



40年の歩み

化学科の40年



化学科教員(1978)

- 1973年 化学科設立
学生定員 30名
- 1983年 応用化学専攻
化学専門分野設立
- 1988年 化学専攻設立
- 1996年 学部学生定員を50名へ増員
- 2007年 化学・生命化学科へ名称変更
(学部学生定員を60名へ増員)
3学部へ再編)



関根吉郎研



井口馨研



新田信研



高橋博彰研



伊藤紘一研



東建一先生

化学科設立前夜

- 1965年11月4日 第1回 化学科設立準備委員会
出席者: 大坪義雄委員長、森田吉郎、佐藤匡、加藤忠蔵、加藤栄一、岡本剛、**関根吉郎**、**高宮信夫**
- 1967年4月 化学科設立のための人事を先行して行うことが許可された
- 1966年4月 **伊藤礼吉**先生: 化学科設立要因として初めて赴任
(西早稲田キャンパスから大久保キャンパスへ移転)
- 1967年4月 **井口馨**先生、**多田愈**先生(伊藤先生の紹介)、**高橋博彰**先生
- 1968年4月 **東建一**先生
- 1970年7月 理工学部教授会で化学科設立の決議、理事会での承認、文部省の認可
- 1973年4月 化学科設立**
- 1974年4月 **新田信**先生
- 1975年4月 **伊藤紘一**先生(東 建一先生の退任にともなう人事)

化学科-化学・生命化学科 専任教員一覧

嘱任年月日	退職年月日	教員氏名
49/04/18	86/03/31	関根 吉郎
49/10/07	94/03/31	高宮 信夫
66/04/01	95/07/16	伊藤 礼吉
67/04/01	95/03/31	井口 馨
67/04/01	05/03/31	高橋 博彰
67/04/01	03/03/31	多田 愈
68/04/01	75/03/31	東 建一
74/04/01	06/03/31	新田 信
75/04/01	08/03/31	伊藤 紘一
84/04/01	06/12/22	松本 和子
88/04/01		石原 浩二
93/04/01	97/03/31	藤井 正明
95/04/01		中田 雅久
96/04/01		中井 浩巳
97/04/01		古川 行夫
03/04/01		柴田 高範
04/04/01		山口 正
05/04/01		鹿又 宣弘
07/04/01		小出 隆規
07/04/01		中尾 洋一
08/04/01		寺田 泰比古
09/04/01		井村 考平
		現職メンバー



伊藤礼吉研



多田愈研



高宮信夫研

新田信研

高橋博彰研

伊藤紘一研

東建一先生



早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 生命化学部門

40年の歩み

40年のカリキュラムの変遷 専門必修と専門選択科目の比較

1973年: 28単位(実験科目3科目、専門必修6単位、卒論6単位) 2002年: 46単位(実験科目4科目、専門必修12単位、卒論2単位)
 1990年: 40単位(実験科目5科目、専門必修9単位、卒論5単位) 2013年: 49単位(実験科目5科目、専門必修18単位、卒論2単位)

専門必修

1973年 8科目(卒論を除く) 2013年 22科目

1973年 専門必修科目

番号	科目名	単位数	1973	1990	2002	2013
236	基礎化学	2	2	2	2	2
236CA	有機化学A	2				
237CA	物理化学A	2				
240	分析化学	2				
241A	量子化学A	2				
244	無機化学実験	2	2	2	2	2
256	有機化学実験	2	2	2	2	2
257	物理化学実験	2	2	2	2	2
258	分析化学実験	2	2	2	2	2
259	量子化学実験	2				
260	卒業論文	6	6	6	6	6
合計		28	28	28	28	28

1990年 13科目

1990年 専門必修科目

番号	科目名	単位数	1973	1990	2002	2013
236A	基礎化学A	2	2	2	2	2
236B	基礎化学B	2				
C-123A	数学A	2				
C-123B	数学B	2				
242A	物理化学A	2				
C-124A	物理学A	2				
C-124B	物理学B	2				
C-125	量子化学	2				
C-126	分子動力学シミュレーション	2				
244B	無機化学実験	2	2	2	2	2
244C	有機化学実験	2	2	2	2	2
244D	物理化学実験	2	2	2	2	2
244E	分析化学実験	2	2	2	2	2
244F	量子化学実験	2				
256	有機化学実験	2	2	2	2	2
C-127	卒業論文	6	6	6	6	6
合計		40	28	40	40	40

2013年 専門必修科目

科目名	単位数	一学期に行われる授業時数					
		第1年度	第2年度	第3年度	第4年度		
有機化学A	2	2	0				
基礎化学A	2	2	0				
基礎化学B	2	2	0				
基礎化学演習	1	2	0				
無機化学A	2	0	2				
無機化学B	2	0	2				
有機化学A	2	0	2				
物理化学A	2	2	0				
物理化学B	2	2	0				
有機化学C	2	2	0				
無機分析化学実験	2	6	0				
生命化学A	2	0	2				
物理化学B	2	0	2				
有機化学演習	1	0	2				
生命化学実験	4	0	12				
分析化学概論	2	0	2				
物理化学C	2			2	0		
有機化学実験	4			12	0		
生命化学B	2			2	0		
無機分析実験	2			0	5		
物理化学演習	1			0	2		
物理化学実験	4			0	12		
卒業論文	2						
専門必修科目合計	49	6	6	12	20	16	20

専門選択

1973年 33科目82単位 2013年 35科目72単位

1973年 専門選択科目

番号	科目名	単位数	1973	1990	2002	2013
237	物理化学	2				
237A	物理化学A	2				
237B	物理化学B	2				
238	分析化学	2				
238A	分析化学A	2				
238B	分析化学B	2				
239	量子化学	2				
239A	量子化学A	2				
239B	量子化学B	2				
240A	無機化学	2				
240B	無機化学A	2				
240C	無機化学B	2				
241	有機化学	2				
241A	有機化学A	2				
241B	有機化学B	2				
241C	有機化学C	2				
242	物理化学	2				
242A	物理化学A	2				
242B	物理化学B	2				
243	分析化学	2				
243A	分析化学A	2				
243B	分析化学B	2				
244	無機化学実験	2				
244A	無機化学実験A	2				
244B	無機化学実験B	2				
245	有機化学実験	2				
245A	有機化学実験A	2				
245B	有機化学実験B	2				
246	物理化学実験	2				
246A	物理化学実験A	2				
246B	物理化学実験B	2				
247	分析化学実験	2				
247A	分析化学実験A	2				
247B	分析化学実験B	2				
248	量子化学実験	2				
248A	量子化学実験A	2				
248B	量子化学実験B	2				
249	卒業論文	6	6	6	6	6
合計		82	82	82	82	82

1990年 38科目84単位

1990年 専門選択科目

番号	科目名	単位数	1973	1990	2002	2013
237	物理化学	2				
237A	物理化学A	2				
237B	物理化学B	2				
238	分析化学	2				
238A	分析化学A	2				
238B	分析化学B	2				
239	量子化学	2				
239A	量子化学A	2				
239B	量子化学B	2				
240	無機化学	2				
240A	無機化学A	2				
240B	無機化学B	2				
241	有機化学	2				
241A	有機化学A	2				
241B	有機化学B	2				
241C	有機化学C	2				
242	物理化学	2				
242A	物理化学A	2				
242B	物理化学B	2				
243	分析化学	2				
243A	分析化学A	2				
243B	分析化学B	2				
244	無機化学実験	2				
244A	無機化学実験A	2				
244B	無機化学実験B	2				
245	有機化学実験	2				
245A	有機化学実験A	2				
245B	有機化学実験B	2				
246	物理化学実験	2				
246A	物理化学実験A	2				
246B	物理化学実験B	2				
247	分析化学実験	2				
247A	分析化学実験A	2				
247B	分析化学実験B	2				
248	量子化学実験	2				
248A	量子化学実験A	2				
248B	量子化学実験B	2				
249	卒業論文	6	6	6	6	6
合計		84	84	84	84	84

2013年 専門選択科目

番号	科目名	単位数	1973	1990	2002	2013
237	物理化学	2				
237A	物理化学A	2				
237B	物理化学B	2				
238	分析化学	2				
238A	分析化学A	2				
238B	分析化学B	2				
239	量子化学	2				
239A	量子化学A	2				
239B	量子化学B	2				
240	無機化学	2				
240A	無機化学A	2				
240B	無機化学B	2				
241	有機化学	2				
241A	有機化学A	2				
241B	有機化学B	2				
241C	有機化学C	2				
242	物理化学	2				
242A	物理化学A	2				
242B	物理化学B	2				
243	分析化学	2				
243A	分析化学A	2				
243B	分析化学B	2				
244	無機化学実験	2				
244A	無機化学実験A	2				
244B	無機化学実験B	2				
245	有機化学実験	2				
245A	有機化学実験A	2				
245B	有機化学実験B	2				
246	物理化学実験	2				
246A	物理化学実験A	2				
246B	物理化学実験B	2				
247	分析化学実験	2				
247A	分析化学実験A	2				
247B	分析化学実験B	2				
248	量子化学実験	2				
248A	量子化学実験A	2				
248B	量子化学実験B	2				
249	卒業論文	6	6	6	6	6
合計		72	82	84	82	72



第1回謝恩会

10周年記念祝賀会



大いに学び、大いに遊べ

第1回スキー大会



化学科野球大会



追分オリエンテーション

1982年



2012年
(3年生)

ユネスコの女性科学賞受賞(2008年)



新規抗がん剤の開発

田中奈津実さん
(中田雅久研究室)

ユネスコ女性科学賞:
生命科学と物質科学の分野からそれぞれ2名私大では初めて受賞



化学・生命化学科は、設立50周年へ向けて新たに羽ばたき、努力邁進していきます。

学生表彰



博士学位賞メダル

- 卒論発表賞：最も優れた卒論発表を行った学生に贈られる賞
- 稲化会賞：最も成績が優秀であった学部学生に贈られる賞
- 関根吉郎賞：研究業績が優秀であった修士課程修了者に贈られる賞
- 博士学位賞：優れた業績で学位を取得した学生に贈られる賞



稲化会賞メダル



卒論発表賞トロフィー

卒論発表賞受賞者

- 2012年度 山本和宏(小出研究室)
- 2011年度 中野匡彦(中井研究室)
- 2010年度 小坂橋沙希(寺田研究室)
- 2010年度 弘田有紀(寺田研究室)
- 2009年度 関谷敦志(小出研究室)
- 2009年度 清塚達行(寺田研究室)
- 2008年度 當眞嗣貴(中井研究室)
- 2007年度 田中祐美子(古川研究室)
- 2006年度 土持崇嗣(中井研究室)
- 2005年度 西澤豪(柴田研究室)
- 2004年度 土釜恭直(柴田研究室)
- 2003年度 臼井研二(中井研究室)
- 2002年度 小林正人(中井研究室)
- 2001年度 井上将(松本研究室)
- 2000年度 山内佑介(中井研究室)

稲化会賞受賞者

- 2012年度 野田優子(寺田研究室)
- 2011年度 中村章彦(中田研究室)
- 2010年度 樽見望都(中井研究室)
- 2009年度 本白水崇光(鹿又研究室)
- 2008年度 原島大(古川研究室)
- 2007年度 渥美香奈(浅野研究室)
- 2006年度 影山彰(浅野研究室)
- 2005年度 瀬戸啓介(古川研究室)
- 2004年度 阿部正人(中田研究室)
- 2003年度 野口直義(中田研究室)

関根吉郎賞受賞者

- 2013年度 今枝佳祐(井村研究室)
- 2013年度 藤本雅子(柴田研究室)
- 2013年度 田中亜純(石原研究室)
- 2012年度 大久保貴弘(柴田研究室)
- 2012年度 関谷敦志(小出研究室)
- 2012年度 吉川武司(中井研究室)

博士学位賞受賞者

- 2013年3月 上森 理弘(中田研究室)
- 2013年3月 折本 浩平(中田研究室)
- 2013年3月 澤田 貴史(中田研究室)
- 2013年3月 綱 和宏(中田研究室)
- 2013年3月 平井 祥(中田研究室)
- 2013年3月 五十幡 康弘(中井研究室)
- 2013年3月 西澤 宏晃(中井研究室)
- 2012年3月 松木 (大塚) 麻衣子(柴田研究室)
- 2012年3月 神田 和正(柴田研究室)
- 2012年3月 瀬戸 啓介(古川研究室)
- 2012年3月 大津 博義(山口研究室)
- 2011年3月 辻 博也(古川研究室)
- 2010年3月 阿部 正人(中田研究室)
- 2010年3月 林 伸行(中田研究室)
- 2010年3月 土釜 恭直(柴田研究室)
- 2010年3月 山崎 ちさと(小出研究室)
- 2010年3月 赤間 知子(中井研究室)
- 2010年3月 渥美 照夫(中井研究室)
- 2009年3月 菊池 那明(中井研究室)
- 2009年3月 田中 奈津美(中田研究室)
- 2009年3月 野口 直義(中田研究室)
- 2008年3月 馬場 健(中井研究室)
- 2008年3月 宇津木 雅之(中田研究室)
- 2008年3月 渡邊 秀昭(中田研究室)
- 2008年3月 梶山 卓郎(古川研究室)
- 2007年3月 小林 正人(中井研究室)
- 2007年3月 中田 彩子(中井研究室)
- 2007年3月 星野 稔(中井研究室)
- 2007年3月 井上 雅大(中田研究室)
- 2007年3月 武田 博之(中田研究室)
- 2007年3月 本間 将博(中田研究室)
- 2007年3月 新井 彩子(松本研究室)
- 2006年3月 落合 真彦(松本研究室)
- 2006年3月 山内 佑介(中井研究室)
- 2005年3月 河村 芳海(中井研究室)
- 2005年3月 袖山 慶太郎(中井研究室)
- 2005年3月 本多 光太郎(古川研究室)
- 2005年3月 岩本 充広(中田研究室)
- 2005年3月 鈴木 孝洋(中田研究室)
- 2005年3月 高野 真史(中田研究室)
- 2004年3月 三ッ本祐樹(新田研究室)

