

化学専攻

概要

私たちがふだん観察している自然現象には化学変化によるものが多くあります。複雑な生命現象も、もとをたどればいろいろな化学物質の反応や相互作用に帰着します。

化学は「物質の合成、構造、性質ならびに物質間の相互作用や相互変換を研究する学問」です。日頃私たちが目にする物質は、気体、液体、固体などいろいろな状態で存在します。これらの物質はまた、互いに混じり合う、水と油のように混じり合わない、反応して別の物質に変化する、さらには他の物質の変化を促すなど、多種多様な性質をもっています。目で見て実感できる物質の性質（その中には有用な特性や有害な特性も含まれます）の奥には、それよりはるかに小さいスケールでの物質の個性、すなわち原子や分子の性質があります。化学は巨視的スケールでの性質を微視的な観点から研究する学問であるとも言えます。

私たちは、衣食住、医薬、交通・通信手段その他あらゆる場面で化学を基礎とした生産物を日常的に活用しています。最近では、情報記録材料や超伝導物質など、新素材と呼ばれる機能性物質の果たす役割が非常に大きくなっています。これらの新素材も化学の基礎に基づき、作られています。また化学物質に係わる環境問題などの、大規模な経済社会活動がもつ負の側面の解決には化学者の参加が必要です。

このように、化学は人々がふだん考えている以上に身近なもので、自然科学ならびに人間社会の発展に大きく寄与しています。化学者の果たすべき役割は今後もますます増大するでしょう。化学は物質科学の中核をなす学問です。本化学専攻ではそのような化学の基礎となる以下のような研究と教育を行っています。

化学専攻の構成と分野

当化学専攻は昭和6年（1931年）大阪大学理学部創設とともに、はじめ化学科として、5研究室で発足しました。その後発展して現在では、無機化学分野 5 研究グループ、附属熱・エントロピー科学研究センターと総合学術博物館を含む物理化学分野 8 研究グループ（1 グループは学際化学講座に所属）、有機化学分野 5 研究グループ（1 グループは学際化学講座に所属）、

これらに加えて附属研究所に属する 8 研究グループ、放射線科学基盤機構に属する 4 研究グループ、フォアフロント研究センターに属する 2 研究グループ、併任・連携講座の 5 研究グループによって構成されています。その多彩な内容は化学の教育に必要な分野を網羅し、国際的な高い水準の研究を活発に展開しています。このような化学専攻から多くの文化勲章受章者（眞島利行、赤堀四郎、仁田 勇、花房秀三郎）や学士院賞受賞者（眞島利行、小竹無二雄、仁田 勇、赤堀四郎、千谷利三、久保田尚志、関集三、齊藤喜彦、菅 宏）を輩出しました。

【無機化学分野】

この分野では分析化学、無機化学、および放射化学の研究を行っています。分析化学グループでは、分子や微粒子の分離と検出法の研究を行っています。生体や環境中には様々な微粒子が分布し、界面反応が機能しています。そのような界面反応の特異性を明らかにするために、液液界面における単一分子や集合体の反応を研究し、レーザー光、電場、磁場を用いる新しい泳動分析法の開発を進めています。無機化学研究グループでは、金属イオンやn共役系中の様々な種類の角運動量を持つ電子が織りなす現象を研究しています。化学的手法に基づいて多種電子系の構築を行い、磁場印可・円偏光照射によって生じる新しい分子磁性現象とそれらの制御方法を探索しています。錯体化学研究グループでは単核から多核と多彩な構造をもつ新しい金属錯体を合成し、固体や溶液中における化学結合および立体構造と化学的性質との関係を明らかにすることを目指しています。さらに、錯体独特のキラル挙動や分子認識を研究しています。放射化学グループでは、重・超アクチノイド元素の合成とその化学的性質の研究や重イオン核反応や新規核現象の研究を行っています。また、放射性物質の医学利用などの応用研究も進めています。生物無機化学研究グループでは、生体系において重要な役割を演じる金属タンパク質や金属酵素の構造と機能の研究、およびそれらの金属活性部位のモデル金属錯体の構築、さらにモデル錯体とタンパク質金属中心との構造や性質の比較検討も行っています。

【物理化学分野】

この分野では物質の構造、性質、反応の実験的研究、そしてそれらの理論的解析を行っています。物性物理化学グループでは分子性電荷移動塩、金属錯体などを対象に新規物性の探索と、その電子レベルでの理解、さらに背後にある普遍的な概念の構築を目指した研究を行っています。熱、磁気・輸送現象測定など様々な測定手法を用いて分子の凝縮相としての特徴を追跡しています。表面化学グループでは、ナノサイズの装置内や、その表面で起こる反応を制御して新しい分子機能の探索をおこなっています。この研究では、走査型プローブ顕微鏡、電子分光法、半導体デバイス、特定測定装置など、様々な表面科学の手法を使っています。吸着化学グループでは、固体内部に形成されるマイクロな空間に閉じ込められた分子集団が示す特異な構造、相挙動、拡散現象などを、核磁気共鳴分光法をはじめとする分光学的手法を使って調べています。空間の大きさや形状と分子間に働く相互作用との関係を明らかにすることで、新しい機能をもった分子集合体の創製を目指します。物性や反応を量子力学の原理に基づいて研究する量子化学理論グループでは、スーパーコンピュータと多数のワークステーションを駆使して、新物質の設計や新現象の機構解明、生体物質に見られる特異な機能の理論的解明を行っています。これらの理論計算に必要な新しい方法論の研究にも取り組んでいます。反応物理化学グループでは、走査型プローブ顕微鏡の新しい手法を開発し、単一分子からナノスケールの反応ダイナミクスを解明しています。さらに単分子の反応や物性に基づく少数分子素子を構築し、バルクの分子集合体とは異なる新しい機能の発現を目指しています。学際化学講座の生物物理化学グループでは、タンパク質の立体構造とそのダイナミクスを時間分解振動分光法を用いて研究しています。タンパク質の動きをリアルタイム観測することによって機能発現の分子メカニズム解明に挑んでいます。附属熱・エントロピー科学研究センターでは、独自の精密熱科学を分子科学や構造科学へと展開し、多体系を対象としたマイクロとマクロの融合分野を開拓しています。特異な固体や吸着単分子膜など新奇凝縮相で見られる同位体置換効果や量子効果を、熱測定や中性子散乱、X線解析などをもとに体系化しようとしています。

【有機化学分野】

生体を構成し生命を維持する天然有機化合物や私たちの日常生活に役立つたくさんの人工有機化合物が有機化学の研究対象です。機能分子材料研究グループでは、機能分子を設計・合成

・材料化し、物質中における機能分子の動きや集合を制御することで、光・電子・力学的な物性を操る研究をしています。ナノスケールからマクロスケールに至る幅広い領域を対象とした物質化学研究を進めています。構造有機化学研究グループでは、分子量の比較的大きい新規な拡張型パイ電子系化合物や人工超分子の合成を行い、それらの構造と物性・機能の相関を研究して興味ある新物質の開発を目指しています。また、これらの共役分子の新しい合成法の開発も研究しています。生体分子化学研究グループでは、生体膜を構成する分子や、生体膜に作用する生物活性分子を対象にして、それらの三次元的な構造とはたらきを主にNMRという手法を使って明らかにする新しい方法を中心に研究しています。有機生物化学研究グループでは、糖鎖および糖タンパク質を精密に化学合成する方法を開発するとともに、得られた糖タンパク質を用いて生化学的、および有機化学的な方法を組み合わせて糖鎖の機能を調べる研究をおこなっています。学際化学講座に所属する天然物有機化学研究グループでは、生体のなかの糖分子と脂肪酸などが結合してできている複合糖質と呼ばれる化合物群を中心に、さまざまな作用を示す自然界の新しい化合物を探索して、その構造、合成ならびに生体における働きを研究しています。

これらのグループのほかに協力講座として、産業科学研究所にバイオナノテクノロジー研究室、精密制御化学研究室、複合分子化学研究室、分子システム創成化学研究室、金属有機融合材料研究室の5研究グループ、蛋白質研究所に蛋白質有機化学研究室、膜システム生物学研究室、計算生物学研究室の3グループ、放射線科学基盤機構に同位体化学研究室、粒子ビーム化学研究室、放射線化学研究室、放射線化学生物学研究室の4グループ、フォアフロント研究センターに先端質量分析学研究室、放射線生物化学研究室の2グループがあります。さらに、連携講座として国立研究開発法人産業技術総合研究所の3研究グループと(株)ペプチド研究所、公益財団法人サントリー生命科学財団生物有機科学研究所があります。それぞれの研究分野で活発な研究活動が行われており、さらに詳しい内容は次の各研究室紹介をご覧ください。

