

アクティビティレポート 2025

早稲田大学 先進理工学部
化学・生命化学科

早稲田大学大学院 先進理工学研究科
化学・生命化学専攻

学科構成員

• 物理化学部門

構造化学研究室

教授

古川 行夫

助手

下川 大地

電子状態理論研究室

教授

中井 浩巳

次席研究員 (研究院講師)

西村 好史

次席研究員 (研究院講師)

藤波 美起登

助教

高島 千波

招聘研究員

吉川 武司

光物理化学研究室

教授

井村 考平

高分子物理化学研究室

准教授 (テニュアトラック)

廣井 卓思

ケム・インフォマティクス研究室

准教授 (任期付)

清野 淳司

講師 (任期付)

町田 光史

客員次席研究員

中嶋 裕也

招聘研究員

中野 匡彦

嘱託

速水 雅生

分子シミュレーション研究室

准教授 (任期付)

Aditya Wibawa Sakti

• 有機化学部門

化学合成法研究室

教授

中田 雅久

機能有機化学研究室

教授

鹿又 宣弘

招聘研究員

小川 熟人

招聘研究員

若森 晋之介

招聘研究員

鈴木 潤

反応有機化学研究室

教授

助手

招聘研究員

招聘研究員

柴田 高範

Yuchen Wu

伊藤 守

King Hung Nigel Tang

生物有機化学研究室

准教授（任期付）

山本 佳奈

● 無機・分析化学部門

錯体化学研究室

教授

山口 正

無機物質化学研究室

准教授

助教

石井 あゆみ

木下 雄介

● 生命化学部門

分子生物学研究室

教授

寺田 泰比古

ケミカルバイオロジー研究室

教授

助手

助手

次席研究員

客員主任研究員・招聘研究員

招聘研究員

招聘研究員

招聘研究員

招聘研究員

招聘研究員

中尾 洋一

Tse Wai Lam

親泊 安基

神平 梨絵

稲垣 宏之

高橋 豊

渡部 裕喜

大塚 悟史

喜納 惟斗

中村 文彬

生物分子化学研究室

教授

講師（任期付）

招聘研究員

招聘研究員

小出 隆規

藤井 一徳

市瀬 慎一郎

能勢 博

構造化学研究室（古川研究室）

研究レビュー

(1) PEDOT:PSS の硫酸処理による電気伝導率向上の要因

p型導電性ポリマーである PEDOT:PSS は硫酸処理により電気伝導率が約 1 S/cm から 1000 倍以上増大することが知られている。その際に、PSS と硫酸イオンのアニオン交換が起こり、アモルファスから結晶性に固体構造が変化することも分かっている。本研究では、PEDOT:PSS 水懸濁液に極性溶媒 DMSO やエチレングリコール (EG) を入れて成膜し、その後に硫酸処理をした試料に関して電気伝導機構を研究した。室温での電気伝導率は DMSO 添加・硫酸処理試料で最も高く、2622 S/cm であった。機器分析から、硫酸処理により、PSS アニオンと硫酸イオンが交換して結晶性に变化したことが分かった。ホール効果が測定でき n_{Hall} が異常に高くなる「improper Hall effect」が観測され、昨年度に開発した方法で解析した。導電性ポリマーの電気伝導率 σ は、結晶領域のバンド電気伝導率 σ_{band} とアモルファス領域のバリアブルレンジホッピング (VRH) 電気伝導率 σ_{VRH} の和として表されるとして、21–200 K の温度範囲で測定した σ を σ_{band} と σ_{VRH} に最小二乗法で分割した。分割した σ_{band} と σ_{VRH} の温度平均を図 1 に示した。バンド伝導領域が形成されると共に VRH 項が異常に大きくなった。金属的バンド伝導領域の形成により VRH のホッピング距離が長くなったためと考えられる。

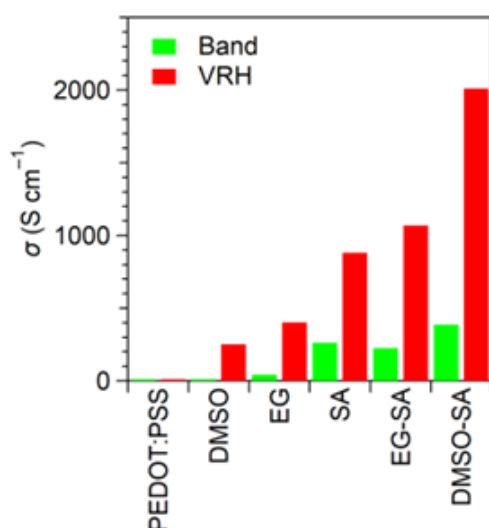


図 1 σ_{band} と σ_{VRH} の温度平均
Synth. Met. 317, 118060 (2026).