2000年度に「卒論発表賞」、2003年に「稲化会賞」と「博士学位賞」、2012年度に「関根吉郎賞」を設置し、学生表彰を行ってきました。30周年記念行事として「化学科学生表彰基金」に多大のご寄付をいただき、「稲化会賞」と「博士学位賞」のメダルを作製しました。40周年を機に、学生表彰の財源として設立する「稲化会化学・生命化学学生表彰基金」にご寄付をお願い申し上げます。

1. 寄付1口 2,000円(何口でも結構です)
2. 送金方法 郵便振替口座への振込 口座番号：00140-0-139949
加入者名：稲化会
ゆうちょ銀行 〇一九店(ゼロイチキユウ店)
預金種類：当座, 口座番号：0139949

連絡・問い合わせ先

早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科

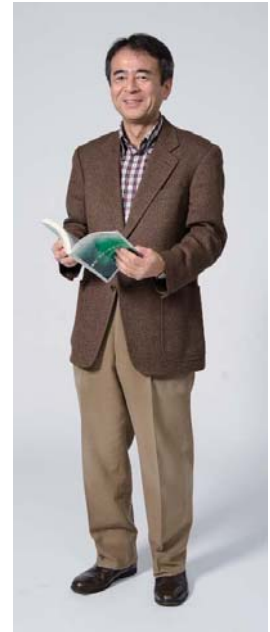
教授 古川 行夫

電話：03-5286-3244 電子メール：furukawa@waseda.jp

教育目標：知性，創造性，品位をもち，社会を興す研究者となろう

古川 行夫

理工学術院教授，理学博士（東京大学）



担当科目

（学部）基礎化学 A，物理化学 B，分光化学，物理化学実験（大学院）構造化学特論

著書

赤外・ラマン分光法，日本分光学会 分光測定入門シリーズ 6，講談社サイエンティフィック

略歴

1982 年 4 月 東北大学薬学部助手；1988 年 1 月 東京大学理学部助手；

1990 年 11 月 東京大学理学部講師；1992 年 8 月 東京大学理学部助教授；

1997 年 9 月 早稲田大学理工学部教授；2007 年 4 月 早稲田大学理工学術院教授に配置換

役職など

2000 年 9 月～2002 年 9 月 化学科主任；

2006 年 9 月～2008 年 9 月 理工学術院長補佐兼教務主任

2007 年 12 月～2011 年 11 月 日本分光学会副会長・理事

2002, 2007, 2009, 2010 年 日本化学会 BCSJ 賞

最近の研究内容

1. 有機薄膜の構造

結晶 / アモルファス状態，混合物薄膜，温度測定

2. 無機 / 有機，有機 / 有機界面の構造

界面での電荷移動，分子・クリスタリット配向

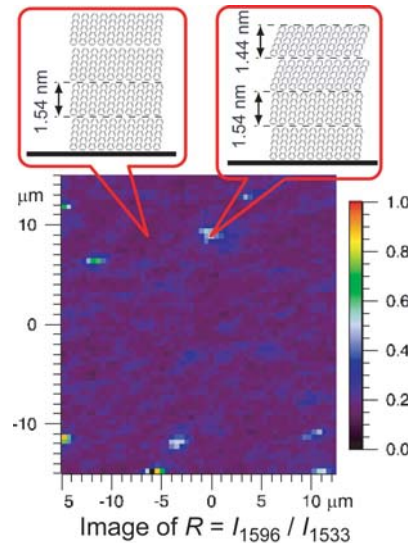
3. 導電性ポリマーのキャリア

ポーラロン / バイポーロン，光誘起赤外吸収

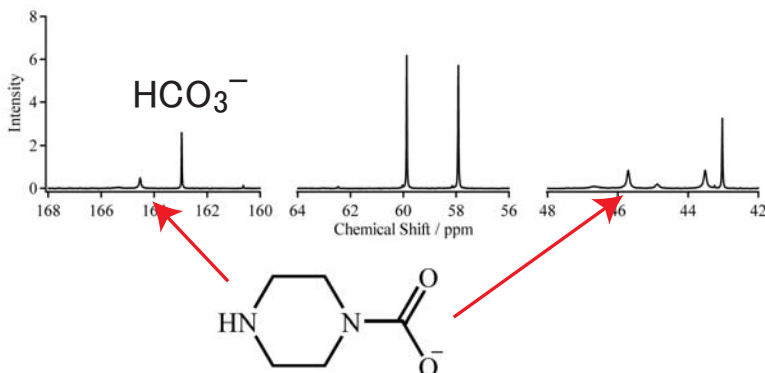
4. 無機 / 有機ハイブリッド太陽電池の開発

TiO₂, ZnO, 無機・有機半導体のハイブリッド

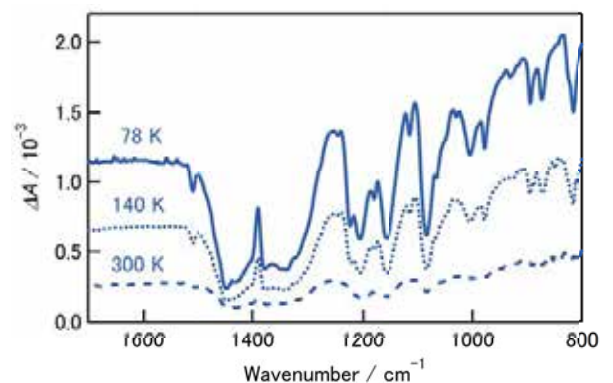
5. 二酸化炭素ガス（温室効果ガス）吸収液の開発
アミンと CO₂ の反応機構



ペンタセン薄膜のラマンイメージ：R 値から薄膜 (1.54 nm) 相とバルク (1.44 nm) 相の二次元分布が分かる



CO₂ を吸収したアミン水溶液の ¹³C-NMR スペクトル：水溶液中に存在するアミンと CO₂ の反応生成物と濃度の時間変化が分かる



P3HT:PCBM ブレンド薄膜（太陽電池材料）の光誘起赤外吸収：照射に伴う有効電荷分離効率とキャリアの再結合活性化エネルギーが分かる



早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 古川研究室



【教授】
古川 行夫

1998年

古川研究室創設

【スタッフ】
ザオジンガン
細井 宜伸

【1期生】
石間 満
岡村 大二
望月 友晴

【2期生】
工藤 健一 中田 安紀
小林 龍弘 橋本 敏
高尾 裕樹 山岸 祐子
鳥山 英里香



2002年度



2003年度



2004年度



2005年度

【3期生】
本多 光太郎 古川 忍
鈴木 恒徳 前川 紫野
辻 博也 山本 潤

【4期生】
坂本 里史
田上 昭平
永井 由紀子
濱木 裕史

【5期生】
中野 永
宮本 佳洋
村椿 方規
平田 茂範
森脇 誠

【6期生】
鎌田 祐亮 梶山 卓郎
川口 順二 鈴木 賢司
小柳 智裕 田辺 彰洋
酒井 平祐



2006年度



2007年度

2008年

古川研10周年



2008年度



2009年度

【7期生】
奥村 正紀 松田 恭彦
高嶋 健二 龍岡 直人
中島 一裕 松本 和明
藤森 正嗣 三森 雅之
増井 晶子 谷田 宏臣

【8期生】
佐相 智紀
瀬戸 啓介
丹呉 直鈺
宮川 可奈子
山田 哲平
渡辺 恭彰

【9期生】
梅澤 優子
河野 哲
添田 有貴
田中 真人
大須賀 皓也

【10期生】
大川 拓也
岸田 拓士
鈴木 奈央
瀬山 耕平
田中 祐美子
増田 公則



2010年度



2011年度



2012年度



2013年度

【11期生】
伊藤 陽太
原島 大
廣瀬 正起
皆嶋 英洋
吉井 寛明

【12期生】
磯田 隼人
江口 潤
栗原 良幸
橋本 望
宮村 将也

【13期生】
阿部 徹
石川 智也
福田 文彦
森田 恵子

【14期生】
岩崎 亮太
高橋 雄太
新田 美穂
村田 博誉
吉田 大樹
Andria Kurniawan

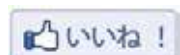
【15期生】
秋山 浩太郎
岩沢 康宏
江上 龍馬
金澤 啓
林 小吾朗
百瀬 美穂

2013年

古川研15周年
化学・生命化学科40周年



【16期生】
榎田 一平 榑 祐介
亀井 未亜 中村 友
川手 渚 横山 智子
後藤 佐智衣





教員の略歴



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授
中井 浩巳

1992年5月–1996年3月 京都大学 工学部 合成・生物化学科 助手
1996年4月–1998年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 専任講師
1998年4月–2003年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 助教授
2003年4月–2007年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 教授
2007年4月–現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授
2009年4月–現在 早稲田大学 理工学研究所 研究重点教員

2006年 化学物理における量子系(QSCP) Promising Scientist(奨励賞)
2011年 日本コンピュータ化学会 学会賞
2011年 アジア・環太平洋理論・計算化学者連合(APATCC) Popleメダル
2011年 第7回国際理論化学物理国際会議(ISTCP-VII) 組織委員長

最近の研究内容

中井研究室の研究課題が、CREST(戦略的創造研究推進事業)の「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」に採択されました。(研究期間:平成24年10月～平成30年3月)

「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」

レアメタルフリー材料の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能を目指した原子配列制御等のナノスケール物質構造制御技術による物質・材料の革新的機能の創出

「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」

量子化学 + 相対性理論 → 周期表の全元素に対応した計算理論



戦略目標

希少元素や規制元素の多くは重元素であり、相対論的効果が無視できません。そこで本研究では、理論的基盤として相対論的量子化学理論の確立を目指します。そして、触媒活性・電磁気特性・電子機能材料・生体光機能・機能性高分子に対して、理論的手法を用いて元素の特性を理解し、革新的な機能を持つ物質・材料を設計することを目的とします。特に、異種元素間の化学結合、種々のスピン状態が関与するスピントロニクス現象、同一組成であっても機能に大きな違いをもたらすナノサイズ効果に着目し、研究を推進します。

その他の研究例

- 分割統治法: 巨大分子の高速な電子状態計算
- 局所応答分散法: 密度汎関数理論の弱点解消のための新しい分散力計算法の提案
- 大規模分子動力学シミュレーション: 「京」コンピュータを用いた超並列計算
- 材料科学への理論的アプローチ: リチウムイオンデバイスの理論設計
- 生命化学への理論的アプローチ: 抗ウエストナイルウイルス薬の作用機序の理論的解明
- 環境問題への理論的アプローチ: CO₂分離回収(CCS)技術の理論設計

History of Nakai Research Group

—中井研究室のあゆみ—



ゼミ合宿、那須にて(2001年)



化学科卒業式にて(2003年)



教授就任祝い、屋形船にて(2004年)



ゼミ合宿、八丈島にて(2005年)



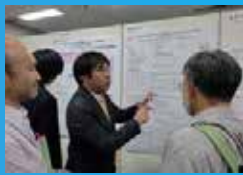
研究室10周年パーティー(2006年)



BBQ、光が丘公園にて(2007年)



お花見、戸山公園にて(2009年)



分子科学討論会、札幌にて(2011年)



追いコン、中井邸にて(2012年)



ワークステーション(2012年)



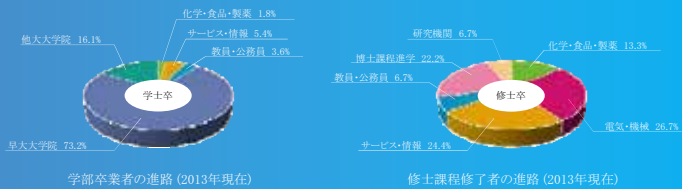
研究室の日常(2012年)



新入生歓迎会にて(2013年)



国際会議 ISTCP-VII のエキスカンション、皇居前にて(2011年)



博士学位取得者一覧および論文題目(2013年現在)

名前	博士論文題目	学位取得年
1 河村 芳海	電子状態計算に対する新しい解析法の開発とメチル基内部回転及び固体表面系への応用	2005年
2 袖山 慶太郎	原子核の量子効果を考慮した分子軌道法の開発とプロトン移動反応への応用	2005年
3 山内 佑介	非経験的分子動力学法による衝突反応および励起ダイナミクス研究	2006年
4 小林 正人	大規模電子状態計算のための分子積分および多体摂動法の高速度化	2007年
5 中田 彩子	時間依存密度汎関数理論に基づいた励起状態計算と高精度化への試み	2007年
6 星野 稔	原子核と電子の量子効果を同時に取り扱う分子理論の高精度化と非平衡ダイナミクスへの展開	2007年
7 馬場 健	励起状態における化学結合・エネルギー移動・反応ダイナミクスに関する理論的研究	2008年
8 菊池 那明	量子化学計算に基づく化学結合解析手法の開発とその応用	2008年
9 赤間 知子	大規模電子状態ダイナミクスのための理論的研究:分割統治および実時間発展法の開発	2010年
10 瀧美 照夫	非経験的分子シミュレーションの高速度化と超原子価化合物への応用	2010年
11 河東田 道夫	巨大系の多体摂動計算のための効率的計算手法の開発	2011年
12 西澤 宏晃	原子核の量子効果を考慮した高精度な分子理論の開発	2012年
13 五十幡 康弘	非共有結合性相互作用における分散力と同位体効果に関する理論的研究	2012年

※ 論文博士

1996 中井 浩巳、専任講師として早稲田に着任
中井研究室設立(51号館 10階)
原子核の量子効果に関する研究を開始

1997 中井研究室に第1期生配属
[PD] 立川 仁典、[B4] 川原 康夫、藏所 知司、野沢 俊彦

1998 中井 浩巳、助教授に就任
[B4] 河合 正暁、馬場 健

1999 [B4] 市川 尚志、河村 芳海、袖山 慶太郎、長澤 泰輔

2000 [B4] 岡本 宗彦、河東田 道夫、國見 貴之、千葉 真人、星野 稔、山内 佑介

2001 非経験的分子動力学法の研究を開始

[B4] 菊池 那明、中田 彩子、松田 愛子、山田 一人
山内 佑介、化学科卒論発表賞(第1号)受賞
袖山 慶太郎(M2)、CCTCC ポスター賞受賞

2002 中井 浩巳、米国ライス大学客員教授として在外研究
エネルギー密度解析の研究を開始

[M1] 小澤 志保、[B4] 瀧美 照夫、小林 正人、副田 隆介、竹内 真理、山古 舞子

2003 [PD] 大塚 教雄、[B4] 石井 基樹、石川 佳奈、桐生 大義、倉林 佑二、坂野 元則、玉置 麻理、宮本 開任
小林 正人、化学科卒論発表賞(第3号)受賞