[化学専攻のホームページ](http://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/graduate/chem/index-jp.html)

<http://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/graduate/chem/index-jp.html>

化学専攻目次

■ 無機化学講座

1. 分析化学研究室
2. 放射化学研究室
3. 無機化学研究室
4. 生物無機化学研究室
5. 錯体化学研究室

■ 物理化学講座

6. 物性物理化学研究室
7. 表面化学研究室
8. 吸着化学研究室
9. 量子化学研究室
10. 反応物理化学研究室

■ 有機化学講座

11. 構造有機化学研究室
12. 機能分子材料研究室
13. 有機生物化学研究室

■ 学際化学講座

14. 天然物有機化学研究室
15. 生物物理化学研究室
16. 熱・エントロピー科学研究センター (協力講座)
17. 総合学術博物館資料先端研究室 (協力講座)
18. 全学教育推進機構(協力講座)
19. 放射線科学基盤機構同位体化学研究室 (協力講座)
20. 放射線科学基盤機構粒子ビーム化学研究室 (協力講座)
21. 放射線科学基盤機構放射線科学研究室 (協力講座)
22. 放射線科学基盤機構放射線化学生物学研究室 (協力講座)
23. フォアフロント研究センター 先端質量分析学研究室 (協力講座)
24. フォアフロント研究センター 放射線生物化学研究室 (協力講座)

■ 産業科学研究所 (協力講座)

25. バイオナノテクノロジー研究室
26. 金属有機融合材料研究分野研究室
27. 精密制御化学研究室
28. 複合分子化学研究室
29. 分子システム創成化学研究室

■ 蛋白質研究所 (協力講座)

30. 蛋白質有機化学研究室
31. 計算生物学研究室

■ 連携講座

32. 国立研究開発法人 産業技術総合研究所ナノ材料研究部門
33. 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 (中部センター)
34. 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 (関西センター)
35. 株式会社ペプチド研究所
36. 公益財団法人 サントリー生命科学財団 生物有機科学研究所

各グループの研究案内

Department
of
Chemistry

分析化学研究室

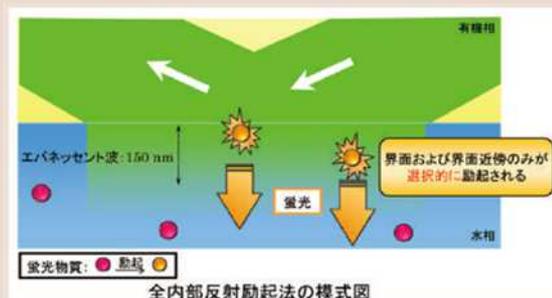
スタッフ 塚原聡 (教授)、諏訪雅頼 (助教)、山本茂樹 (助教)

【研究テーマ】

- 1) 液液界面における金属錯体の集合体の高感度顕微分光分析
- 2) 液液界面の振動測定・解析による界面張力測定法の新規開発
- 3) 液液界面の物質通過速度の測定と高分離性界面の構築
- 4) 交流磁場下における磁性粒子の配向運動を利用したナノ力学測定法の開発
- 5) 磁気泳動法による微粒子分離分析法の開発
- 6) ラマン光学活性による溶液中キラル分子の構造解析
- 7) 振動スペクトルの量子力学計算

生体や環境中では、分子の多くが集合体または微粒子として存在し、主要な反応は界面で起こっています。私たちは、液液界面分析と微粒子分析をキーワードとして、新しい原理の分離法・計測分析法の開発と分析化学の新領域の開拓を進めています。数ナノメートルの厚さの液液界面で特異的に起こる不均一な反応や現象を解明するために、光学顕微鏡と各種の分光法を組み

合わせた新しい計測法を開発しています。また、血球、DNA、タンパク質、細胞等、ナノメートルからマイクロメートルの微粒子の新しい分析法として、電場、磁場等の微小作用力を用いて、単一微粒子ごとの分離と物性計測を実現する新規なマイクロ分析法を開発しています。タンパク質の溶液中二次構造や、光学活性な薬剤分子の絶対配置と光学純度を解析できる、新たな構造解析法の確立を目指し、ラマン光学活性分光法の装置開発、実験、量子力学計算を用いた解析についての研究を行っています。



放射化学研究室

スタッフ 笠松良崇（教授）、金子政志（講師）、風間裕行（助教）

【研究テーマ】

- 1) 超・重元素の化学研究
- 2) 核壊変とその化学効果
- 3) アルファ線核医学治療に向けた医学用放射性核種の基礎研究

放射化学とは、放射線の放出を伴う原子核の壊変（放射壊変）に関係した化学研究です。図の周期表に示す通り、現在までに我々人類が発見した元素は118種類ありますが、そのうちの約3割は安定な同位体を持たず（放射性元素）、放射性物質として扱うしか方法がありません。特に原子番号の大きな重元素は全て放射性元素であり、未知の部分が多いです。また、重元素に対しては相対論効果を考慮した量子化学計算が必要になります。

通常の化学では、主に外殻電子（価電子）の結合や構造、その性質を研究対象とします。放射化学では、放射線の放出が原子核の壊変に伴われる事象であるため、原子核の物理現象を化学的手法を用いて研究するという課題も持ちます。

重い元素は相対論効果の影響が無視できなくなり、特徴的な化学的性質を持つことが期待されます。短寿命

で1原子状態の重元素を対象とした新しい化学実験手法や装置の開発、量子化学計算などの研究をしています。

^{229m}Th や ^{235m}U といった低エネルギー励起核では、化学状態による核壊変（半減期）の変化が期待され、これらの研究を通して原子核と電子の相互作用を研究します。

放射性元素の中には医学応用に有用なものもあります。当研究室では銅や鉛などの錯体化学研究を進めています。

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
1	H	放射性元素														He			
2	Li	Be	加速器でしか合成できない放射性元素										B	C	N	O	F	Ne	
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
			57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103		
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		
7	Fr	Ra	An	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	
				Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	

無機化学研究室

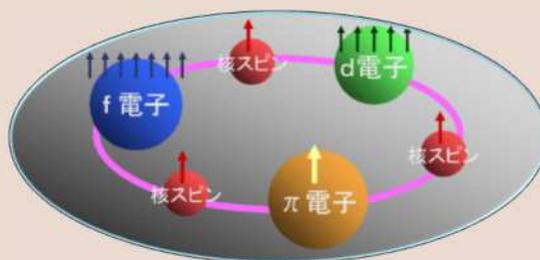
スタッフ 石川直人（教授）、福田貴光（准教授）、Anas Santria（助教）

【研究テーマ】

- 1) f 電子系、d 電子系、n 対電子系を有する分子系の電子構造や分子磁性の基礎的研究
- 2) 励起環状n電子系と f 電子系の相互作用(J-L相互作用)についての基礎研究
- 3) 希土類単分子磁石などの新しい分子素子の開発とその制御についての基礎研究
- 4) 新しい配位構造を持つ錯体の合成と磁性
- 5) 磁気異方性や磁気緩和時間の異なる複数の磁気サイトを有する系の量子状態時間発展の解明
- 6) 積層n電子系の多段階酸化還元で生じる特異な電子励起状態

「金属錯体」や「超分子構造体」は様々な種類の「不対電子」を分子内に持つことができます。これらの「不対電子」は磁気モーメントを持ち、磁性の原因となります。また原子核もそれぞれ特有の磁気モーメントを持ちます。これらの磁気モーメントは互いに作用しあい、複雑な量子状態を形成します。この相互作用によって多様な磁気的性質が生み出されます。

また、このような相互作用をコントロールすることにより、新たな機能や性質を持った化合物を作り出すことができます。本研究室では、多様な形式のスピンをもち分子磁性物質群の新しい研究分野の開拓をめざしています。



Department
of
Chemistry

生物無機化学研究室

スタッフ 船橋靖博（教授）、野尻正樹（講師）、畑中翼（助教）

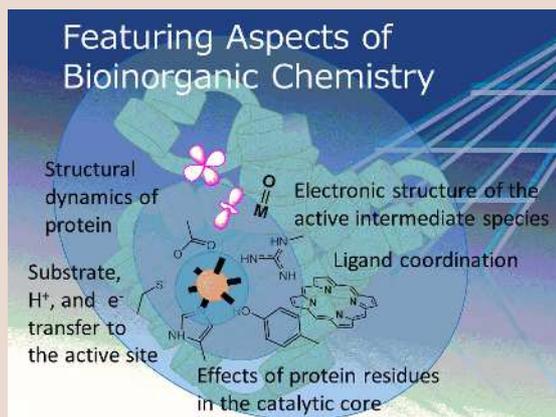
【研究テーマ】

- 1) 単核および複核遷移金属錯体の合成と分子活性化
- 2) 異種金属多核錯体の合成と分子活性化
- 3) 3dブロック元素を用いた生物模倣や触媒の開発
- 4) 金属蛋白質の活性部位の構造と機能の相関の解明
- 5) 薬理作用や健康促進作用のある金属錯体の開発