(2) n 型導電性ポリマー-PBFDO の電子状態と電気伝導率

2022 年に大気下で安定な高性能 n 型導電性ポリマー-PBFDO (図 2) が初めて合成された。本研究では PBFDO の電子状態と電気的性質に関して研究した。

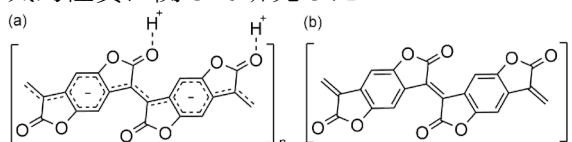


図 2 化学構造:(a) ドープ PBFDO; (b) PBFDO

合成したドープされた PBFDO フィルムを NOBF₄ のアセトニトリル溶液に浸して脱ドープして中性 PBFDO フィルムを作製した。そのフィルムをヒドラジンのエタノール溶液に浸して再ドーピングを行った。浸す時間を変えてドーピング量を調整して紫外・可視・NIR 吸収スペクトルを測定した (図 3)。図 3(a)から(f)とドーピング量が増加し、(f)は最大ドーピング量である。

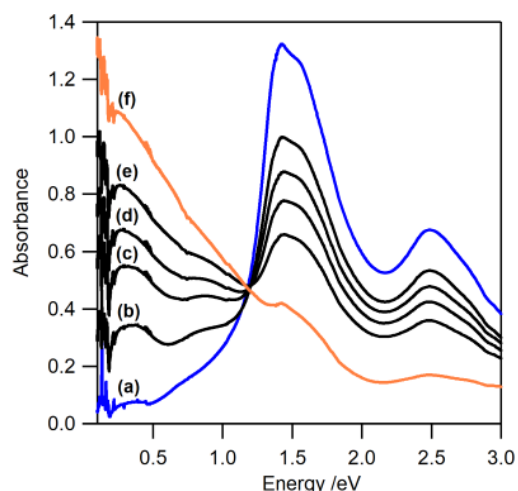


図 3 紫外・可視・赤外吸収スペクトル

中性 PBFDO では 1.42 と 2.49 eV に π - π^* 吸収が観測された。ドーピング量が多くなると、0.26 と 0.86 eV にバンドが出現し、負ポーラロンに帰属された。最高ドーピング量ではこれらのバンドは明瞭ではなく、ドルーデ型の吸収が観測された。ドーピング量が多くない場合には負ポーラロンが生成して局在電子状態が生成し、最大量では負ポーラロンネットワークが形成して金属的なバンドが生成したと解釈できる。

Photochem. and Spectrosc., 2, 4 (2026).

研究業績

● 原著論文

1. "Hall Effect Analysis of Conducting Doped Poly(3,4-Ethylenedioxythiophene) (PEDOT) Using Band and Hopping Transport Mechanisms"
D. Shimokawa, Y. Nishikitani, T. Kubo, S. Uchida, T. Asano, and Y. Furukawa
Synth. Met., **314**, 117942 (2025).
DOI:10.1016/j.synthmet.2025.117942
2. "Giant Variable-Range Hopping Conductance in Polar Solvent and Sulfuric Acid-Treated Poly(3,4-ethylenedioxythiophene):Poly(4-styrenesulfonate) (PEDOT:PSS)"
D. Shimokawa, Y. Nishikitani, T. Kubo, S. Uchida, T. Asano, and Y. Furukawa
Synth. Met., **317**, 118060 (2026).
DOI:10.1016/j.synthmet.2025.118060
3. "Electronic Absorption and Vibrational Spectra of Poly(benzodifurandione) (PBFDO)"
S. Koga and Y. Furukawa
Photochemistry and Spectroscopy, **2**, 4 (2026).
DOI:10.53941/ps.2026.100015