2004 中井 浩巳、教授に就任

学生居室として、55号館 9階を増室

密度汎関数理論の研究を開始

線形スケールリング理論の研究を開始

[PD] 今村 穰、[B4] 赤間 知子、飯田 涼子、池 和将、一色 俊宏、佐倉 大輔、鈴木 崇夫、濱田 愛一郎
袖山 慶太郎、博士(理学)学位取得

2005 [M1] 鈴木 潤、[B4] 伊丹 崇裕、高橋 明日香、田上 貴裕、中野 修二、西澤 宏晃

河村 芳海、袖山 慶太郎、博士(理学)学位取得

山内 佑介(D2)、日本化学会春季年会 学生講演賞受賞

2006 中井研究室設立10周年

[客員講師] リアト・サヌーン、[B4] 安倍 朋弘、小泉 健治、塚本 泰弘、土持 崇嗣

山内 佑介、博士(理学)学位取得

中田 彩子(D2)、日本化学会春季年会 学生講演賞受賞

2007 [B4] 後潟 敬介、表 達矢、河崎 泰良、藤井 厚彦、五十幡 康弘

小林 正人、中田 彩子、星野 稔、博士(理学)学位取得

赤間 知子、分子科学会 優秀ポスター賞受賞

土持 崇嗣、化学科卒論発表賞(第7号)受賞

2008 居室を51号館 10階から63号館 4階に移動

[客員講師] 佐藤 健、[B4] 大越 昌樹、大橋 英明、小林 理恵、富真 嗣貴、平塚 暁裕、山形 悠也

馬場 健、菊池 那明、博士(理学)学位取得

小林 正人(客員講師)、WATOC 2008 ポスター賞受賞

小林 正人(客員講師)、赤間 知子(D2)、中井 浩巳、日本コンピュータ化学会 2008年度 論文賞受賞

富真 嗣貴(B4)、分子科学会 優秀ポスター賞受賞

2009 中井 浩巳、早稲田大学 理工学研究所 研究重点教員に就任

学生居室として、63号館 5階を増室

[B4] 岡田 剛嗣、国定 友隆、吉川 武司、吉田 沙織

富真 嗣貴、化学科卒論発表賞(第9号)受賞

2010 相対論的電子状態理論の研究を開始

[助教] バシヤリーナ・サマバコーン、[助手] 清野 洋司、

[B4] 岩永 和真、上村 諒、窪田 崇人、鈴木 健生、梅見 望都

赤間 知子、瀧美 照夫、博士(理学)学位取得

小林 理恵(M2)、清野 洋司(助手)、分子科学会 優秀講演賞 W受賞

2011 国際会議 ISTCP-VII を早稲田大学で開催(組織委員長: 中井 浩巳)

[B4] 飯塚 壮、関内 翔太、高田 雄太、中嶋 裕也、中野 匡彦

河東田 道夫、博士(理学)学位取得

中井 浩巳、APATCC People Medal 受賞

五十幡 康弘(D2)、APCTCC5 学生発表賞受賞

赤間 知子(助手)、APCTCC5 ポスター賞受賞

中井 浩巳、日本コンピュータ化学会 2011年度 学会賞受賞

梅見 望都、稲化会賞(第8号)受賞

2012 JST-CREST「相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計」の研究を開始

[B4] 海寶 文彰、塚本 祐介、野中 佑太郎、速水 雅生

西澤 宏晃、五十幡 康弘、博士(理学)学位取得

吉川 武司、関根 吉郎賞(第1号)受賞

中野 匡彦、化学・生命科学科卒論発表賞(第14号)受賞

2013 [客員研究員] ルンティワ・チトン、[客員次席研究員] 石川 敬之

[B4] 齋庭 理沙、市川 洸貴、小林 祐貴、出牛 史子、寺西 慶、若山 和史

[海外訪問学生] ウィリアム・カウスリ、ジョナサン・ロメロ

國本 雅宏、中井 浩巳、本間 敬之、電気化学会論文賞受賞

[凡例] [人] 新規加入メンバー [人] 博士学位取得 [人] 受賞





井村研究室（光物理化学研究）

教員の略歴



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 准教授
井村 考平

000年 月 大阪大学大学院理学研究科博士後期課程修了 博士(理学)
000年 月 001年 月 日本学術振興会博士研究員 0
001年 月 001年 月 自然科学研究機構 分子科学研究所 助教
008年 01年 月 科学技術振興機構 さきがけ研究者兼任
001年 月 現在 早稲田大学理工学術院 准教授

008年 分子構造総合討論会(現分子科学会) 奨励賞
00年 日本化学会 進歩賞
00年 日本分光学会 奨励賞
01年 文部科学大臣表彰 若手科学者賞

最近の研究内容

[研究一覧]

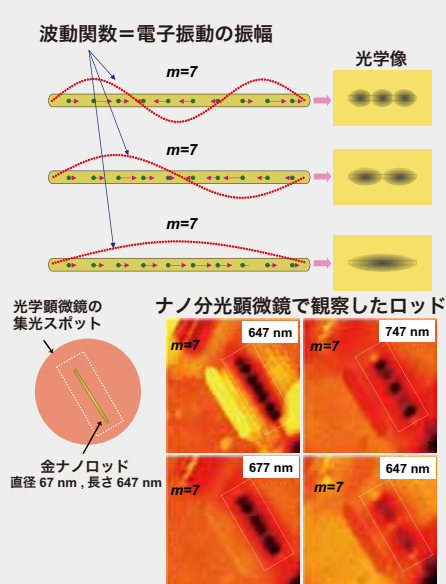
- (1) プラズモン波動関数の可視化に関する研究
- (2) フェムト秒時間分解ナノ分光顕微鏡の開発
- (3) プラズモニック物質の光機能化の研究

[研究内容]

貴金属ナノ物質は、プラズモン共鳴(自由電子の集団電子振動)により、バルク固体とは異なる光特性を示す。例えば、プラズモンは、ナノ物質近傍に増強光電場を創りだすことができる。光増強場は、高感度分光法やナノ光デバイスへの応用が期待されている。近年、プラズモンを利用する光技術をプラズモニクス、その媒介となる物質をプラズモニック物質と呼び、応用研究が急速に進展している。

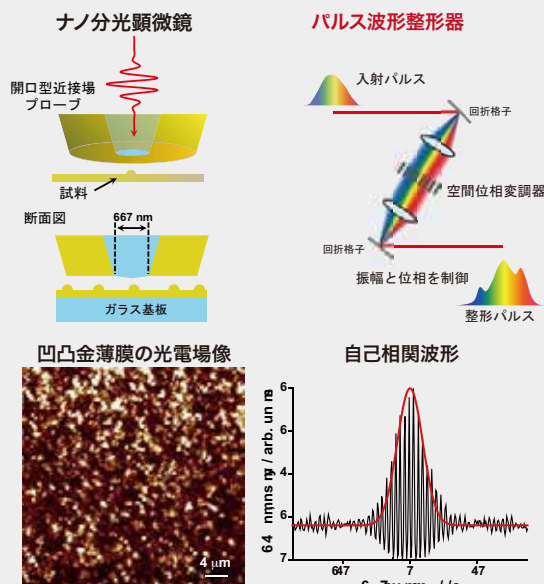
従来のプラズモン研究は、物質のもつポテンシャルをパッシブに利用することを目的としている。これをアクティブに制御することができれば、物質の機能やその応用範囲を格段に向上させることができる。プラズモニック物質のもつ高いポテンシャルは、プラズモンの動的、空間的な特性と深い関わりがある。励起光パルスの時間特性を操作することで、プラズモニック物質の機能を制御することができる。本研究では、超短パルス光と波形整形装置を組み合わせ、プラズモニック光電場の時空間特性の制御を実現することを目的とした。また、これを光反応に応用して新しい原理や現象の探求を目指した。

(1) プラズモン波動関数の可視化



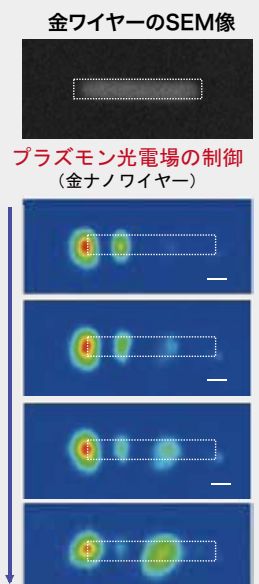
ナノ物質の特性と波動関数の相関を解明

(2) 時間分解ナノ分光顕微鏡の開発



空間分解能 50 nm, 時間分解能 20 fsを実現

(3) ナノ物質の光機能化



光電場の時空間制御に成功



井村研究室 (光物理化学研究)

研究室メンバー



2013年度 集合写真

現メンバー

- D2 溝端秀聡(一期生) D1 今枝佳祐(二期生)
- M2 大瀬戸彬(三期生) B4 内田多佳子(五期生)
- 武内麻未(三期生) 小山あかね(五期生)
- 大村 淳(三期生) 西角友維(五期生)
- 森本仁嗣(三期生) 野田祥吾(五期生)
- M1 市川陽一(四期生) 平野祐樹(五期生)
- 堤内勇貴(四期生) 宮澤美樹(五期生)
- 松澤一弘(四期生)

OBメンバー

- 齋藤太郎(一期生) 波多野風生(二期生)
- 石場 充(二期生) 牧田賢彦(三期生)
- 市川悟史(二期生) 石川大裕(四期生)

研究活動のタイムテーブル

	月	火	水	木	金	土
9:30	研究立案	理論計算	データ解析	近接場測定	データ解析	合同ゼミ 古川研
12:00	昼食	昼食	昼食	昼食	昼食	昼食
13:00	試料作製	機器準備	データ整理 研究 打ち合わせ	近接場測定	データ整理	
17:00	SEM 観察	分光測定	ゼミ			
18:30	ゼミ					
21:30						

コアタイム 9:30~18:30

年間予定

3月	上旬：新4年生配属決定 & 新4年生歓迎会
4月	上旬：花見
5月	中旬：国際会議 (@ お台場)
6月	中旬：理工スポーツ大会
7月	下旬：研究中間発表
8月	中旬：夏休み (10日程度) 下旬：ゼミ合宿 (2泊3日 @ 伊豆セミナーハウス)
9月	下旬：学会発表 (@ 東大)
10月	上旬：3年生オリエンテーション (追分)
11月	研究進捗発表
12月	下旬：研究中間発表
1月	上旬：スキー旅行
2月	上旬：卒業論文・修士論文発表会
3月	下旬：卒業式

進路・就職先(内定先も含む)

- エス・ジー
- キヤノン
- 京セラ
- コニカミノルタ
- 東京海上日動
- ノリタケカンパニーリミテド
- 明治
- りそな銀行
- NOK
- 私立高校教員
- 早稲田大学大学院
- 他大学大学院

学会発表

発表件数	主な参加学会
2010年度 3件	分子科学討論会
2011年度 7件	日本分光学会
2012年度 12件	日本化学会春季年会 etc.

課外活動の写真



学会発表 (@ 東大) 風景



ゼミ合宿風景



中田研究室（化学合成法研究）

教員の略歴



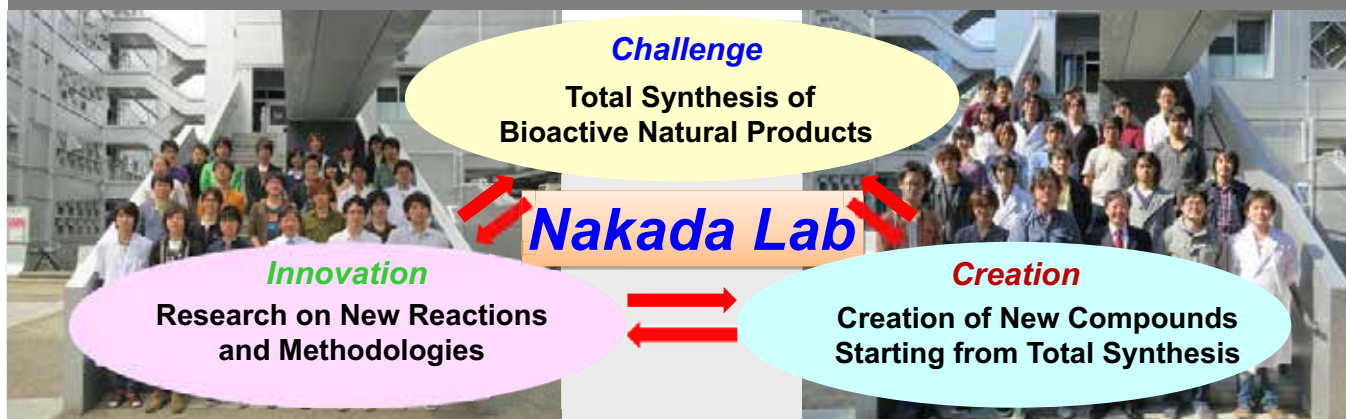
理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授
中田 雅久

1987年1月–1988年12月 東京大学 薬学部 教務職員
1989年1月–1992年 3月 東京大学 薬学部 助手
1992年4月–1993年 7月 The Scripps Research Institute 博士研究員
1993年8月–1995年 4月 東京大学 薬学部 助手
1995年4月–2000年 3月 早稲田大学 理工学部 化学科 助教授
2000年4月–2007年 3月 同大学 理工学部 化学科・生命理工学専攻 教授
2007年4月–現在 同大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授
2008年10月–2010年9月 同大学 先進理工学部 大学院 先進理工学研究科 教務担当教務主任

1997年 日本薬学会奨励賞

2008年 第1回有機合成化学協会 アステラス製薬・生命有機化学賞

最近の研究内容



中田研究室では、科学研究費・新学術領域研究：反応集積化の合成化学(No. 2105) (H21～24年度(代表者・計画班)、H25年度(代表者・総括班))、基盤研究B (No. 25293003) (H25～27年度(代表者)) の支援を受け、**生物活性天然物の効率的な全合成を中心とする研究**を展開しています。