生体内のエネルギー伝達と物質変換の過程では、光励起と電子伝達、ならびに、酸素や窒素のような小分子をはじめとする様々な基質の分子変換反応が見事に連携しています。第一遷移系列元素は必須の微量元素として生体内に含まれ、蛋白質中の狭小空間内に活性な金属部位があり、そこを中心に反応を円滑に行って機能を発揮しています。

金属イオンは基本的にルイス酸で、酸化還元挙動を示すものもあり、有機物である配位子と結合した金属錯体は設計次第でその性質が制御できます。さらに金属錯体は抗がん活性のような薬理活性や、健康促進作用に関わるものもあります。

以上の様な金属と生命の関わりを理解するとともに、その自然界の化学から得たインスピレーションに基づき、金属錯体を新たに開発します。

Department
of
Chemistry

錯体化学研究室

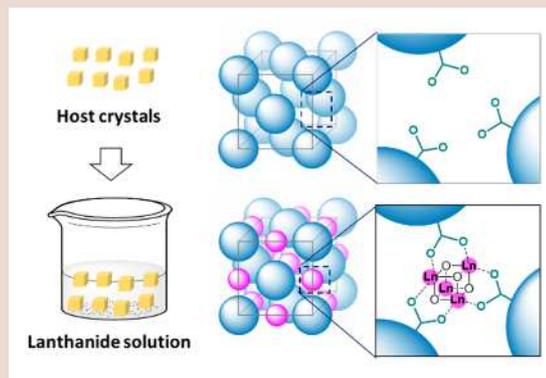
スタッフ 吉成信人（准教授）

【研究テーマ】

- 1) 錯体配位子をベースとする異種金属多核構造の構築
- 2) 金属錯体の集積化による間隙空間の構築と機能開拓
- 3) 金属錯体の立体異性制御とキラル認識に関する研究
- 4) 硫黄架橋多核錯体の物性に関する研究

新しいタイプの単核、多核、超多核金属錯体の合成、ならびにそれらの示す特異な立体構造、電子状態、諸物性の解明に関する研究を行っています。特に、従来の無機配位子や有機配位子を用いる錯体化学から金属錯体自身を配位子として用いる錯体化学への展開を進めています。この手法を用いることにより、アミノ酸のような単純な化合物から段階的、合理的、立体選択的、かつキラル選択的な混合金属多核錯体や金属超分子の開発を行うとともに、この種の金属化合物に取り込まれる遷移金属イオンの新規な結合様式や異常な電子状態の発現を探索しています。

最近では、球状の金属錯体が集合することによりナノサイズの間隙空間が生じ、イオン輸送や反応場などへと利用可能であることを明らかにしています。



Department
of
Chemistry

物性物理化学研究室

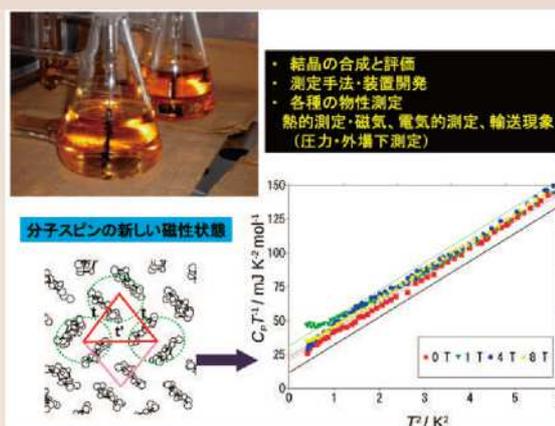
スタッフ 中澤康浩（教授）、坪広樹（准教授）、山下智史（助教）

【研究テーマ】

- 1) 分子性超伝導体の相転移、励起機構の解明
- 2) 強い電子相関効果に由来した新規量子現象の探索
- 3) 金属錯体、分子性磁性体の特異な磁性現象
- 4) 外部環境制御による量子現象の探索

物質は数多くの分子が集合した凝集体です。その中では、互いの分子間、原子間に働く相互作用が複雑に絡み合ってそれぞれの固有のマクロな性質を作り上げています。これらの相互作用は個々にはそれほど大きなものではありませんが、協力現象として劇的な拡がりを見せ、超伝導や強磁性のような様々な相転移を起こします。スピンや電荷、分子運動など種々の自由度が関係してくるため、その理解を進め、新しい現象を探索するためには統計熱力学的な観点からの情報が重要です。また、積極的に外場や圧力をかけたりして環境を変化させていった場合に、これらの性質がどのように変化していくかは、興味もたれます。

当研究室では、独自に作製した装置を用いて“微量測定（10 μ g-1mg 試料）”、“絶対値評価”、“外部環境制御下”“カロリメトリーを中心に、分子性物質の様々な物性を研究しています。新しい現象の探索、その基礎化学的な理解を通して、さらにその奥にある自然のミステリーに迫りたいと思っています。

Department
of
Chemistry

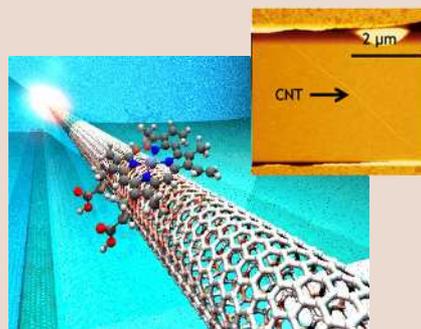
表面化学研究室

スタッフ 赤井恵（教授）、加藤浩之（准教授）、渡部誠也（助教）

【研究テーマ】

- 1) 表面吸着分子の電子状態観察と反応制御
- 2) 二次元分子膜フェムト秒時間分解2光子光電子分光
- 3) 分子-異素材界面における酸化還元ダイナミクス応答の解明
- 4) 金属表面における電気化学反応を利用したイオックス機能発現
- 5) 二次元分子膜におけるプロトン移動機構を応用した分子機能発現

固体の表面や異なる物質間の界面では、原子や分子の複雑で特殊な反応が進行します。表面における反応は様々な機能をもたらす、エネルギーや情報を交換することが可能であり、表面は科学的にも応用技術的にも非常に重要な舞台です。我々の研究室では固体表面やナノサイズの金属電極を有する素子内において、様々な分子の化学的な反応に注目し、新たな分子機能の創発を目指しています。走査プローブ顕微鏡や表面分光といった各種表面解析手法、微細加工技術による素子作製とそれらの特性計測手法を活用し、分子が発



現する機能の基礎的な反応機構や物性の解明を進めると共に、新しい分子機能を積極的に見だし、ニューラルネットワーク等の情報処理活用といった、新たな応用領域の開拓にも取り組んでいます。

Department
of
Chemistry

吸着化学研究室

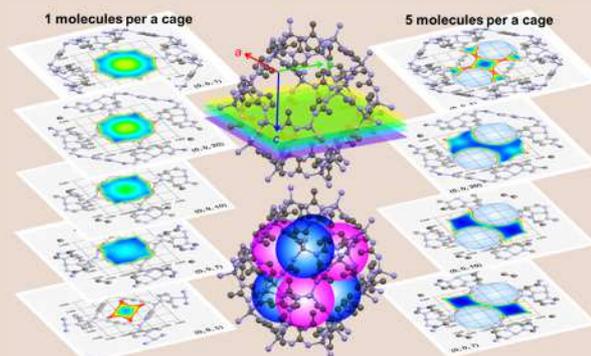
スタッフ 上田貴洋（教授）

【研究テーマ】

- 1) ナノ空間に生成する分子集団の物性と分子間相互作用に関する研究
- 2) 多孔体の物理吸着過程に関する構造および速度論的研究
- 3) ミクロ細孔を用いた分子配列制御による新規物性・機能の探索
- 4) NMR法による新しい細孔分析法の開発

固体内に構築されるミクロな空間では、異種の分子間相互作用が重なり合い、互いに干渉し合います。その空間に閉じ込められた分子の構造や性質、化学反応などの解明が主要な研究テーマです。様々な多孔質固体への分子吸着現象について、核磁気共鳴法をはじめとする分子動態解析により、主にファンデルワールス力が主役となる物理吸着現象を、分子レベルで解明することに取り組んでいます。