● 国際学会発表

基調講演・招待講演

1. "Electronic Structure of Highly Doped Conducting Polymers"
Y. Furukawa, D. Shimokawa, and S. Koga
15th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Worldhotel Grand Dushu Lake Suzhou and Soochow University, Suzhou, Jiangsu 215123, China, October 24-27, 2025.
2. "Energy Bands of Highly Doped Conducting Polymers"
Y. Furukawa
International Conference on Functional Materials Science 2025 (ICFMS2025), Holiday Inn Resort Bali Nusa Dua, Bali, Indonesia, December 10 & 11, 2025.
3. "Electronic Absorption and Vibrational Spectroscopies of Conducting Polymers"
Y. Furukawa, S. Koga, and D. Shimokawa
2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM2025), Honolulu, Hawaii, USA, December 15–20, 2025.

ポスター講演

1. "Appearance of Giant Variable Range Hopping Conduction in Poly(3,4-ethylenedioxythiophene):Poly(4-styrenesulfonate) (PEDOT:PSS) upon Polar Solvent and Acid Treatment"

D. Shimokawa, Y. Furukawa, S. Uchida

15th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Worldhotel Grand Dushu Lake Suzhou and Soochow University, Suzhou, Jiangsu 215123, China, October 24-27, 2025.

2. " Electronic States of Poly(benzodifurandione) (PBFDO)"

S. Koga, Y. Furukawa

15th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Worldhotel Grand Dushu Lake Suzhou and Soochow University, Suzhou, Jiangsu 215123, China, October 24-27, 2025.

● 学生表彰

1. S. Koga

Outstanding Poster Presentation Award

15th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena, Worldhotel Grand Dushu Lake Suzhou and Soochow University, Suzhou, Jiangsu 215123, China, October 24-27, 2025.

● プロジェクト

1. **令和 4-7 年度 基盤研究(C)(一般)「PEDOT:PSS におけるカスケード・ドーピングの解明と熱電材料の開発」**

2. ENEOS との共同研究 「高い電気伝導度を有する導電性ポリマー開発に向けた導電機構解析」

3. 東ソーとの共同研究 「CO₂回収アミン液の直接電解法の開発」

4. アンビエントロニクス研究所

5. 持続的環境エネルギー社会共創研究機構

電子状態理論研究室（中井研究室）

研究レビュー

(1) 自己無撞着場計算

量子化学において自己無撞着場(SCF)計算は、様々な電子状態計算において現れる基本的な繰返し計算である。論文[8]では、昨年開発した直接 Givens 回転(DGR)法を、反対称化強直交ジェミナル積(APSG)計算に適用し、効率的に収束解が得られることを確かめた。

8. *J. Chem. Phys.*, **163**, 194110 (2025).

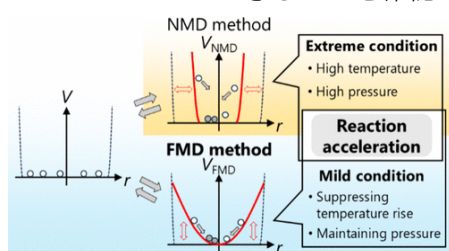
(2) 分割型計算手法

当研究室では分割型量子化学計算手法の開発に取り組んできた。論文[4]では、近年注目されているニューラルネットワークポテンシャル(NNP)計算に分割手法を組み込むことにより、100万原子程度の大規模計算を可能とした。

4. *J. Comput. Chem.*, **46**, e70193 (2025).

(3) 量子的分子動力学シミュレーション

当研究室では独自の分割統治密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法を開発してきた。論文[6]では、反応障壁を効果的に乗り越える accelerated MD (aMD)法に、エネルギー密度解析を適用し局所自由度を選択的に活性化する手法を開発した。論文[12]では、溶液中の濃度揺らぎを模して化学反応を加速させる fluctuation-assisted MD (FMD)法を提案し、類似の nanoreactor MD (NMD)に比べて温和な条件でシミュレーションできることを確認した。



6. *Chem. Phys. Lett.*, **882**, 142474 (2025).

12. *J. Phys. Chem. Lett.*, **17**, 3102 (2026).

(4) 相対論的量子化学

2成分相対論法では、4成分Dirac方程式からの描像変化(PC)を伴う。2成分相対論的密度汎関数理論(RDFT)では、基本変数である電子密度に対してもPC補正が必要である。論文[1]では、このことを相似変換を伴う結合クラスター(CC)法にみられる電子密度の取り扱いとの類推で説明した。

1. *Chem. Lett.*, **54**, upaf082 (2025).