生物活性天然物の全合成研究

優れた抗癌剤であるタキソールなど、有用な生物活性を示す天然有機化合物(天然物)の効率的な全合成を研究しています。最近では、複雑な天然物の量的供給に繋がる「**反応集積化法**」の開発を進めており、生合成効率を超える短工程で原子効率の高い天然物の全合成を目指しています。

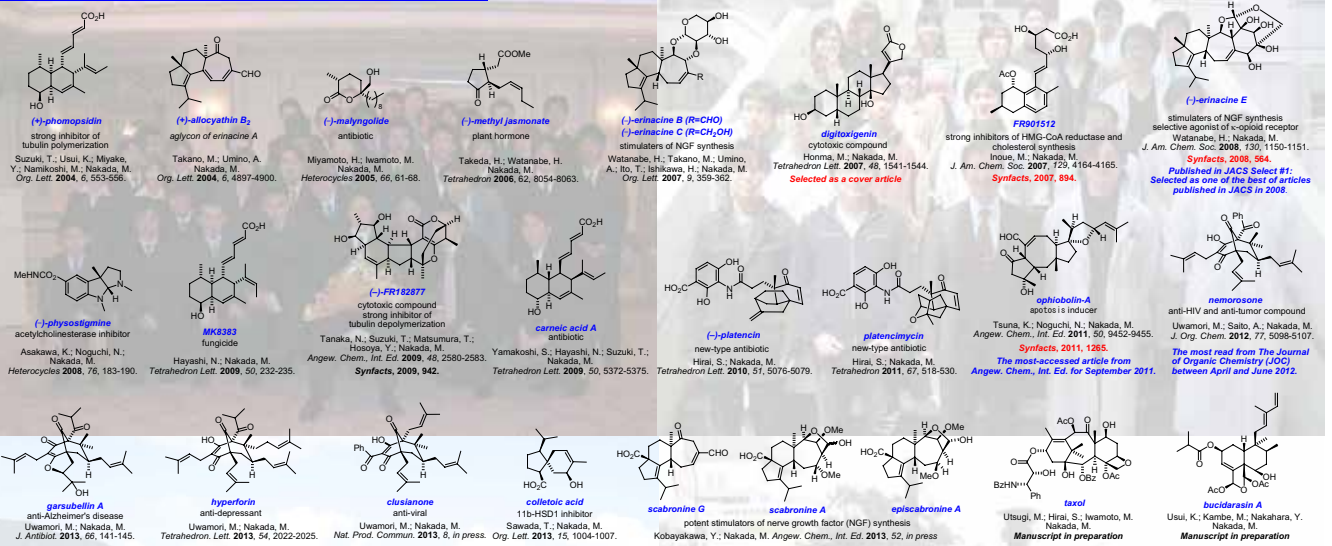
新反応・方法論の研究

より短工程・高効率な天然物の全合成を達成するためには、**新反応・方法論の創出**が不可欠です。例えば、複雑な構造を持つ生物活性天然物には多くの不斉炭素が含まれるため、その効率的構築に有効な不斉触媒反応の開発を研究しています。

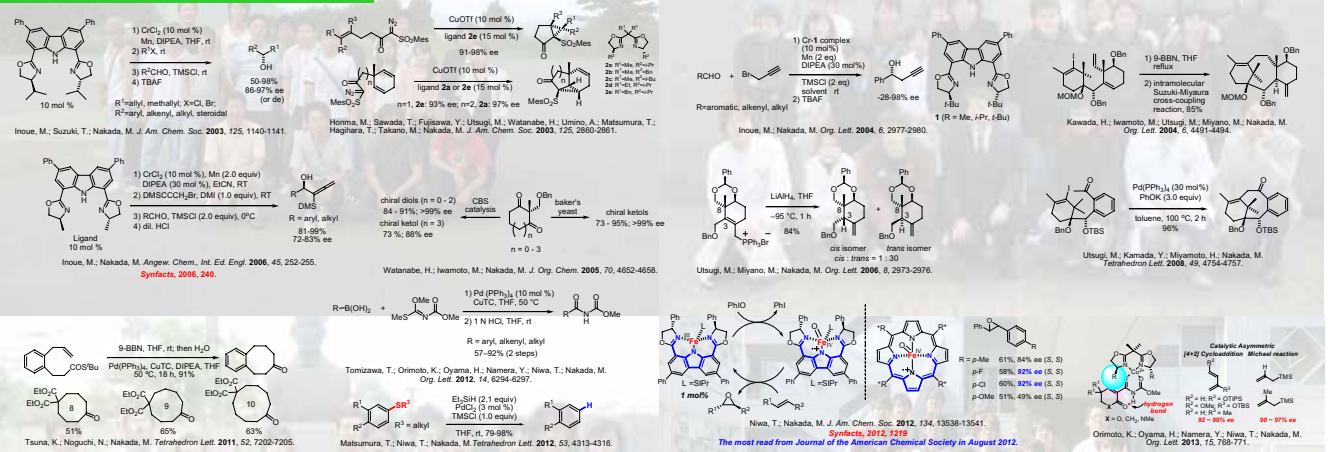
全合成を起点とする新物質の創製研究

有機合成化学の最大の強みは、**新物質の創製**です。例えば、生物活性天然物を原型とする医薬品や生命科学研究に活用できる**新規生物活性物質**の合成、不斉触媒反応に有効活用できる**新規不斉配位子**の設計・合成を研究しています。

生物活性天然物の全合成研究



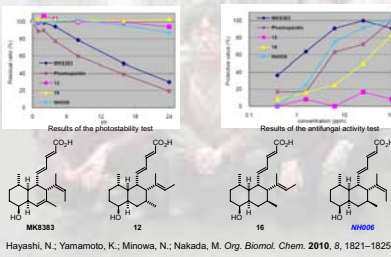
新反応・方法論の研究



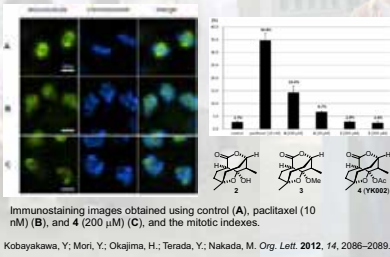
全合成を起点とする新物質の創製研究

中田研博士号取得者

Creation of A Photo-Stable Fungicide, NH006



Creation of A New Anti-Mitotic Agent, YK002



- 2004年度: 岩本 充広、鈴木 孝洋、高野 真史
 - 2006年度: 井上 雅大、武田 博之、本間 将博
 - 2007年度: 宇津木 雅之、渡邊 秀昭
 - 2008年度: 田中 奈津美、野口 直義
 - 2009年度: 阿部 正人、林 伸行
 - 2012年度: 上森 理弘、折本 浩平、澤田 貴史
- 網 和宏、平井 祥 **計17名**

中田研受賞者

田井 研二 2003年度早稲田大学理工学部化学科 卒論発表賞/本間 将博 早慶ワークショップ2004 ベストポスター賞/高野 真史 日本化学会第85春季年会 学生講演賞/井上 雅大 第52回有機金属化学討論会 ポスター賞/井上 雅大 日本化学会第86春季年会 学生講演賞/渡邊 秀昭 日本化学会 第88春季年会 学生講演賞/田中 奈津美 第3回ロレアル・ユネスコ女性科学者日本奨励賞/田中 奈津美 2008年度(第50回)小野梓記念賞(学術賞)/網 和宏 第2回キラルシンポジウム ベストポスター賞/網 和宏 第1回CSJフェスタ 優秀ポスター発表賞/上森 理弘 日本化学会第92春季年会 学生講演賞/丹羽 節 宇部興産 研究企画賞(2012年度(第25回)有機合成化学協会研究企画賞)/丹羽 節 第4回キラルシンポジウム・ベストポスター賞/平井 祥 日本化学会第93春季年会 学生講演賞/小早川 優 日本化学会第93春季年会 学生講演賞

中田研学生就職先

他大助教3名、武田薬品、第一三共、アステラス製薬、田辺三菱製薬、小野薬品工業、大正製薬、日本新薬、寿製薬、味の素製薬、大鵬薬品、イーザイ、大日本住友製薬、中外製薬、協和醗酵麒麟、シオノギ製薬、帝人ファーマ、興和、明治製菓、ファイザー製薬、日本農薬、住友化学、FULI FILM、宇部興産、三菱化学、大塚化学、信越化学、JX日鉱日石エネルギー株式会社、旭硝子、クラレ、日立化成、SAKATA INK、クレハ化学、東洋紡、特許庁、横須賀市役所



教員の略歴



1990年–1992年 早稲田大学理工学部化学科 助手
 1992年–1994年 シカゴ大学化学科 博士研究員
 1994年–1997年 理化学研究所 基礎科学特別研究員
 1997年–1998年 理化学研究所 協力研究員
 1998年–2001年 科学技術振興事業団 さきがけ研究21研究員
 1999年–2005年 明治大学 理工学部 工業化学科 助教授
 2005年–2007年 早稲田大学 理工学部 化学科 教授
 2007年–現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授

理工学術院 先進理工学部
 化学・生命化学科 教授
 鹿又 宣弘

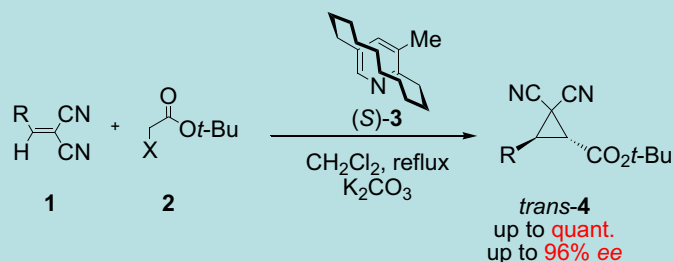
1997年 有機合成化学協会 研究企画賞(萬有製薬)
 2002年 有機合成化学協会 有機合成化学奨励賞

最近の研究内容

鹿又研究室では「新規機能性有機分子の設計, 合成, および反応性に関する研究」を総括研究課題とし, 有機化学的手法を用いて主に構造有機化学・複素環化学・生物有機化学の観点から研究を行っている. 面性キラリティーを持つシクロファン分子や補酵素NAD類似機能を持つ生体モデル分子, 天然物類似の生物活性機能を有する天然物アナログなど, 様々な機能性分子の合成と機能探索を研究対象としている.

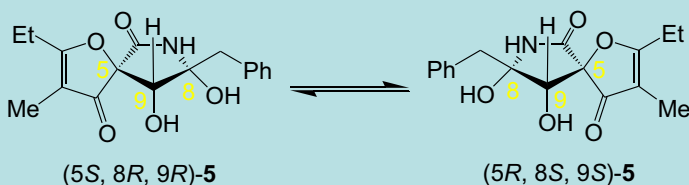
面不斉ピリジンを用いた触媒的不斉シクロプロパン化反応

面不斉ピリジン(S)-3を用いたピリジニウムイリド経由の触媒的不斉シクロプロパン化反応において, 高エナンチオ選択的に反応が進行し, *trans*-シクロプロパン4が最高100%収率, 96% eeで得られることを見いだした.



アザスピレンスピロ骨格のラセミ化

天然物アザスピレンと同じスピロ骨格を有するモデル分子5は, 天然物と同様に血管新生抑制作用を有することが明らかとなっている. 近年, 生理食塩水中で連続的な分子内retro-aldolおよびaldol 反応によって, 不斉中心が反転し, この分子のラセミ化が起きることを明らかにした.



主な研究例

- 面不斉シクロファン, ピリジノファンの新規合成法開発とその応用
- 面不斉ピリジニウムイリドによる不斉シクロプロパン化反応
- 面不斉ピリジンリガンドの合成研究
- シクロファン誘導体を用いた面性キラリティーの熱的制御に関する研究
- 触媒機能を指向した酸化還元型補酵素モデル反応の開発研究



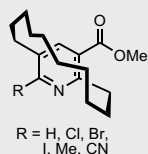
早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 有機化学部門 鹿又研究室（機能有機化学研究）

研究室の風景

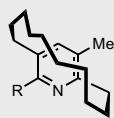


合成している主な化合物

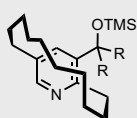
面不斉ピリジノファン



R = H, Cl, Br,
I, Me, CN

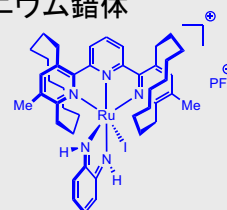
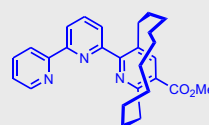
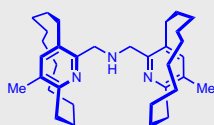


R = H, Br, Me,
CH₂OH, CN

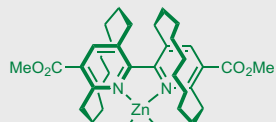
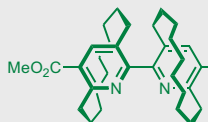


R = H, Me, Bu, Ph

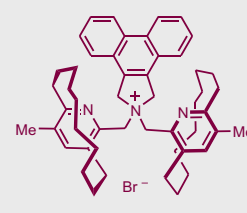
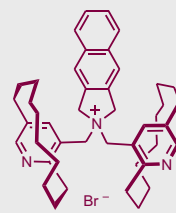
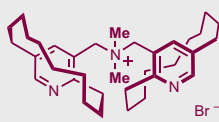
面不斉三座配位子と面不斉ルテニウム錯体



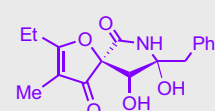
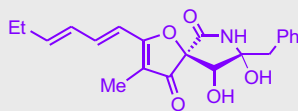
面不斉ビピリジン



相間移動触媒



アザスピレンとそのモデル化合物



研究室集合写真



2013年三大学合同セミナー（追分セミナーハウス）



2013年度研究室メンバー



教員の略歴



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授
柴田 高範

1994年4月-1995年3月 北里大学理学部化学科 助手(宮本研)
1995年4月-1999年3月 東京理科大学理学部応用化学科 助手(碓合研)
1999年4月-2003年3月 岡山大学理学部化学科 助教授
2001年7月-2001年10月 米国Harvard大学化学科 特別研究員(Corey研)
2003年4月-2006年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 助教授
2006年4月-2007年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 教授
2007年4月-現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授