また、“空間”によって分子の並び方をコントロールすることで、プロトン伝導、電子伝導、1次元スピン鎖などの新しい機能を持った材料の創製も目指しています。

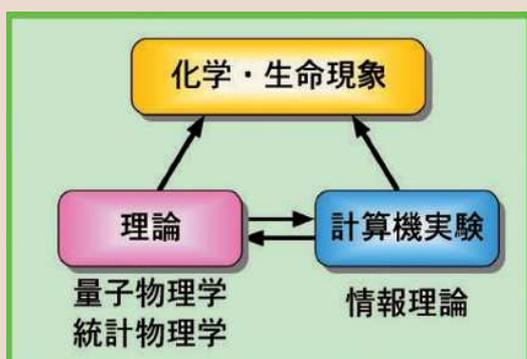
Department
of
Chemistry

量子化学研究室

スタッフ 奥村光隆（教授）、山中秀介（准教授）、川上貴資（助教）

【研究テーマ】

- 1) 分子集合体の構造・電子状態理論
- 2) ナノ表面の電子状態および化学反応
- 3) 生命現象の理論的解明
- 4) 同上物質系の機能・物性解明



当研究室は化学系研究室の中で「理論と計算」を用いて研究を行っている唯一のグループです。量子論、物性理論、化学反応論、情報理論などを基礎に化学現象の電子・分子に立脚した理論的解明を行い、コンピューターグラフィクスなどの可視化技術などを用いて、原子・分子レベルで化学現象を理解することを目指しています。特に現在、ナノ反応場における化学反応現象に注目してその機構解明と新規物質系創成に向けた研究を行っています。

Department
of
Chemistry

反応物理化学研究室

スタッフ 松本卓也 (教授)、蔡徳七 (講師)、三坂朝基 (助教)

【研究テーマ】

- 1) 時間分解静電気力顕微鏡による電子移動ダイナミクスの研究
- 2) 分子認識力顕微鏡によるタンパク質からの配位子引き抜き反応の研究
- 3) 酸化・還元反応ネットワークに基づく分子エレクトロニクスの構築
- 4) 分子-分子反応の多次元立体ダイナミクスの研究
- 5) 配向制御したラジカル-分子反応の研究

分子模型を扱うように、ひとつひとつの分子の形、向き、場所を決めて化学反応を調べてみたい・・・これは、かつて化学者の長年の夢でしたが、今では現実となっています。走査プローブ顕微鏡は、分子一つ一つを見たり、動かしたりできる手法です。本研究室では、「極微細反応化学」をキーワードに、走査プローブ顕微鏡を駆使して、単一分子からナノスケールにおける分子認識反応や電子移動反応を研究しています。

このような分子ひとつひとつの性質が現れる大きさでは、分子集合体とは著しく異なる振る舞いがみられます。微小な反応場を設定することにより、少数分子が織りなす新しいナノ化学や分子エレクトロニクスの開拓を目指しています。

Department
of
Chemistry

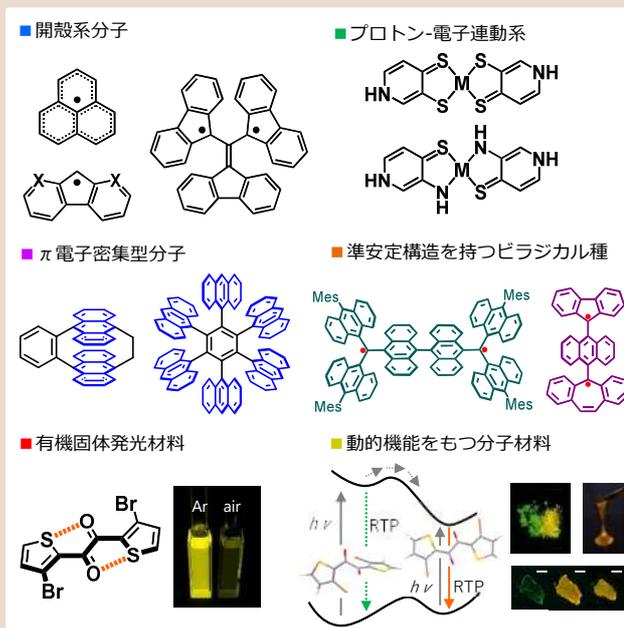
構造有機化学研究室

スタッフ 久保孝史 (教授)、西内智彦 (准教授)、谷洋介 (助教)

【研究テーマ】

- 1) 開殻電子構造を有する分子の電子状態と固体物性に関する研究
- 2) プロトン-電子連動系の構築と物性に関する研究
- 3) π 電子密集型分子の合成・物性研究
- 4) 活性な準安定構造を有するピラジカル種の物性研究
- 5) 高速・高効率りん光を示す有機分子の開発
- 6) 動的機能を有する分子固体/液体の設計と開発

特異な分子構造を有する化合物には特異な電子構造が宿る。構造有機化学は自然界には存在しない新規な化合物を創出し、その化合物を通じて新たな物性や機能を追求する学問であると考えています。我々の研究室では独自の分子設計に基づく新規 n 電子系化合物を基盤として、有機合成を中心とした研究を行っており、新たな化合物に秘められた特異な物性の解明や機能の探索も積極的に行っています。



Department
of
Chemistry

機能分子材料研究室

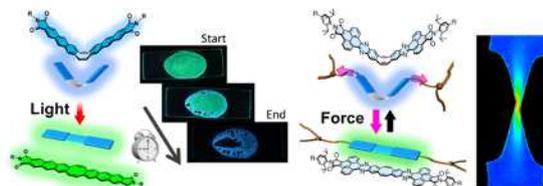
スタッフ 齊藤尚平（教授）、山下健一（講師）

【研究テーマ】

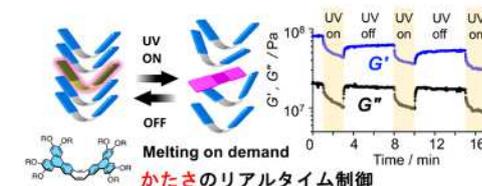
- 1) 柔軟な分子の動きを活かした機能分子の合成
- 2) 環境応答する蛍光プローブと高分子材料開発
- 3) 光照射で流動化する液晶やゲルの開発
- 4) 反芳香族化合物の系統的発光特性評価と希土類様発光色素の創製
- 5) ポルフィリノイドおよび金属錯体の機能化学

独自の機能分子を設計・合成・材料化し、物質中における機能分子の動きや集合を制御することで、光・電子・力学的な物性を操る。有機分子の開発を基軸に据えつつ、自然科学の理解を深める分子システムや、科学技術を前進させる有機材料の創出を目指す。研究の出口を幅広く捉え、基礎科学と応用技術を両輪として、次世代の科学技術を担う人材を育成する。

■ 多様な機能を発現する羽ばたく分子系FLAPの開発



粘度分布の蛍光モニタリング 分子鎖レベルの応力集中解析



■ 剛直な構造と内部空間を有するポルフィリンホスト化合物

Department
of
Chemistry

有機生物化学研究室

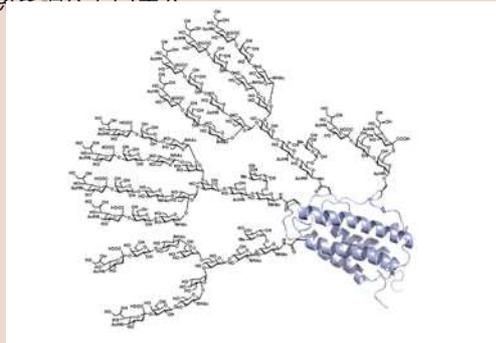
スタッフ 梶原康宏（教授）、真木勇太（助教）、平尾宏太郎（助教）

【研究テーマ】

- 1) 糖ペプチド、糖タンパク質の精密化学合成
- 2) 糖鎖、ペプチド合成のための新規反応の開発
- 3) 糖鎖機能解明

生体内には、代表的な三つの鎖が存在します。核酸、タンパク質を構成するポリペプチド鎖、そして糖鎖です。しかし、糖鎖は、生物の種類によって特異な構造を示し、また、同じ生物種であっても細胞の状態に依存して糖の配列、分岐様式などを可変するため、その詳細な糖鎖機能を調べることが望まれています。有機生物化学研究室では、有機化学合成および生化学的、分析化学的な手法を用いて、糖鎖機能を解明する研究を展開しています。ヒトの体内のタンパク質の多くは図のような糖鎖が結合した糖タンパク質です。糖鎖は、タンパク質の3次元構造、細胞内輸送、抗原性、血中安定性を制御しています。

この合成では、糖鎖とペプチドがつながった糖ペプチドを合成し、それらを連結していくことで目的とする糖タンパク質のポリペプチド鎖を合成します。そして、タンパク質に特異的な3次元構造を形成させることで合成が完了します。得られた糖タンパク質は、その構造を核磁気共鳴法等で調べるとともに、生理活性をも評価し、糖鎖構造とタンパク質の機能発現の関係調べています。



