らは、タンパク質およびペプチドからなる超分子アセンブリに着目して研究を進めてきた。これらの超分子システムは、これまで主にスマートバイオマテリアルとして *in vitro* で開発されてきたが、筆者らはそれらを生細胞内に構築し、細胞本来の機能と協調して動作する人工アセンブリを実現することを目指してきた。

本発表では、最近得られた二つの研究成果について紹介する。

一つ目のテーマは、非膜オルガネラを形成する *de novo* 設計ペプチドタグに関する研究である。液-液相分離によって形成される液滴は、細胞内において極めて多様な分子イベントに関与している。筆者らは、こうした液滴を **bottom-up** アプローチにより人工的に細胞内で構築できないかと考えた。多くの液滴形成タンパク質が可逆的なアミロイド様構造を形成する点に着目し、同様の特徴を有する人工ペプチドを設計した。このペプチドは、疎水性のチロシン (Y) とカチオン性のリシン (K) を交互に配列した YK リピート配列であり、ATP (アデノシン三リン酸) などのポリアニオン存在下で可逆的に自己集合する。YK ペプチドを sfGFP (緑色蛍光タンパク質) に融合した YK-sfGFP を細胞内で発現させると、細胞内で液滴状構造が形成された。この YK ペプチド戦略は非常に単純な設計であるため、多成分からなる人工液滴を細胞内に容易に構築できる点に特徴がある。

二つ目のテーマは、哺乳類細胞内における人工的な脂質膜小胞 (ベシクル) の構築に関する研究である。これまでの研究は、前述のような液滴に代表される非膜オルガ

ネラの人工形成に主眼が置かれており、細胞内で人工的に脂質膜小胞を構築した例はほとんど報告されていなかった。筆者らは、脂質と結合し、細胞内で人工小胞の形成を誘起するペプチド-タンパク質融合体を偶然発見した。さらに、その形成機構を詳細に解析するとともに、膜タンパク質を小胞ヘリクルートすることで、人工オルガネラとして機能化できることを示した。

(1) T. Miki et al., “De novo designed YK peptides forming reversible amyloid for synthetic protein condensates in mammalian cells” *Nat. Commun.* **2024**, 15, 8503.

連絡先 : miki@macro.t.u-tokyo.ac.jp