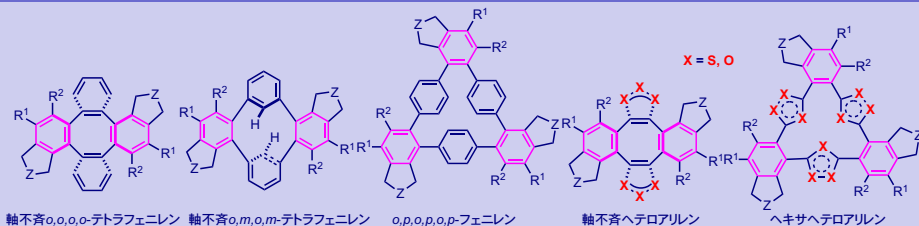
2005年 有機合成化学協会 奨励賞

最近の研究内容

柴田研究室の研究課題が、JST「低エネルギー、低環境負荷で持続可能なものづくりのための先導的な物質変換技術の創出」(Act-C)に採択されました。(研究期間:平成24年10月~平成30年3月)

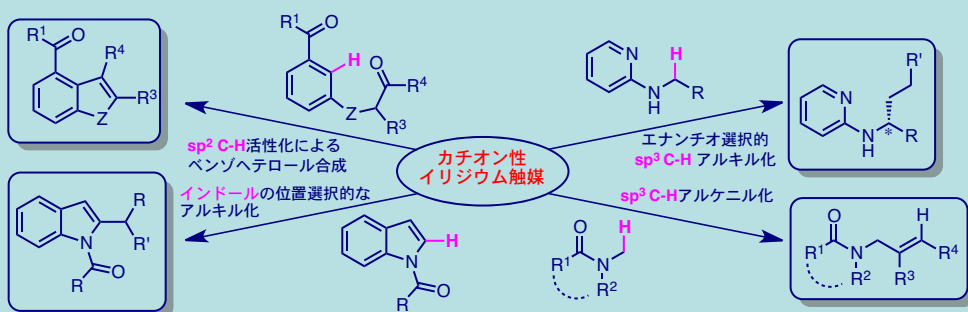
「分子間、分子内の連続的な付加環化反応による環状アリレン類の合成」

アルキンの三量化による芳香環形成とともに、軸不斉を有する環状化合物を合成する。連続反応により、大環状ポリフェニレン、ヘテロアリレン類の合成・評価を目指す。



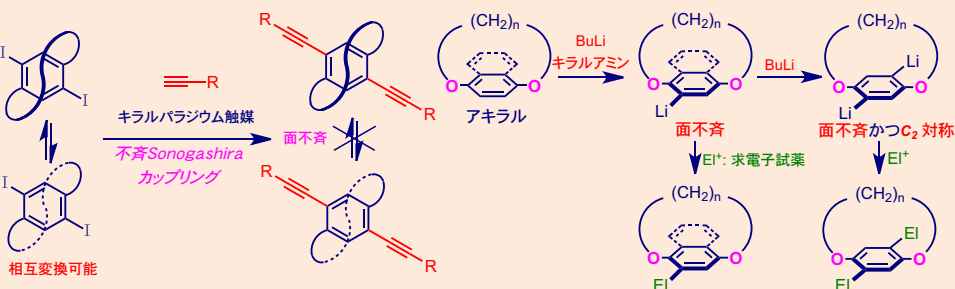
「イリジウム触媒を用いる不活性結合の活性化による高効率な合成変換法の開発」

不活性結合の直接的な官能基化は、事前に基質の活性化が不要な原理効率の高い理想的な合成変換である。我々は、カチオン性イリジウム触媒を用い、C-H結合の開裂を起点とする合成変換を達成した。



「面不斉パラシクロファン化合物のエナンチオ選択的合成」

芳香環のパラ位で鎖状構造が連結されたパラシクロファンは、面不斉を有する場合がある。Sonogashiraカップリングとオルトリチオ化という異なるアプローチでエナンチオ選択的不斉合成を達成した。



“Until Now” and “From Now”

Takanori Shibata Laboratory (2003-)

Department of Chemistry & Biochemistry, Schools of Advanced Science and Engineering,
Waseda University

～柴田研の歩み～

2003年
化学科 柴田高範研究室
発足



2005



2006



2007

2003年度
1期生

岩橋 紀未子
高見 京子
前川 俊輔
藤原 亮

2004年度
2期生

木村 洋平
瀬名 光一
木下 大輔
新井 良和
上野 康徳
黒川 博史
高野 大輔
竹林 智司
土釜 恭平

2005年度
3期生

垂見 光
藤原 大輔
河内 愛
神田 和正
田原 優樹
西沢 豪
松木(大塚) 麻依子

2006年度
4期生

桑田 祐輔
田村 耕平
中川 尚久
芳田 志穂
吉浪 雄亮

2007年度
5期生

・遠藤 恒平 助教着任
大友 麻由美
小川 美香
笠川 真
千羽 達也
長島 裕二郎
廣神 宗直



2008



(2005年ゼミ合宿, 鴨川セミナーハウスにて)

2008年 5周年



(2008年、柴田研5周年記念パーティにて)



2010



2009

2009年度
7期生

大久保 貴弘
浜田 大輔
平島 裕之
横山 裕也



(2008年ユニラブにて、柴田先生と研究室メンバー(当時))

2011年度
9期生

・竹林 智司 助手着任
濱中 理紗
石岡 孝文
高安 慧
高山 遼太郎
松尾 雄介



2011



2012

2012年度

・大谷 卓 助手着任

10期生

大嶋 祥也
峨家 愛美
静野 翼
湯澤 峻
笠 直人

2013年度
11期生

伊藤 守
神村 有里
染谷 聡
深井 実紅
松原 陸
若木 貴行



2013

To the Future...



2013年 10周年



早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 無機分析化学部門 石原研究室（無機反応化学研究）

教員の略歴



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授

石原 浩二

1984年4月–1988年3月 名古屋大学 理学部 化学科 助手
1985年8月–1986年8月 カルガリー大学 博士研究員
1988年4月–1990年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 専任講師
1990年4月–1995年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 助教授
1995年4月–2007年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 教授
1995年5月–1995年9月 ビクトリア大学訪問研究員
2007年4月–現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授

1988年 日本分析化学会 奨励賞
1992年4月–1994年3月 「ぶんせき」編集委員
1995年4月–1996年3月 日本分析化学会関東支部幹事
1996年4月–1997年3月 日本分析化学会関東支部常任幹事
2001年9月–2005年3月 「Analytical Sciences」編集委員
2005年4月–2013年3月 「Bull. Chem. Soc. Jpn.」編集委員

最近の研究内容

多くの化学反応は溶液中で起こる。本研究室では、特に溶液中で起こる無機反応に注目し、反応を溶液化学的に定量的に扱うことにより、反応のメカニズムの解明を行っている。また、詳細な反応機構の研究に基づき、糖類やホウ素の定量方法の開発を行っている。

【主な研究テーマ】

- (1) 白金(III)二核錯体のオレフィン類等との反応に関する反応機構論的研究
- (2) 白金(III)三核錯体の合成と反応
- (3) ホウ素および糖類の定量の高感度化のための溶液化学的基礎研究
- (4) ホウ素および糖類の高感度定量のための発光性金属錯体試薬の開発

【研究内容】

① 特異な反応性を有する、異常酸化状態の白金(III)錯体の化学を明らかにするために、白金(III)二核錯体の反応性および反応機構の解明を行っている。また、新規な白金(III)三核錯体の合成を試みている。

② ホウ酸の一置換体であるポロン酸($\text{RB}(\text{OH})_2$)は、糖類を含む多くのジオール類と可逆的に反応し、安定なキレート化合物を生成する。この反応は、無機分析化学におけるホウ素の定量法や、有機・生命化学分野における糖類検出のためのポロン酸誘導体センサー(Chemosensor)の反応に用いられており、今や多くの専門書に記載されている。特に、後者のChemosensorの開発は今日でも活発に行われているが、これらの開発研究は、センサーの高感度化に向けた検出部位周辺の分子設計に主眼が置かれているため、より本質的な課題である「ポロン酸と糖との反応をいかに効率よく進行させるか？」といった反応機構論に基づく研究は全く行われていない。そのため、本研究室では以下の研究を行うことにより、溶液化学的に適切な反応機構に基づく糖類の高感度分析法の確立を試みる。また、同時にホウ素の高感度分析法の確立と、中性子捕捉療法用の新規ポロン酸薬剤の開発を試みる。

- (1) ポロン酸および糖の反応活性種の特定と反応を支配する因子の解明
- (2) (1)の結果に基づく、糖類との反応性の高いポロン酸配位子や、ジオール部位を有する配位子を有する高発光性 Ir^{III} 、 Ru^{II} 、および Pt^{IV} 錯体の開発
- (3) (2)の高発光性金属錯体によるホウ素および糖類の高感度定量とその定量条件の最適化

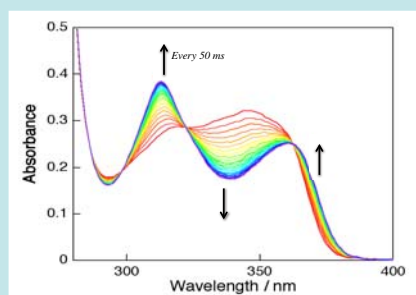
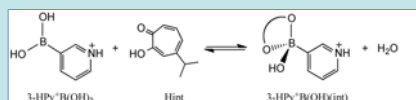
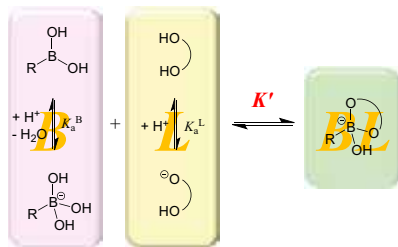


Fig. 1. Time-resolved UV-Vis spectra (taken every 10 ms) for the reaction of 3-HPy⁺B(OH)₂ with Hipt in strongly acidic aqueous solution at $I = 1.0 \text{ M}$ and 25°C . $C_{\text{Hipt}} = 0.048 \text{ mM}$, $C_{\text{B}} = 8.78 \text{ mM}$ and $[\text{H}^+] = 1.00 \text{ M}$.
J. Phys. Org. Chem., 25, 760=768 (2012).



Much attention has been paid to the complexation reactions of boronic acids (RB(OH)₂) with diols including sugars in the areas of molecular design of saccharide recognition as well as boron neutron capture therapy (BNCT). The conditional formation constants (*K'*) depending on the pH (Scheme 1-1) becomes maximum at pH = (p*K*_a^B + p*K*_a^L) / 2 (Eq. 1).

Scheme 1-1. Complexation of boronic acids with diols



Conditional formation constant (*K'*)

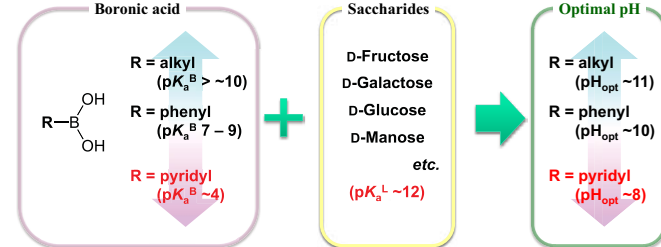
$$K' = \frac{[BL]}{[B][L]} = \frac{K_1}{[H^+](1 + K_a^B/[H^+])(1 + K_a^L/[H^+])}$$

$$\left(K_a^B = \frac{[RB(OH)]_2[H^+]}{[RB(OH)_2]}, K_a^L = \frac{[HL][H^+]}{[H_2L]}, K_1 = \frac{[BL][H^+]}{[RB(OH)_2][H_2L]} \right)$$

✓ Optimal pH condition (pH_{opt})

$$\frac{dK'}{d[H^+]} = 0 \Rightarrow \text{pH}_{\text{opt}} = \frac{\text{p}K_a^B + \text{p}K_a^L}{2} \quad (\text{Eq. 1})$$

Scheme 1-2. Predicted optimal pH



Equation 1 suggests that the boronic acids having low p*K*_a^B would be preferable for the complexation with saccharides (p*K*_a^L > 12) at neutral pH (Scheme 1-2). In this study we carried out the detailed equilibrium and kinetic analyses to get the fundamental information on the properties of *N*-substituted pyridinium boronic acids, *N*-RPy⁺B(OH)₂, bearing strong acidity [1].

[1] S. Iwatsuki, et al., *J. Phys. Org. Chem.*, 2012, 25, 760.

Acid dissociation constants of pyridylboronic acid derivatives

(Determined spectrophotometrically at *I* = 0.10 M (NaCl) and *T* = 25°C)

Scheme 2-1. Acid dissociation of the *N*-substituted pyridinium boronic acids

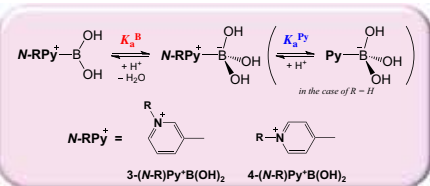


Table 1-1. The p*K*_a values of the *N*-substituted pyridinium boronic acids^a

Boronic acid	p <i>K</i> _a ^B	p <i>K</i> _a ^{Py}
3-HPy ⁺ B(OH) ₂	4.40±0.05	8.27±0.05
3-(N-CH ₃)Py ⁺ B(OH) ₂	4.40±0.03	-
3-(N-C ₂ H ₅)Py ⁺ B(OH) ₂	4.45±0.04	-
3-(N-C ₄ H ₉)Py ⁺ B(OH) ₂	4.42±0.04	-
3-(N-C ₆ H ₁₁)Py ⁺ B(OH) ₂	4.43±0.02	-
3-(N-C ₈ H ₁₇)Py ⁺ B(OH) ₂	4.36±0.05	-
4-HPy ⁺ B(OH) ₂	4.00±0.01	8.04±0.03
4-(N-CH ₃)Py ⁺ B(OH) ₂	3.96±0.01	-

^a The p*K*_a^B was assigned on the basis of the ¹¹B NMR data.