Department
of
Chemistry

天然物有機化学研究室

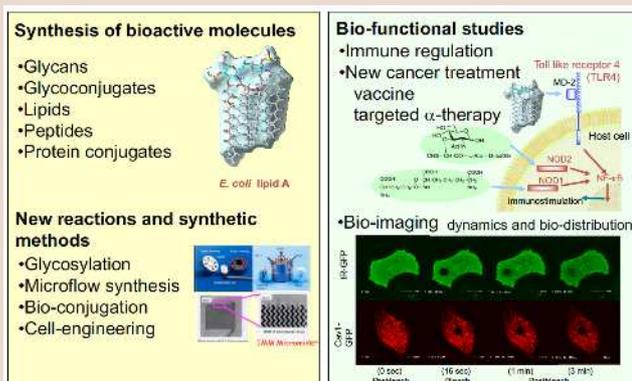
スタッフ 深瀬浩一（教授）、下山敦史（准教授）、真鍋良幸（助教）

[研究テーマ]

- 1) 免疫機構を制御する微生物ならびにホスト由来分子の合成と機能研究
- 2) 糖鎖の効率的な合成法に関する研究
- 3) 糖鎖や蛋白質のバイオイメージング
- 4) α 線核医学治療

免疫、感染、アレルギー、癌化など生体の防御や恒常性維持に関する重要な生命現象に関わる分子を主な研究対象として、それらの機能や役割を明らかにする研究を行っています。特に細胞表面に存在する糖を含む化合物群は、生体内における様々な認識に関与しており、有機合成化学を主としたアプローチにより、活性鍵構造の同定と活性発現機構の解明や生体反応の制御を目指した研究を展開しています。

生体分子の動的挙動を解明するために、バイオイメージング研究を展開しており、以上の研究を統合して、 α 線放出核種をがん細胞に集積させ、治療するという α 線核医学治療について研究を行っています。

Department
of
Chemistry

生物物理化学研究室

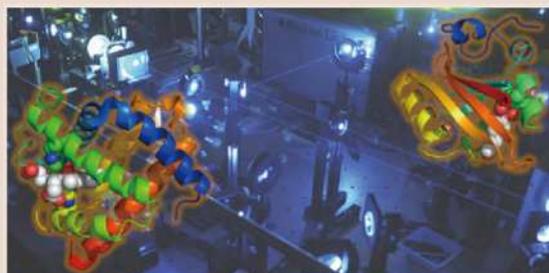
スタッフ 水谷泰久（教授）、石川春人（講師）

[研究テーマ]

- 1) タンパク質の機能発現メカニズムの解明
- 2) タンパク質のエネルギー伝達
- 3) 運動性を利用した人工タンパク質の開発
- 4) 柔らかな分子の機能の科学
- 5) 時間分解分光法の開拓

私たちの研究室では、たんぱく質の構造ダイナミクスを調べ、その機能発現機構について研究しています。タンパク質は「かたさ」と「やわらかさ」をあわせ持つところに特徴があり、安定な立体構造を保ちつつも、その構造を柔軟に変化させます。この柔軟性はタンパク質機能発現の源になっています。特に、ヘモグロビンに代表されるアロステリックタンパク質では、構造を大きく変化させることによって活性のコントロールがなされています。したがって、タンパク質がいかにか構造を変化させるかということは、機能発現機構の解明に直結した重要な問題です。私たちは種々の時間分解分光法、特に共鳴ラマン分光法を使って、機能する際に起きる構造変化を研究しています。

ピコ病からミリ秒にわたるたんぱく質の多彩な構造ダイナミクスを詳細に調べることによって、巧みに機能する仕組みを明らかにする、さらにそこから一般性のある原理を導きだすことが私たちの研究の目標です。そのためには新規な測定装置の開発も必要となります。私たちは、分光法の特徴をシャープに活かすことによって、私たちの方法でしかできない研究を進めています。



Department
of
Chemistry

熱・エントロピー科学研究センター

スタッフ 中野元裕（教授）、宮崎裕司（准教授）、高城大輔（助教）、
Ewa Juszyńska-Gałazka（特任准教授）

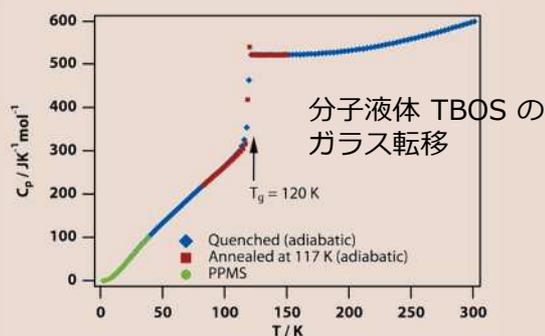
【研究テーマ】

- 1) 分子磁性体の磁気的挙動、相転移とスピン間相互作用の研究
- 2) 生体分子や高分子のダイナミクス、水との相互作用に関する熱力学的研究
- 3) 生命現象への熱力学的アプローチ
- 4) 化学結合の熱化学的研究
- 5) 単分子膜の熱力学的挙動と構造、ダイナミクスの研究

物質界の、とりわけ凝縮相の本質を究めるため、熱力学量であるエネルギー・エントロピーを精確に測り、構造・物性に関する知見を最大限に生かすことで、独自の熱・エントロピー科学を展開しています。

分子間相互作用のバランスが織りなす「秩序と乱れ」をキーワードとし、化学熱力学と分子科学の融合を目指しています。

研究対象は、金属などの堅いものから有機物や生体分子などの柔らかい系、単分子膜、水溶液、生物個体にいたるまで、多種多様です。

Department
of
Chemistry

資料先端研究室

(総合学術博物館)

スタッフ 豊田二郎（准教授）、宮久保圭祐（准教授）

【研究テーマ】

文化財の製造年代や産地の同定、製造手法の再現などを探求する文化財科学や、セルロースなどの文化財素材の研究を通じて資料の保存を図る保存科学、あるいは資料の展示活用と保存を両立させる展示科学に、物理化学的な手法を応用することを目指しています。

それとともに、博物館や大阪大学の各部局に保管される学術資料情報のデジタルデータベース化に関する研究も行い、内外の研究者がそれを活用できるようにすることを進めています。



Department
of
Chemistry

全学教育推進機構

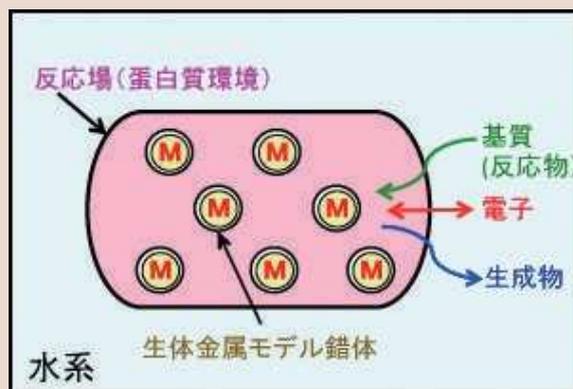
スタッフ 山口和也（教授）

【研究テーマ】

- 1) 生体金属モデル錯体の機能発現に関する反応場の検討
- 2) 複核金属酵素の機能改変
- 3) 生体金属錯体を利用した新規材料開発

生体内には様々な金属イオンが存在しており、生命活動において重要な働きを担っています。この金属イオンの機能を解明するために、当研究室では、生体金属モデル錯体を設計・合成し、生体モデル機能を調べています。具体的には、生体モデル機能に対する金属錯体周りの反応場の影響、金属置換法やアミノ酸置換法による複核金属酵素の機能改変、および生体モデル機能を発現する新規材料開発の3点に焦点を絞り取り組んでいます。

研究課題によって、金属イオンが生体機能を発現する環境場についての理解を深めること、そして生体類似機能を持つ人工蛋白質を創り出すことを目指しています

Department
of
Chemistry

同位体化学研究室

(放射線科学基盤機構)

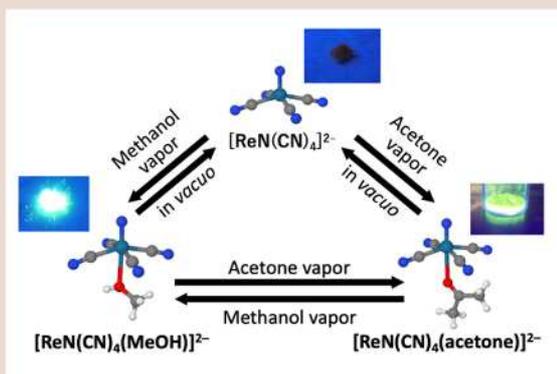
スタッフ 吉村崇（教授）、大江一弘（准教授）

【研究テーマ】

- 1) 放射性および関連する金属イオンを用いた金属錯体の発光特性の研究
- 2) 医学利用のための有機配位子及び金属錯体の合成
- 3) 福島第一原発事故に関連した微量放射性同位体測定による環境化学研究