Scheme 2-2. Acid dissociation of the *C*-substituted pyridylboronic acids

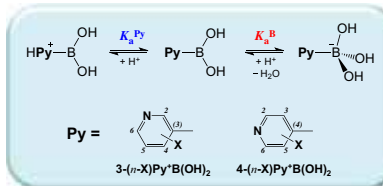


Table 1-2. The p*K*_a values of the *C*-substituted pyridylboronic acids^a

Boronic acid	p <i>K</i> _a ^{Py}	p <i>K</i> _a ^B
3-(6-F)PyB(OH) ₂	n.d.	7.10±0.02
3-(2-F)PyB(OH) ₂	n.d.	6.33±0.10
3-(2-Cl)PyB(OH) ₂	< 1	6.55±0.01
3-(5-Br)PyB(OH) ₂	3.04±0.02	6.47±0.03
3-(6-CH ₃ O)PyB(OH) ₂	3.30±0.01	7.99±0.01
4-(6-Cl)PyB(OH) ₂	< 1	5.66±0.02

^a The p*K*_a^B was assigned on the basis of the ¹¹B NMR data.

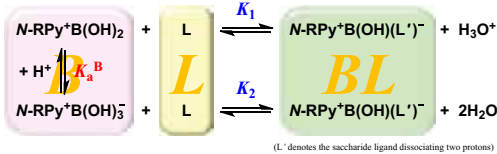
✓ Acidities of the boron center and the pyridinium moiety in HPy⁺B(OH)₂ are p*K*_a^B < p*K*_a^{Py}.
✓ Introduction of *N*-substituent causes little influence on the acidity of boron center.

✓ Introduction of a substituent into the pyridine-*C* atom reverses the order of p*K*_a values, i.e., p*K*_a^B > p*K*_a^{Py}.
✓ The acidities of the boron centers in *C*-substituted pyridylboronic acids are as weak as those of phenylboronic acid derivatives.

Acidities of the *N*-substituted pyridinium boronic acids (*N*-RPy⁺B(OH)₂), p*K*_a^B ~4 are much higher than those of phenylboronic acid derivatives (p*K*_a^B 7-9)

Equilibrium analyses for the complexation reaction of *N*-RPy⁺B(OH)₂ with saccharides (*L*) in aqueous solution

Scheme 2. The reaction of *N*-RPy⁺B(OH)₂ with saccharide



Spectrophotometric titration

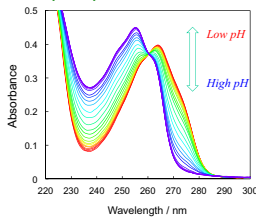


Fig. 1. Absorption spectra of the reaction mixture of 4-(N-CH₃)Py⁺B(OH)₂ (OH)₂ and D-fructose at various pHs. C_B = 0.1 mM, C_L = 5.0 mM, *I* = 0.1 M and *T* = 25°C.

Table 2. Equilibrium constants for the reaction of *N*-RPy⁺B(OH)₂ with saccharides at *I* = 0.10 M (NaCl) and *T* = 25°C

Saccharide	3-HPy ⁺ B(OH) ₂ , p <i>K</i> _a ^B = 4.40	3-(N-CH ₃)Py ⁺ B(OH) ₂ , p <i>K</i> _a ^B = 4.40	4-HPy ⁺ B(OH) ₂ , p <i>K</i> _a ^B = 4.00	4-(N-CH ₃)Py ⁺ B(OH) ₂ , p <i>K</i> _a ^B = 3.96	PhB(OH) ₂ , p <i>K</i> _a ^B = 8.72
	<i>K</i> ₁				
D-Fructose	1.9×10 ⁻²	1.5×10 ⁻²	4.7×10 ⁻²	6.5×10 ⁻²	-
D-Mannose	1.2×10 ⁻³	1.2×10 ⁻³	3.0×10 ⁻³	4.3×10 ⁻³	-
D-Galactose	7.9×10 ⁻⁴	1.2×10 ⁻³	3.0×10 ⁻³	4.3×10 ⁻³	-
D-Glucose	5.3×10 ⁻⁴	8.0×10 ⁻⁴	2.0×10 ⁻³	3.0×10 ⁻³	-
	<i>K'</i> at pH 7 / M ⁻¹ (<i>K</i> ₁ / M ⁻¹)				
D-Fructose	480 (480)	370 (370)	480 (480)	650 (650)	81 (4400) ^a
D-Mannose	30 (30)	30 (30)	30 (30)	43 (43)	3.2 (170) ^a
D-Galactose	20 (20)	30 (30)	30 (30)	43 (43)	5.2 (280) ^a
D-Glucose	13 (13)	20 (20)	20 (20)	30 (30)	2.1 (110) ^a

^a The *K*₁ values have been reported by J. P. Lorand and J. O. Edwards (*J. Org. Chem.* 1959, 24, 769), and the *K'* values were calculated by Eq. 3.

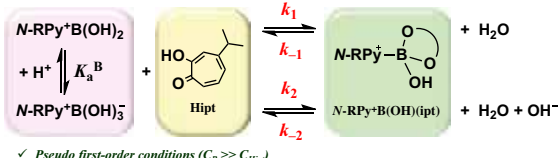
✓ All boronic acids are fructose-selective.
✓ The *K*₁ value becomes maximum at pH 6-10 due to the strong acidity of *N*-RPy⁺B(OH)₂.
✓ The *K'* value at pH 7 for the reaction of 4-(N-CH₃)Py⁺B(OH)₂ with D-fructose (*K'* = 650 M⁻¹) is the highest among *N*-RPy⁺B(OH)₂ derivatives.
✓ The *K'* values at pH 7 for the reactions of *N*-RPy⁺B(OH)₂ (R = H, CH₃) with D-fructose (*K'* = 370-650 M⁻¹) are at least 4-times larger than that of PhB(OH)₂ (*K'* = 81 M⁻¹).

N-Substituted pyridinium boronic acids *N*-RPy⁺B(OH)₂ can act as a fructose sensor at neutral pH

Kinetic analysis for the complexation reaction of *N*-RPy⁺B(OH)₂ with 4-isopropyltropolone (Hipt) in acidic aqueous solution

✓ Since the detailed mechanism of saccharide recognition with *N*-RPy⁺B(OH)₂ is still unclear due to its complicated reaction kinetics, the kinetic study was performed on the complexation reactions of *N*-RPy⁺B(OH)₂ with an oxygen-donor bidentate ligand, 4-isopropyltropolone (Hipt).

Scheme 3. Reaction paths at pH ~4



✓ Pseudo first-order conditions (C_B >> C_{Hipt})

Absorption spectral change with time

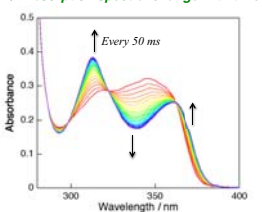


Fig. 2. Time-resolved UV-Vis spectra for the reaction of 3-(N-CH₃)Py⁺B(OH)₂ with Hipt at *I* = 1.0 M (NaClO₄) and *T* = 25°C. C_{Hipt} = 0.05 mM, C_B = 1.81 mM, pH = 4.53.

Kinetic analysis under pseudo first-order conditions (C_B >> C_{Hipt})

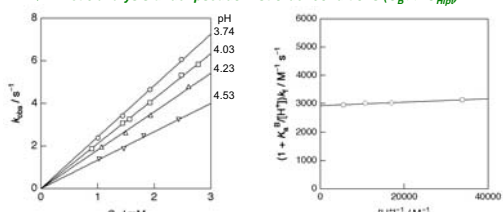


Fig. 3. Dependence of *k*_{obs} on C_B at various pH for the reaction of 3-(N-CH₃)Py⁺B(OH)₂ with Hipt.

Kinetic analysis at C_B >> C_{Hipt}

✓ Pseudo first-order rate law: $\frac{d[N-RPy^+B(OH)(Hipt)]}{dt} = k_{\text{obs}}[Hipt]$
✓ The *k*_{obs} expression from Scheme 3 and Fig. 3: $k_{\text{obs}} = \frac{k_1 + k_2 K_a^B/[H^+]}{1 + K_a^B/[H^+] + K_a^L/[H^+]}$ C_B = *k*₁C_B (k₂ slope at a given pH in Fig. 3)
∴ (1 + K_a^B[H⁺])k₁ = k₂K_a^B[H⁺] → (1 + K_a^B[H⁺])k₁ vs. 1/[H⁺] plot (Fig. 4)
✓ Reverse reaction (k₋₁ and k₋₂ in Scheme 3) is negligible (zero intercept in Fig. 3).

Fig. 4. The plot of (1 + K_a^B[H⁺])k₁ against 1/[H⁺] for the reaction of 3-(N-CH₃)Py⁺B(OH)₂ with Hipt.

Reactivity of trigonal boronic acids toward Hipt

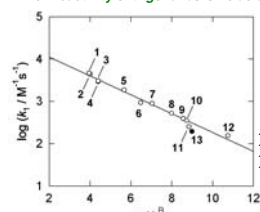


Fig. 5. Linear relationship between log *k*₁ and p*K*_a^B for the reaction of boronic acids with Hipt. * H. Ito, et al., *Inorg. Chim. Acta* 2003, 344, 28.

Table 3. Rate constants for the reaction of boronic acids and the boronate ions with Hipt at *I* = 1.0 M (NaClO₄) and *T* = 25°C

Boronic acid	p <i>K</i> _a ^B	Boronic acid path <i>k</i> ₁ / M ⁻¹ s ⁻¹	Boronate path <i>k</i> ₂ / M ⁻¹ s ⁻¹
3-HPy ⁺ B(OH) ₂	4.40	3020	100
3-(N-CH ₃)Py ⁺ B(OH) ₂	4.40	2930	160
4-HPy ⁺ B(OH) ₂	4.00	4570	- ^a
4-(N-CH ₃)Py ⁺ B(OH) ₂	3.96	4730	84

^a Kinetically negligible (*k*₂ = 0).

✓ All *N*-RPy⁺B(OH)₂ (R = H, CH₃) react with Hipt faster than their boronate ions *N*-RPy⁺B(OH)₂⁻, which is consistent with our recent results [1-5].
✓ The linear relationship between log *k*₁ and p*K*_a^B indicates that the complexation reaction proceeds with a similar mechanism.
✓ The *k*₁ values for the boronic acids with low p*K*_a^B are larger than those with high p*K*_a^B.

[2] S. Iwatsuki, et al., *Inorg. Chem.*, 2007, 46, 354.
[3] C. Miyamoto, et al., *Inorg. Chem.*, 2008, 47, 1417.
[4] E. Watanabe, et al., *Inorg. Chem. Commun.*, 2010, 13, 1406.
[5] E. Watanabe, et al., *Dalton Trans.*, 2013, 42, 8446.

Strongly acidic boronic acids such as *N*-RPy⁺B(OH)₂ are kinetically favorable for complexation with O-donor bidentate ligands such as Hipt and (probably) saccharides

✓ The boron centers of the *N*-substituted pyridinium boronic acids, 3- and 4-(*N*-R)Py⁺B(OH)₂ (R = H, CH₃, C₂H₅, C₄H₉, C₆H₁₁, C₈H₁₇), exhibited much stronger acidities than those of phenylboronic acid derivatives!
✓ Introduction of alkyl groups into the pyridine-*N* atoms had no influence on the acidities of the boron centers, whereas introduction of the substituents into the pyridine-*C* atoms drastically decreased the boron acidities!
✓ The equilibrium analyses of the complexation of (*N*-R)Py⁺B(OH)₂ with saccharides predict that *N*-RPy⁺B(OH)₂, bearing strong acidity can act as an effective fructose sensor at neutral pH!
✓ The kinetic and equilibrium analyses in the present study suggest that strongly acidic boronic acids such as *N*-RPy⁺B(OH)₂ are kinetically as well as thermodynamically suitable for saccharide recognition!



教員の略歴



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授

山口 正

1990年3月東北大学大学院 理学研究科 博士課程後期修了
1990年4月-1995年3月 東北大学 理学部 化学科 助手
1995年4月-2001年11月 東北大学大学院 理学研究科 助手
2001年12月-2004年3月 東北大学大学院 理学研究科 助教授
2001年-2005年 科学技術振興事業団 さきがけ研究員 兼務
2004年4月-2007年3月 早稲田大学 理工学部 化学科 助教授
2007年4月-現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授

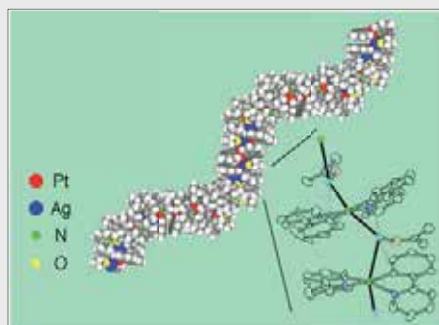
研究内容

【研究一覧】

- (1) 新規の金属-金属結合を有する錯体の構築
- (2) 混合原子価錯体の合成と分子内電子移動速度の決定
- (3) 新規機能性錯体の合成

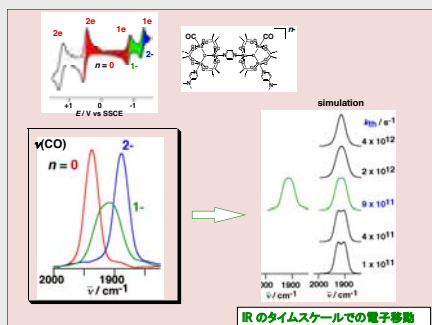
【研究内容】

我々の研究室では金属錯体、特に集積型金属錯体にその新規合成および機能開発についての研究を行っている。複数の金属イオンが集まって構成される集積型金属錯体は、金属イオン間の相互作用や共同効果により単核錯体には無い新しい性質が発現することが期待でき、その中には興味深い機能を示すものも知られている。新規の集積型錯体を構築する際にはその骨格形成法が重要となってくる。我々の研究室では、新規のタイプの金属-金属間結合である供与結合型金属-金属間を用いて、種々の異種金属多核錯体を合成し、その構造や性質を調べている。また、多核化により発現する混合原子価状態についても研究を行っている。特にその分子内電子移動速度を赤外吸収スペクトル線形の解析により求める手法は、従来の間接的手法に比べより直接的に電子移動速度を決定できる。さらに、これらの錯体の中には発光性を示す錯体や電解触媒として働く錯体などもありこれらの機能性についても研究を行っている。