本研究室では周期表の約3分の1を占める放射性同位体しかない元素に着目して、放射性および関連する元素を用いた無機化学研究をおこなっています。金属錯体の研究については、新しい強発光性金属錯体の合成とその光物性に関する研究、ウラン等のアクチノイドの酸化還元特性や反応性に関する研究をおこなっています。また、核医学試薬として用いることを想定して、アクチノイド、ランタノイド、ラジウム等の金属イオンを安定にキレートする新しいキレート剤の合成とそれらを用いた金属錯体の合成、錯体の安定性の制御をする機構の解明に関する研究をおこなっています。

これに加えて、福島第一原発事故で放出された放射性同位体の研究も行っています。この研究では、微量な放射性同位体に注目して、これらが事故時にどのように放出され、その後環境中をどう移動しているのかについて調べています。



Department
of
Chemistry

粒子ビーム化学研究室

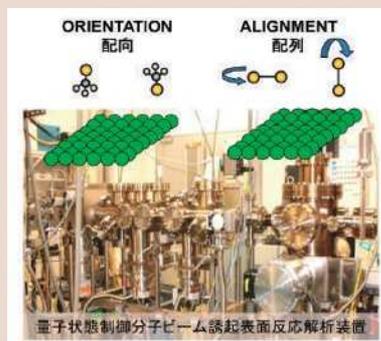
(放射線科学基盤機構)

スタッフ 岡田美智雄 (教授)

【研究テーマ】

- 1) 配向および配列分子ビーム法による表面化学反応立体ダイナミクスの解明
- 2) 赤外分光法・光電子分光法等の表面分光法を用いた金属・半導体表面化学反応の解明
- 3) 放射光施設Spring-8を利用したX線光電子分光による表面化学反応過程の解明
- 4) 固体表面の低次元性にともなう相転移現象とその機構解明
- 5) 合金表面を用いた電子状態のチューニングによる表面化学反応制御
- 6) 超低速イオンビームを用いた新しい二次イオン質量分析法の開発とその応用

粒子ビーム化学研究室では、最先端の研究教育機器の開発を通じて、ものづくりに根ざした表面物理化学研究を行っています。特に独自の先端機器を開発しながら、原子や分子により構成される粒子ビームが固体表面で引き起こす化学反応素過程について研究し、その制御を目指しています。

Department
of
Chemistry

放射線科学研究室

(放射線科学基盤機構)

スタッフ 豊嶋厚史 (教授)

【研究テーマ】

- 1) アスタチンを用いたアルファ線核医学治療に関する研究
- 2) 中性子放射化による薬剤製造法の研究
- 3) 福島第一原子力発電所の廃炉研究
- 4) 福島県浜通り地区の復興を目指した天蚕研究

放射線は非常に高いエネルギーを持つ高速粒子や電磁波の総称で、いくつかの種類があります。それぞれが異なる性質を持っており、その特徴を活かした研究開発や社会での利用がなされています。

本研究室では、放射線や放射性同位元素 (RI) を用いた社会課題解決や社会応用を目指し、放射線科学研究を行っています。その一つが、がん治療法である核医学治療に関する研究です。アスタチンなど医療用RIを用いたターゲティング分子の合成やRI標識法の開発、中性子放射化による薬剤製造法の開発などを行っています。また、福島第一原子力発電所 (1F) の事故によって大きな被害を受けた福島県の復興も放射線に関わる社会課題です。1Fの廃炉に必要なRIダストのリアルタイムモニタリング法の開発研究や福島県の地場産業振興を目指した天蚕研究を行っています。

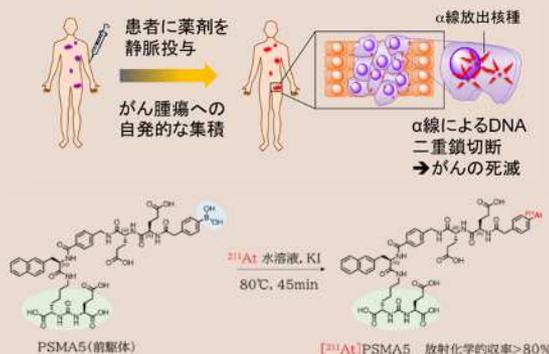


図. (上) 放射線の一つであるアルファ線を用いた核医学治療、(下) 開発したがん治療薬 (2024年度6月から阪大病院で治験開始)。

Department
of
Chemistry

放射線化学生物学研究室

(放射線科学基盤機構)

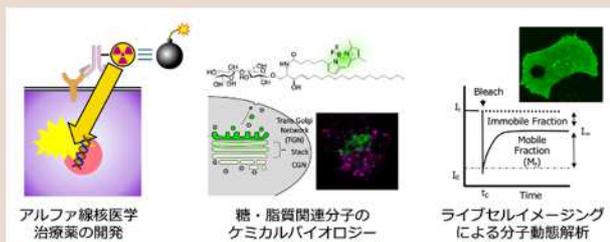
スタッフ 樺山一哉 (教授)

【研究テーマ】

- 1) アルファ線核医学治療に向けた薬剤開発
- 2) 自然免疫に関わる脂質関連分子の機能解析
- 3) 糖鎖による相互作用の分子化学的実証
- 4) ライブセルイメージング法を用いた生体分子の動態解析

アルファ線核医学治療 (Targeted Alpha Therapy: TAT) は、がん細胞に高エネルギーを持つアルファ線核種を送達し死滅させる薬剤療法の一つであり、難治性がんの新規治療法として注目されています。当研究室では、アルファ線短寿命核種であるアスタチン²¹¹(²¹¹At)を標識した薬剤候補化合物を開発し、ヒトに初めて投与する段階の治験であるFirst-in-Human (FIH) 試験を見据えた研究を行っています。

また有機合成化学者との協働により、蛍光標識した生理活性分子を創製し、感染症やがん/糖尿病などの病態に関わる糖・脂質関連分子の機能を、分子化学的な視点から解析する研究も推進しています。

アルファ線核医学
治療薬の開発糖・脂質関連分子の
ケミカルバイオロジーライブセルイメージング
による分子動態解析Department
of
Chemistry

先端質量分析学研究室

(フォアフロント研究センター)

スタッフ 豊田岐聡 (教授)、大塚洋一 (准教授)、河井洋輔 (助教)

【研究テーマ】

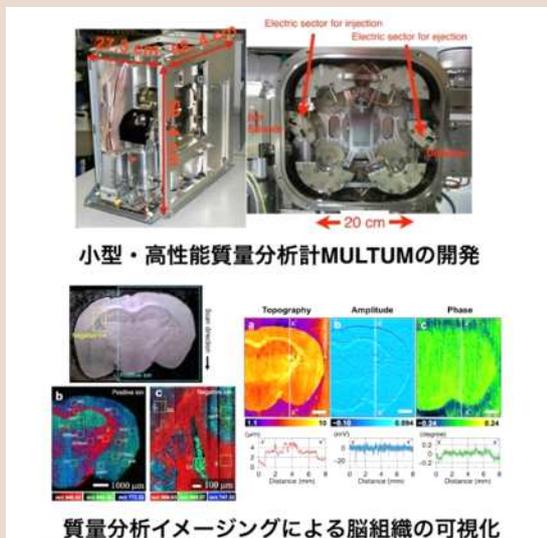
- 1) 分子情報計測のための先端的質量分析法の開発
- 2) 質量分析法を基盤とした、学際的、分野横断的な応用研究
- 3) 高精細質量分析イメージング法による疾患組織の分子多様性の研究

質量分析は、高精度に質量情報を計測することができるため、気相原子や分子の化学反応研究や、環境汚染物質の極微量分析、生命科学分野のオミクス計測など、多岐にわたる分野で活用されています。

当研究室では、気相イオンを高精度・高感度に計測するための質量分析法の研究開発と、それらを評価・活用するための異分野融合型研究を軸に研究を進めています。

独自の小型・高性能質量分析計の研究開発では、装置の特徴を活用したオンサイト質量分析の研究を進めています。農場など、現場で発生・生成する分子をリアルタイムに計測し、環境中の化学物質の変動を詳細に調べます。