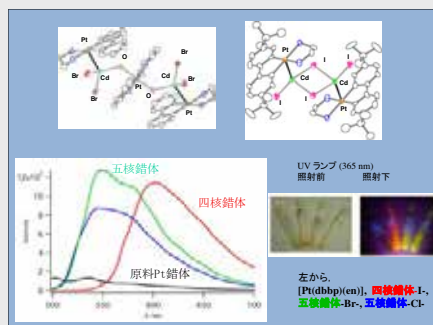
供与結合型Pt-Ag結合を有する一次元鎖錯体

強い配位子場下にあるPt錯体は強い供与結合型の金属-金属間結合を形成しやすい。炭素配位のPt錯体を用いてAg⁺と結合を形成させることにより一次元鎖錯体を合成することができた。



混合原子価状態の分子内電子移動速度の決定

強い相互作用を示す混合原子価錯体における分子内電子移動速度は非常に速くps程度になり、赤外線吸収スペクトルはブロードな一本のスペクトルとなる。その線形を解析することにより電子移動速度を決定することができる。



発光性を示すPt-Cd多核錯体

供与結合型白金-金属を持つ錯体は、そのM-M (あるいはMML) 遷移が許容となり、適当な失活が無い場合には、Ptの重原子効果も手伝って強い発光を示す。上のPt-Cd錯体は固体状態で原料のPt錯体に比べ強いリン光を示す。



研究室の歴史

我々の研究室は、2004年4月より教員1名、博士研究員1名、学部4年生4名、受託院生2名の計8名により始まった。初年度は実験室も半分のスペースでありみんなで協力し合って研究を進めていた。その後コンスタントに配属され、大学院進学率も高いとは言えないものの、現在学部45名、修士課程21名、博士課程1名の卒業生を輩出している。今年度は修士2年3名、修士1年2名、学部4年5名の計10名の学生が在籍している。

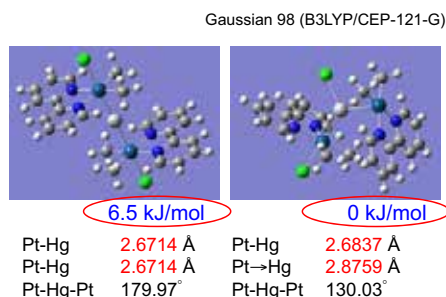
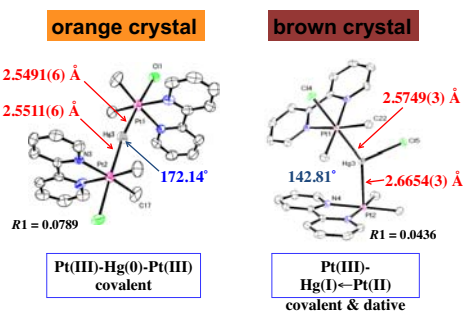
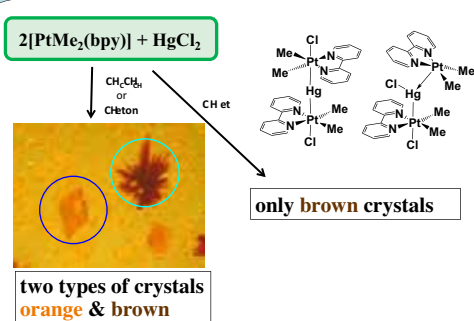


歓送迎会 (2013年3月) 現員+昨年度卒業生

最近の研究内容

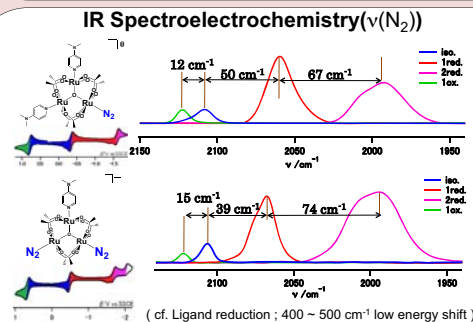
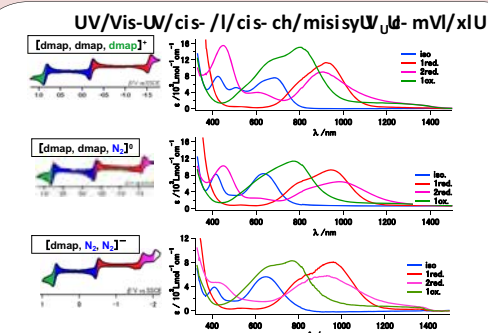
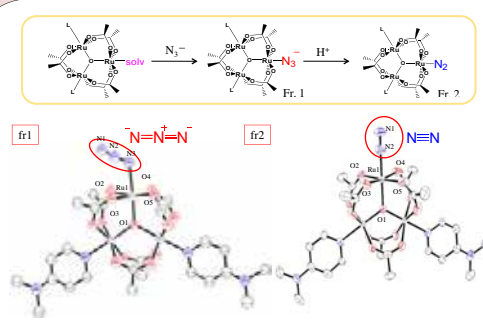
金属-金属間結合の種類が異なることによる異性体

2等量のPt(II)錯体とHg(II)錯体から合成されるPt₂Hg三核錯体は共有結合を2つ有する“Pt(III)-Hg(0)-Pt(III)錯体”と供与結合型と共有結合型の金属-金属間結合を有する“Pt(II)→Hg(I)-Pt(III)錯体”となり得る。適切な配位子を選択すれば両方の異性体を得られる。



N₂を配位子として持つ錯体

Ru三核錯体にN₂が配位した錯体を合成したところ、骨格との酸化還元を伴い、N₂が“N₂⁻”として配位していることが明らかになった。N₂錯体は窒素還元反応の触媒として期待されており、空気中で“N₂⁻”状態が安定であるこの錯体は窒素還元触媒として期待できる。





教員の略歴



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授

寺田泰比古

1989年-大阪大学微生物病研究所・日本学術振興会特別研究員
1991年-科学技術振興事業団(ERATO)研究員(岡山プロジェクト)
1997年-Harvard University, Dept. of Molecular & Cellular Biology,
Visiting Scientist
2000年-University of Minnesota, Dept. of Genetics, Cell Biology
& Development, Research Associate
2002年-University of Minnesota, Dept. of Genetics, Cell Biology
& Development, Associate Professor
2008年-現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授

最近の研究内容

「動物細胞のセントロメア領域における張力センサーの機構解明」

酵母からヒトに至るまで、進化上高度に保存されているAurora-Bキナーゼを世界で最初に発見し、Aurora-B、PP2AとSETと呼ばれるタンパク質が姉妹染色体間にかかる張力のセンサーとして機能していることを解明した。また、Aurora-Bの機能の低下が染色体異常を誘発し、癌化の原因になっていることを明らかにした。さらに、Aurora-Bが抗がん剤の分子標的となることを発見し、Aurora-Bの阻害剤は、副作用の少ない抗がん剤として、臨床の現場で使用されるまで来ている。

「動物細胞における新規の遺伝子ライブラリーの開発」

20年以上に亘って、動物細胞を用いた発現クローニングを目的とした遺伝子ライブラリーの開発と、Cell-based Screening Assayを確立し、これまで機能が不明であった多くの遺伝子のスクリーニングを行ってきた。さらに、細胞への高効率の遺伝子導入と、細胞に安定に遺伝子が保持されるような新型遺伝子ライブラリーを開発した。また、 10^7 個以上の自然界に存在しない配列を持つ、ランダムペプチドライブラリーを作製し、培養細胞に遺伝子ライブラリーを導入し、生理活性をもつ新規ペプチドの単離を行っている。



抗がん効果のある生理活性物質の探索や老化を制御する物質の探索

「中心体機能の解明から染色体の分解制御を解明する」

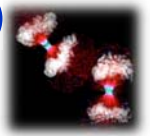
中心体は、複製された染色体を均等分配する上で必要な紡錘体形成の重要な細胞小器官であり、微小管中心とも呼ばれている。中心体の複製機構と紡錘体形成の機構を解明することで、新たな抗がん剤の分子標的などを目的としている。

その他の研究例

- 新規の医薬品のリード化合物の探索: 独自に開発したCell-based Screening Assayを用いて、化合物ライブラリーから生理活性物質を探索する。
- ワールブルグ効果の違いを利用した、エネルギー代謝経路の変換を標的とする新規抗がん剤の開発
- エピジェネティック制御と細胞機能



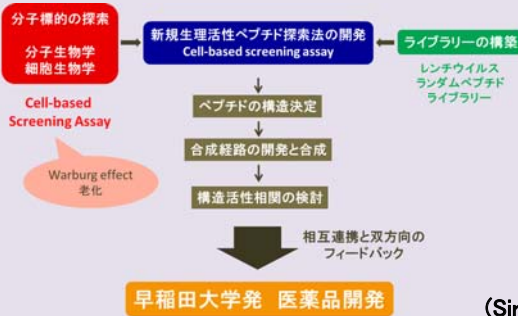
早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 生命化学部門 寺田泰比古研究室 (分子生物学研究)



研究紹介

当研究室では、細胞周期制御機構の解明を目的とし、4つのチームに分かれて研究を行っています。

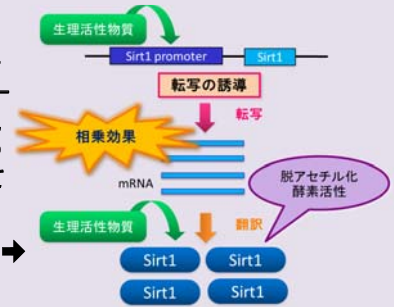
Libraryチーム がんや老化を制御する新規の生理活性物質の探索



研究概要

1) ヒト培養細胞を用いたCell-based Screening Assay法の確立、2) レンチウイルスランダムペプチドライブラリーを用いたがんや老化を制御する新規の分子を探索により早稲田大学発の薬品開発につなげることを目的としている。

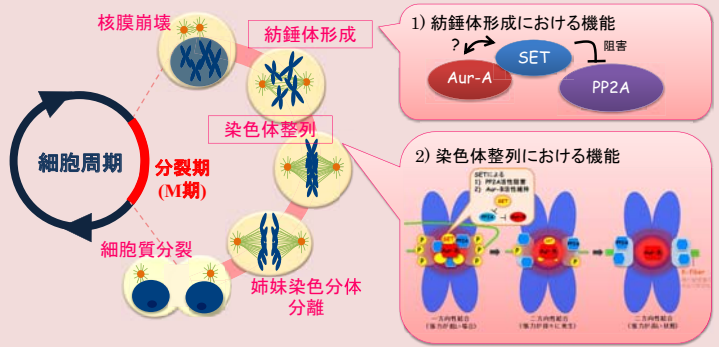
Cell-based Screening Assay →
(Sirt1 promoterを活性化する物質の探索例)



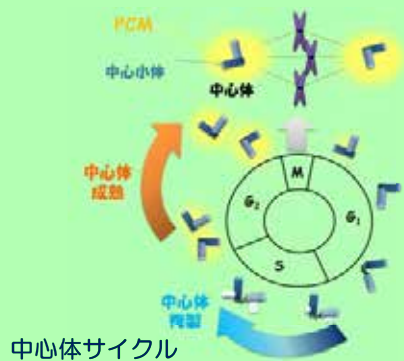
Aurora・SETチーム 紡錘体形成および染色体整列の分子機構の解明

細胞増殖には、染色体の正確な複製と分離が不可欠である。分裂期には、様々な過程を経て二極の紡錘体が形成され、姉妹染色分体の分離が一斉に引き起こされる。これらの機構は重要な生理的機能だけでなく、抗がん剤の分子標的ともなることから非常に注目を集めている。

我々は以前、紡錘体形成で中心的な役割を担う分裂期リン酸化酵素Aurora-Aと結合するタンパク質として、脱リン酸化酵素PP2Aの阻害タンパク質であるSETを同定し、SETがさらに染色体整列にも関わることを見いだした。本研究では、SETの分裂期における機能を解析することで紡錘体形成や染色体整列における詳細な分子機構を明らかにすることを目的としている。



中心体チーム 中心体の複製機構、成熟機構の解明



研究概要

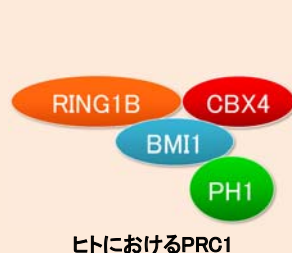
質量分析法による
網羅的プロテオミック解析

新規中心体タンパク質の
同定、機能解析

中心体の機構および機能解明
中心体異常に伴う疾患治療への応用

中心体とは、一組の中心小体とそれを取り巻く中心小体周辺物質(PCM)により構成される細胞小器官である。これまで、中心体の異常によって引き起こされる疾患が多数報告されているが、中心体の機構および機能には未知の部分が多い。そのため、我々は、中心体の未知の部分明らかにする目的で、中心体の複製および成熟過程に注目し、新規タンパク質の探索から、その詳細な分子機構を明らかにする。

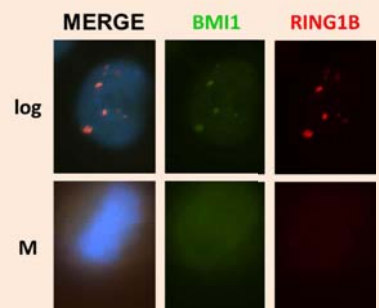
クロマチンチーム クロマチン制御機構の解明



ヒトにおけるPRC1

当チームでは、遺伝子の発現制御に深く関わるクロマチン構造及びそれを制御するタンパク質を対象に研究をしている。

PRC1 (Polycomb Repressive Complex1) はハエからヒトに至るまで保存されたタンパク質複合体であり、エピジェネティックな遺伝子発現の抑制を行うことで知られる。特に発生・細胞分化の際に鍵となる遺伝子発現の調整を行い、その染色体上での配置転換が重要であるということが近年の幹細胞を用いた研究から明らかになってきた。培養細胞の分裂期に観察される「PRC1の染色体からの解離・再集合」の機構や意義を研究することで、この細胞の分化制御に繋がる知見が得られると考え、研究を行っている。



細胞周期依存的なPRC1の挙動



教員の略歴



理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授

小出 隆規

- 1994年4月–1995年11月 持田製薬(株) 研究員
- 1995年12月–1996年10月 Joslin Diabetes Center (Boston) 研究員
- 1996年10月–1999年9月 京都大学 再生医科学研究所 研究員
- 1999年10月–2000年12月 徳島大学工学部 生物工学科 助手
- 2001年1月–2004年3月 同 講師
- 2004年4月–2006年10月 新潟薬科大学 薬学部 助教授
- 2006年11月–2007年3月 同 教授
- 2007年4月–現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科教授

- 2008年11月–2013年3月 芝浦工業大学 バイオトランスポート研究センター 客員教授(兼任)
- 2011年11月–2012年3月 大阪大学 蛋白質研究所 客員教授(兼任)

- 2006年 日本ペプチド学会 奨励賞

最近の研究内容

「コラーゲンを中心としたケミカルバイオロジー」

コラーゲンは、化粧品や健康食品(!?)として有名ですが、実は私たちの体の中でもっとも多量に存在する、もっともありふれたタンパク質です。その一方で、コラーゲンは線維を形成する難溶性の巨大分子で、特殊な構造形成過程と異常アミノ酸を含む、かなり特殊なタンパク質であるともいえます。私たちは、主にコラーゲンの3重らせん構造を模倣する化学合成ペプチドを用いた構成的なアプローチから、タンパク質としてのコラーゲンの本質を明らかにするとともに、コラーゲンの特異な性質や機能を再生医学や薬学の分野に応用しようとしています。

おもな研究プロジェクト

- コラーゲンの機能: コラーゲン結合タンパク質を手掛かりとした研究
- コラーゲンの構造形成過程の解明: 3重らせん形成を助ける分子シャペロン、コラーゲンの自己集合による線維化
- コラーゲンあるいはコラーゲン結合性生体分子を標的にした創薬研究
- 人工コラーゲンとして再生医学に利用できる、自己集合ペプチド超分子の創製
- コラーゲンを換骨奪胎して薬をつくる: あたらしいペプチド薬物のscaffoldとしてのコラーゲン様3重らせんの可能性

代表的論文

- C. M. Yamazaki, I. Nakase, H. Endo, S. Kishimoto, Y. Mashiyama, R. Masuda, S. Futaki, T. Koide, "Collagen-like Cell-penetrating Peptides" *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* in press
- H. Yasui, C. M. Yamazaki, H. Nose, C. Awada, T. Takao, T. Koide, "Potential of collagen-like triple helical peptides as drug carriers: Their in vivo distribution, metabolism and excretion profiles in rodents" *Biopolymers (Peptide Science)* in press
- S. T. L. Philominathan, T. Koide, O. Matsushita, J. Sakon, "Bacterial collagen-binding domain targets under-twisted regions of collagen" *Protein Sci.* **21**, 1554 (2012)
- S. Matsui, C. M. Yamazaki, T. Koide, "Surface-modifiable free-floating films formed by multiway connection of collagen-like triple-helical peptides" *Macromol. Rapid Commun.* **33**, 911 (2012)
- A. Sekiya, H. Okano-Kosugi, C.M. Yamazaki, T. Koide, "Pigment epithelium-derived factor (PEDF) shares binding sites in collagen with heparin/heparan sulfate proteoglycans" *J. Biol. Chem.* **286**, 26364 (2011)
- C. M. Yamazaki, Y. Kadoya, K. Hozumi, H. Okano-Kosugi, S. Asada, K. Kitagawa, M. Nomizu, T. Koide, "A collagen-mimetic triple helical supramolecule that evokes integrin-dependent cell responses" *Biomaterials* **31**, 1925 (2010)
- H. Okano-Kosugi, O. Matsushita, S. Asada, A. B. Herr, K. Kitagawa, T. Koide, "Development of a high-throughput screening system for the compounds that inhibit collagen-protein interactions" *Anal. Biochem.* **394**, 125 (2009)



～ メンバー ～



小出 隆規 教授



教授	小出 隆規
助手	増田 亮
M1	市瀬 慎一郎
M1	フランキー ヤウ
M1	平 和馬
B6	林 琴
B5	龍 和也
B5	坂本 匠
B4	神村 英理
B4	橋本 永一
B4	工藤 正和
B4	名取 健太郎

～ コラーゲンを基盤とした研究 ～

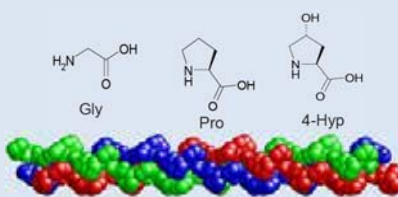
コラーゲンは脊椎動物のタンパク質の約30%を占め、細胞の接着、移動、分化など非常に多くの機能を担っています。しかし、コラーゲンは特徴的な3重らせん構造や、不溶性であることなどから扱いが困難とされています。多くの機能をもつコラーゲンはとても複雑であるため、その重要性は認識されつつも、その機能あまり明らかにされてきませんでした。

そこで当研究室では、コラーゲンを模倣した3重らせんのペプチドを化学的に合成し、コラーゲンの機能解明を目標として研究をおこなっています。また、生理学の基礎的な研究に限定せず、コラーゲンモデルペプチドを主たるツールとして用いて、バイオマテリアルやドラッグデリバリーへの応用といった多岐に渡った研究をおこなっています。

～ 研究内容 ～

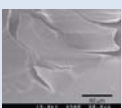
Collagen
コラーゲン

コラーゲンは(Gly-X-Y)nの繰り返し配列を持つ3重らせん構造のタンパク質である。XにはPro、Yには4-Hypがたびたび現れ、(Gly-Pro-4-Hyp)nの繰り返し配列をもつペプチドは自己集合してコラーゲンに特徴的な3重らせんを形成します。この特性を活かし、コラーゲンを模倣したペプチドを化学合成し、コラーゲンの機能解明から新規マテリアルの創製までさまざまな分野に応用してきました。

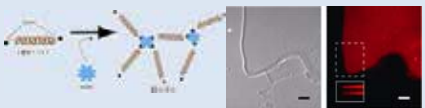


Biomaterial
新規マテリアルの開発

アビジンとコラーゲン様ペプチドの末端に付加したビオチンの特異的な相互作用を利用し、シート状のコラーゲン様超分子の合成に成功した。この超分子は表面をさまざまな分子で修飾できる可能性があり、新規のマテリアルとして期待されます。



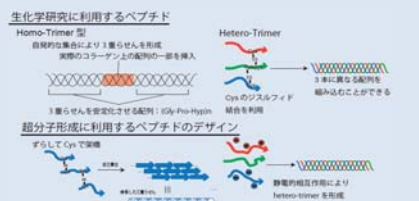
走査型電子顕微鏡写真
平方メートルオーダーのシート状超分子



共焦点顕微鏡写真
蛍光標識アビジンをシート表面に修飾

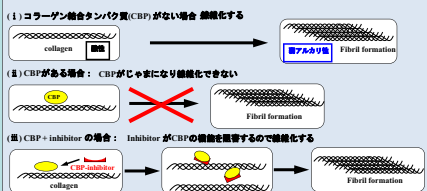
Peptide Science
コラーゲン様ペプチド

当研究室ではコラーゲンの生化学的研究、バイオマテリアルへの応用に向け以下のようなコラーゲン様ペプチドを用いています。中でも、Cysを利用した、ヘテロ3量体のデザインは非常に有用なツールとして用いられています。



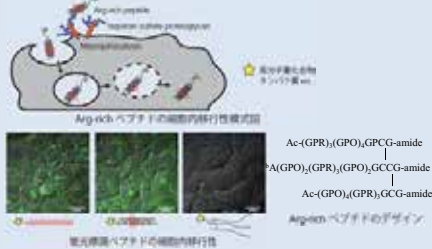
Methodology
新規方法論の開発

コラーゲンとタンパク質との結合を阻害する物質を探索するための、384-wellプレートフォーマットのスクリーニング系を確立しました。この方法は、さまざまなコラーゲン結合タンパク質に対して共通のフォーマットで実施できます。当研究室では、この手法を用いて、薬剤のターゲットとされるヘパリン/HSPG1に対しての結合活性を持つ化合物を見つけることに成功しました。



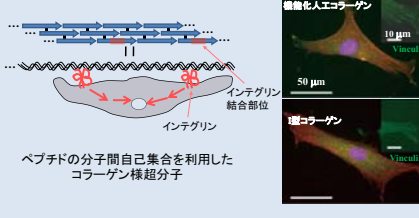
Medicinal Chemistry
ドラッグデリバリー

コラーゲン様3重らせんペプチドは多くのプロテアーゼに耐性をもっています。この性質を利用することで、優れた血中安定性をもつコラーゲン様ペプチドを使った新規のドラッグデリバリーの開発をめざしています。当研究室ではアルギニンを多く含むコラーゲン様ペプチドを細胞内へ取り込ませることに成功しました。



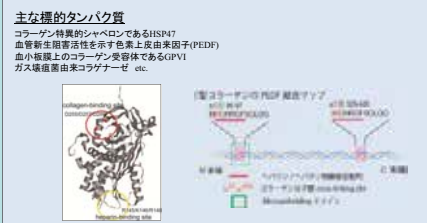
Material Chemistry
機能性人工コラーゲンの創製

3本のポリペプチド鎖を相互にずらしてジスルフィド架橋した3量体型ペプチドの自己集合を利用して、長いコラーゲン様3重らせんからなるゲル状のマテリアルの作製に成功しました。さらにこのマテリアルに天然コラーゲン上に存在する機能性アミノ酸配列を導入することで特定の受容体を介した細胞の振る舞いを制御できることを示すことができました。



Biochemistry
生理活性部位の同定

コラーゲン-タンパク質相互作用のアミノ酸配列レベルでの解析は、その機能解明に大きく寄与することが多い。そこで当研究室では、コラーゲンのアミノ酸配列を組み込んだ3重らせんペプチドを用いてコラーゲンの生理活性解明を目指し、コラーゲン結合タンパク質の結合配列同定に取り組んでいます。





早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 生命化学部門 中尾研究室（ケミカルバイオロジー研究）

教員の略歴



1996年4月–2004年3月 東京大学大学院 農学生命科学研究科
水圏生物科学専攻 助手
2004年4月–2007年3月 東京大学大学院 農学生命科学研究科
水圏生物科学専攻 講師
2007年4月–2012年3月 早稲田大学 先進理工学部
化学・生命化学科 准教授
2012年4月–現在 早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 教授

理工学術院 先進理工学部
化学・生命化学科 教授
中尾 洋一

最近の研究内容

「海洋生物由来天然化合物ライブラリーを用いた新規生理活性物質の探索」

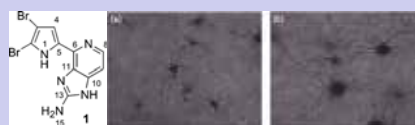
海綿やホヤなどの海洋生物に共生する微生物はユニークな構造と活性を持つ多種多様な天然化合物を産生しています。本研究室では国内外で収集した海洋生物の抽出エキスをライブラリーとし、有効な生理活性を持つ化合物の探索を行っています。



これまでに同定された天然化合物と生理活性の例

● 血管形成阻害物質

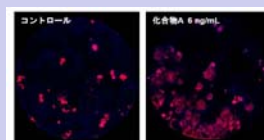
海綿 *Agelas nakamurai* から同定した新規化合物 ageladine A が血管新生阻害作用を持つことを見出しました。さらにその標的分子がリン酸化酵素 DYRK1A であることを示しました。



(左) Ageladine A の構造 (中央) Ageladine A 投与および(右)コントロールにおける血管形成 (Fujita et al., *Journal of the American Chemical Society*, 2003)

● 心筋分化誘導物質

多能性幹細胞から心筋への分化を誘導する化合物を探索し、6 ng/ml というきわめて低濃度で心筋分化誘導活性を示す化合物を見出しました。



化合物によるヒト細胞から心筋細胞への分化誘導効果
+ 分化誘導された心筋細胞は多く染み出されている。
(早稲田大学・山下准教授から提供)

● 抗リーシュマニア物質

原虫リーシュマニア感染症はアジア、南米、アフリカなどに広く見られ、未治療での致死率は90%にもなります。腔腸動物ヤギ *Acanthoprimnoa cristata* から見出した新規化合物 cristaxenicin はリーシュマニア原虫に対し選択的に強い抗原虫活性を示し、新薬の候補として期待されています。



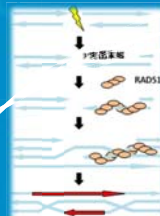
Acanthoprimnoa cristata と Cristaxenicin A の構造 (Ishigami et al., *The Journal of Organic Chemistry*, 2012)



早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 生命化学部門

中尾研究室 (ケミカルバイオロジー研究)

抽出エキスを用いて、多様な生物活性を研究しています。



RAD51阻害



抗菌活性



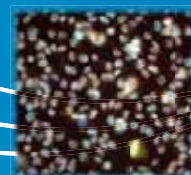
国内外で、海綿およびシアノバクテリアなどの海洋生物を採取しています。



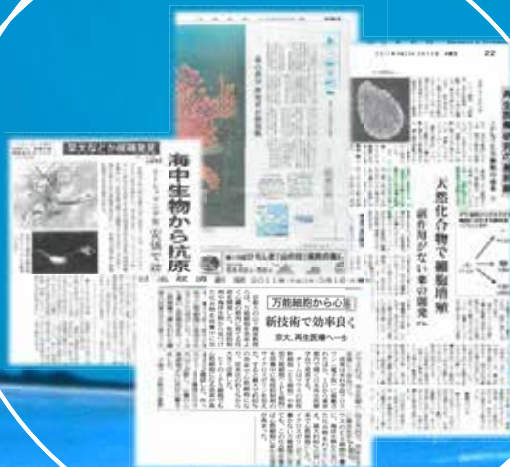
体内時計調節



血管新生阻害



細胞分化制御
ヒストン修飾制御



中尾研究室の成果が掲載されました。

2007年に発足した中尾研究室は、フィールドワーク、ケミカルバイオロジー、エピジェネティクス、環境学など多分野を横断した最先端の研究を展開しています。