生体組織や細胞の化学成分を可視化する質量分析イメージングの研究では、多次元生体情報の計測による、疾患の機構解明や医療診断への応用を目指しています。



小型・高性能質量分析計MULTUMの開発

質量分析イメージングによる脳組織の可視化

Department
of
Chemistry

放射線生物化学研究室

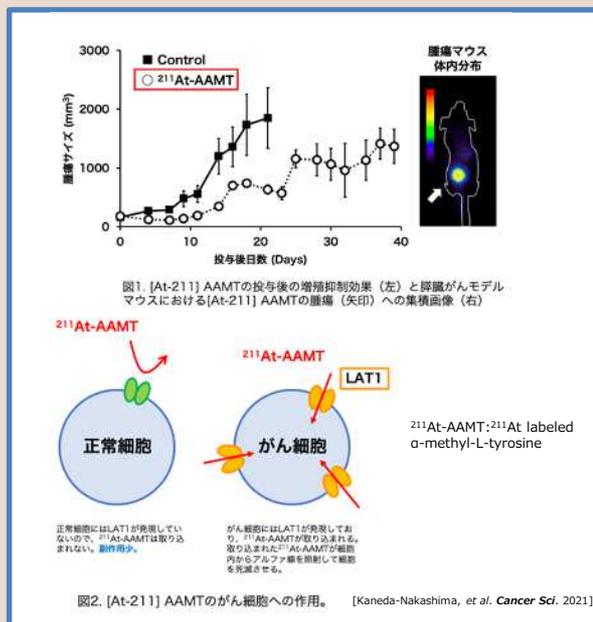
(フォアフロント研究センター)

スタッフ 兼田 (中島) 加珠子 (教授)

【研究テーマ】

- 1) 核医学利用のためのアミノ酸誘導体の合成及び同位体標識法の検討
- 2) 短寿命放射線同位体を用いた核医学治療薬の品質の検討
- 3) 放射線同位体の摂取による生物影響の評価
- 4) がん細胞型アミノ酸トランスポーターの機能解析

本研究室は核医学治療薬としての応用を目指して、低分子（ナトリウム塩）、中分子（アミノ酸誘導体、輸送体阻害薬）、高分子（抗体他）に対して、短寿命放射線核種の標識を行い、その機能評価を行なっています。化学専攻内の研究室との共同研究のみならず、医学系研究科、工学研究科、放射線科学基盤機構、核物理研究センターと連携し、核種の製造・分離から、化合物の合成・標識、そして生物を用いた評価（細胞・実験動物）に関わっています。これに加えて、核医学治療薬の分子標的の一つであるがん細胞特異的に発現誘導されるアミノ酸トランスポーターであるLAT1の機能解析を行い、がんにおける本分子の発現意義の解明やより良い治療薬の開発に生かす試みを続けています。

Department
of
Chemistry

バイオナノテクノロジー研究室

(産業科学研究所)

スタッフ 谷口正輝 (教授)、筒井真楠 (准教授)、田中裕行 (助教)、小本祐貴 (助教)

【研究テーマ】

- 1) 1分子でDNA・RNAの塩基配列とペプチドのアミノ酸配列を決定する第5世代シーケンサーの開発
- 2) 第5世代シーケンサーを用いたがんの早期診断法の開発
- 3) 1個のウイルス・細菌を調べるナノポア検査法の開発
- 3) 1分子化学反応の計測

ナノテクノロジー、量子計測、AI、バイオの融合により、1つの原子、分子、ウイルス、細菌を、電気的に調べる1分子科学を研究しています。特に、DNA・RNAの塩基配列と、ペプチド・タンパク質のアミノ酸配列を直接調べる第5世代シーケンサーを開発しています。第5世代シーケンサーを用いて、新たながんマーカーを探し当て、がんの早期診断法を開発しています。これまでは検査法の開発に留まっていたが、これから、体の中の微量な抗体・抗原を探し出し、がんや難病の薬を生み出す研究を行っていきます。

誰も見たことがない、1分子化学反応を計測する手法も研究しています。教科書には書かれていない化学反応を見つけ、化学者の夢である1分子の遷移状態観察を目標としています。

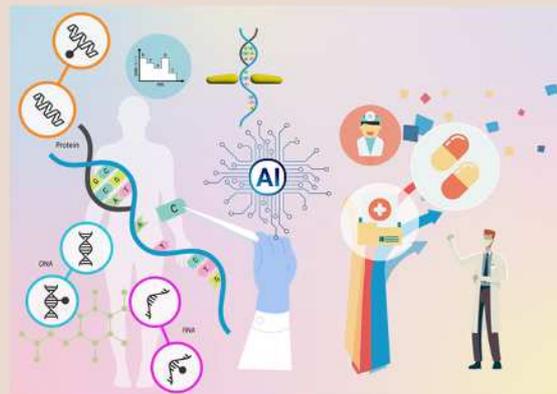


図: 第5世代シーケンサーは、1分子のDNA・RNAの塩基配列とペプチドのアミノ酸配列を電流で読み出す。配列情報をAIで学習することで、がんや難病の創薬を目指している。

Department
of
Chemistry

金属有機融合材料研究分野研究室

(産業科学研究所)

スタッフ 坂本雅典 (教授)、佐野奎斗 (助教)

【研究テーマ】

- ◆ 未開発の太陽エネルギー資源である赤外光のエネルギー資源化
- ◆ 赤外光で発電する透明な太陽電池の開発

金属有機融合材料研究分野研究室では、未開発の太陽エネルギー資源である赤外光のエネルギー資源化を実現するための研究を進めています。地表に到達する太陽光のおよそ半分は赤外域の太陽光(赤外光)です。しかしながら、赤外光を捕集し、人類に有用な電気、化学エネルギーに変換することは、人類はもとより、長い太陽光利用の歴史をもつ植物でさえ成し遂げていません。赤外域の太陽光の有効利用法が開発されれば、光合成や太陽発電などに匹敵する新たな持続可能なエネルギー資源の開拓につながります。

当研究室では、赤外光を選択的に捕集する局在表面プラズモン共鳴を示すヘビードープ半導体ナノ粒子による赤外光-エネルギー変換技術の開発を進め、世界最高の効率の赤外光の化学エネルギー変換に成功しました。また、赤外光が目に見えない事を利用した透明な太陽電池の開発にも成功しています。

赤外域の太陽光で発電する透明な太陽電池は、住宅の窓ガラスなど、既存の太陽電池が設置できなかった場所に設置することができ、社会実装が実現すれば今までにないエネルギー生産の技術となります。一連の発見は、赤外光のエネルギー資源化へのブレイクスルーとなり、クリーンで持続可能な太陽エネルギーを余すことなく使用する新たな未来を切り開く科学技術に発展する事が期待されます。

Department
of
Chemistry

精密制御化学研究室

(産業科学研究所)

スタッフ 中谷和彦 (教授)、堂野主税 (准教授)

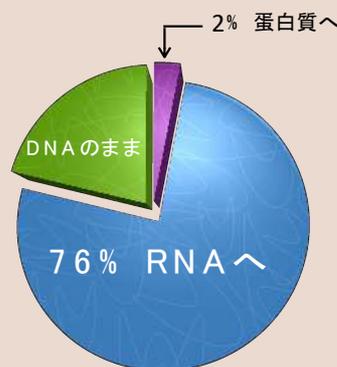
【研究テーマ】

- 1) トリプレットリピート病のケミカルバイオロジー
- 2) 低分子による遺伝子発現調節
- 3) RNAを標的とした低分子創薬
- 4) 実用的遺伝子検出法の開発

中谷研究室では、核酸 (DNAやRNA) を化学物質として扱い、有機化学的な視点でその構造と機能を理解した上で、核酸機能を調節する小分子の創製に関わる研究を、有機合成化学と分子生物学を駆使して展開しています。

ヒトは30億塩基対のDNAを持っていますが、そのうちのたった2%しか蛋白質に翻訳されていません。残り76%はRNAまで転写されますが、蛋白質をコードしていません。このRNAは、「翻訳されないRNA」として、ヒトの生命活動を司る重要な機能を持っている事が最近の研究で判ってきました。

RNAの機能を調節する低分子、即ち「RNAを標的とした創薬研究」を世界にさきがけて、有機合成化学を推進力として進めています。「細胞の中で核酸機能を調節する分子」の創製を目指しています。



ヒトゲノム30億塩基対の使われ方

Department
of
Chemistry

複合分子化学研究室

(産業科学研究所)

スタッフ 鈴木孝禎 (教授)、伊藤幸裕 (准教授)、山下泰信 (助教)、高田悠里 (助教)

TEL:06-6879-8470・FAX:06-6879-8474

tkysssuzuki@sanken.osaka-u.ac.jp

http://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/cmc

【研究テーマ】

- 1) エピジェネティクス制御化合物の創製と応用
- 2) 標的酵素誘導型阻害薬合成
- 3) 難治性疾患を対象としたケミカルバイオロジー、創薬化学研究
- 4) AIを使った創薬化学研究

私たちの研究室では有機化学を基盤として意図した活性を発現する有機化合物の創造とその生物学への応用(ケミカルバイオロジー)、医薬への応用(創薬)に取り組んでいます。有機合成化学・反応化学・構造化学・生化学・計算化学などの幅広い知識を活用しケミカルバイオロジー・創薬化学研究に取り組み、新しい生理活性物質の合成と作用機構の解明を行っています。特に、人間を対象とする生命科学研究(ライフサイエンス研究)分野において、「ヒトへの適用が可能

となるような薬の種を探す研究、病態の発症メカニズムを解明する研究」を進めています。

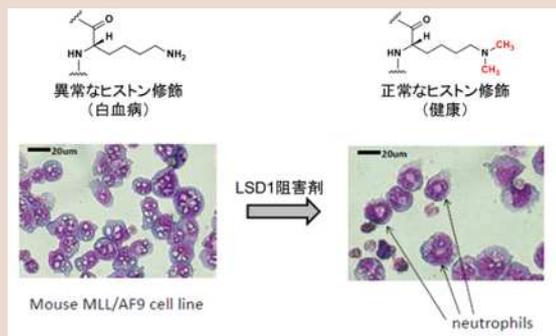


図. エピジェネティクス制御化合物による癌治療

Department
of
Chemistry

分子システム創成化学研究室

(産業科学研究所)

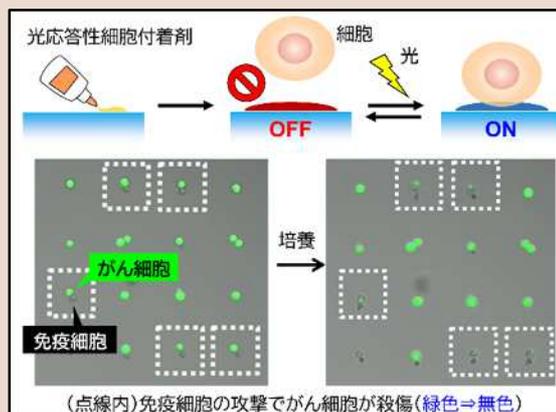
スタッフ 山口哲志 (教授)、滝澤忍 (准教授)、山平真也 (助教)

【研究テーマ】

- 1) どんな細胞の接着も自在に光制御できる分子システムの開発
- 2) どんな生体分子や細胞も望みの刺激応答性に変換する分子システムの開発
- 3) 生命システム内の分子や細胞を選択的に可視化する分子システムの開発
- 4) 1細胞の顕微鏡画像の特徴に応じて細胞を取り分けて遺伝子情報を解析する分子システムの開発

データサイエンスの発展に伴い、生命システムに関わる大規模な情報が、ライフサイエンスや医療、産業に活用されています。そこで、私達の研究室では、これまでに獲得できなかった未知の生命情報を得るための新しい分子システムを、有機合成化学を使って創出することを目的とした研究を行っています。具体的には上記の4つに大別される分子システムを開発しています。このような独自の分子システムを使って、生命現象に人為的に摂動を加えたり、特定の分子や細胞の動的な振る舞いを観察したりすることで、未知の情報を獲得します。

例えば、どんな細胞も光を当てたところにだけくっつける光応答性の細胞付着剤を開発し、免疫細胞とがん細胞とを一つずつ光で配置して、免疫細胞ががん細胞を殺傷する様子を大規模に観察することに成功しました(下図)。このようなデータは、がん免疫の新しいメカニズムの発見を促すとともに、治療や診断、創薬に役立つと期待されます。



(図) 光応答性細胞付着表面を用いたがん免疫の1細胞解析 (JACS 2022)

Department
of
Chemistry

蛋白質有機化学研究室

(蛋白質研究所)

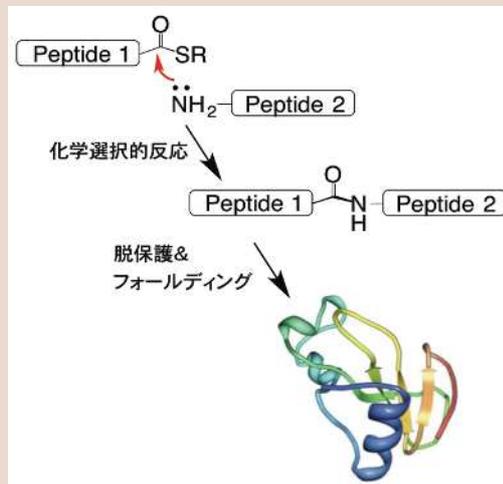
スタッフ 北條裕信 (教授)、武居俊樹 (助教)

【研究テーマ】

- 1) 合成ルートのデザイン、合成ブロックの調製、縮合反応等、蛋白質合成法の開発
- 2) 翻訳後修飾を持つ蛋白質の合成ならびに修飾と機能の相関関係の研究
- 3) 膜蛋白質の合成と機能発現メカニズムの解明に関する研究

私たちの研究室では、有機合成法を利用して、化学的なアプローチで蛋白質の機能を研究しています。そのため、ペプチドチオエステルを鍵中間体として用いる効率的な蛋白質合成の開発を行っています。またこの方法を発展させ、糖鎖を持つ蛋白質、修飾ヒストン、膜蛋白質等の合成に適用し、それらの機能の解明を目指して研究を進めています。

また、セレンの持つ特異な化学的性質を利用して、新規な機能性蛋白質の化学合成研究も進めています。



ペプチドチオエステルを鍵中間体とする蛋白質化学合成法の概略

Department
of
Chemistry

計算生物学研究室

(蛋白質研究所)

スタッフ 水口賢司(教授)、橋本浩介(准教授)、長尾知生子(助教)、渡邊怜子(特任講師)

【研究テーマ】

- 1) 分子と高次の生命現象を繋げるためのデータ統合
- 2) 蛋白質を介する相互作用の理解・予測と生体反応のモデル化
- 3) ヒト初期胚のトランスクリプトーム解析
- 4) 新薬創出を目的とした薬物動態予測

情報科学や計算化学的手法を組み合わせ、疾患や生命現象の解明と創薬などへの応用を目指した研究を行っています。様々な分野で人工知能(AI)への期待が高まる中、コンピュータ解析に適した形に整理されたデータをどれだけ利用できるかが、AI開発の成否に大きな影響を与えるとの認識から、遺伝子、タンパク質を中心とする分子レベルのデータから、疾患、化合物などに至る幅広いデータの統合に力を入れています。また、タンパク質の構造、機能、相互作用などを予測する手法の開発と共に、免疫、発生などの具体的な生命現象解明への応用も推進しています。さらに、創薬の初期に利用可能な化合物の網羅的プロファイルの予測システムの構築を行っています。

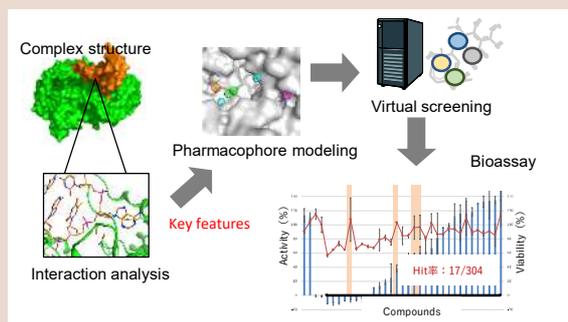


図1. 構造情報に基づく医薬品の設計

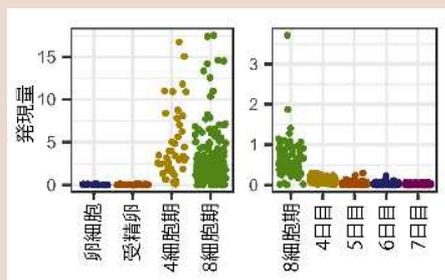


図2. 初期胚におけるレトロトランスポソンの発現

Department
of
Chemistry国立研究開発法人 産業技術総合研究所 ナノ材料研究部門
鎌田賢司 (招へい教授)Department
of
Chemistry国立研究開発法人 産業技術総合研究所 (中部センター)
松原一郎 (招へい教授)Department
of
Chemistry国立研究開発法人 産業技術総合研究所 (関西センター)
清林哲 (招へい教授)Department
of
Chemistry株式会社 ペプチド研究所
乾達也 (招へい教授)、山本敏弘 (招へい教授)、吉矢拓 (招へい教授)Department
of
Chemistry公益財団法人 サントリー生命科学財団 生物有機科学研究所
島本啓子 (特任教授)