(5) 産学連携プロジェクト

環境省プロジェクト「非在来型反応場のシミュレーションに基づく理論設計」では、バイオマス由来の液化天然ガス(LPG)の高効率・低コストな製法の確立を目指して産学連携で研究を進めている。しかしながら、バイオマスにはセルロース・ヘミセルロース由来の多くの化合物が含まれ、LPG生成に至るまでの反応過程は複雑である。論文[2,3]の研究では、化学的精度でこれらの反応を理論的に予測するために必要な計算手法を開発した。

2. *Chem. Lett.*, **54**, upaf083 (2025).

3. *J. Comput. Chem.*, **46**, e70191 (2025).

(6) 国際共同研究

アミロイドベータ(Aβ)ペプチド内のヒスチジン互変異性化は、アルツハイマー病の分子メカニズムと潜在的な治療戦略を理解する上で極めて重要である。論文[9]の国際共同研究では、DC-DFTB-MD・メタダイナミクス(MTD)シミュレーションにより、水分子がヒスチジン残基HIS13およびHIS14の互変異性化を媒介し、特定の互変異性体を安定化させることを明らかにした(図1)。

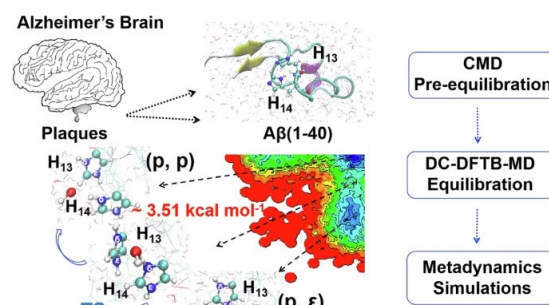


図1. アミロイドβにおける「隠れた化学反応」の可視化

9. *Commun. Chem.*, **8**, 408 (2025).

(7) 理論と実験のインタープレイ

当研究室では、理論と実験のインタープレイを推進している。触媒化学[5]、電気化学[7,13]、有機化学[10,11]の各分野で活躍している実験研究者と共著論文を発表した。

5. *Appl. Catal. A*, **708**, 120540 (2025).

7. *J. Phys. Chem. B*, **129**, 11522 (2025).

13. *J. Phys. Chem. C*, **130**, 4524 (2026).

10. *ACS ES&T Water*, **5**, 5881 (2025).

11. *Commun. Chem.*, **8**, 288 (2025).

研究業績

• 原著論文（査読あり）

1. “Role of picture change correction in relativistic density functional theory: An analogy with coupled cluster theory”, H. Nakai, C. Takashima, *Chem. Lett.*, **54** (4), upaf082-1–4 (2025). (DOI: [10.1093/chemle/upaf082](https://doi.org/10.1093/chemle/upaf082))
2. “High-accuracy thermodynamic calculations for lignocellulosic biomass molecules using re-optimized composite methods”, M. Fujinami, H. Nakai, *Chem. Lett.*, **54** (4), upaf083-1–4 (2025). (DOI: [10.1093/chemle/upaf083](https://doi.org/10.1093/chemle/upaf083))
3. “Extension of composite method and machine-learned electron correlation model to fourth-period elements”, R. Fujisawa, M. Fujinami, H. Nakai, *J. Comput. Chem.*, **46** (20), e70191-1–11 (2025). (DOI: [10.1002/jcc.70191](https://doi.org/10.1002/jcc.70191))
4. “Large-scale calculations by integrating the fragmentation approach with neural network potentials”, R. Oshima, M. Fujinami, Y. Nakajima, H. Nakai, *J. Comput. Chem.*, **46** (20), e70193-1–9 (2025). (DOI: [10.1002/jcc.70193](https://doi.org/10.1002/jcc.70193)) (Special Issue to Celebrate Professor Shridhar R. Gadre’s 75th Birthday)
5. “Enhancing chemoselectivity *via* strong metal-support interaction: Selective hydrogenation of 4-chloronitrobenzene over Pd/TiO₂ catalysts”, H. Akiyama, K. Saegusa, H. Sampei, T. Higo, K. Maeda, T. Watanabe, S. Kado, H. Nakai, Y. Sekine, *Appl. Catal. A*, **708**, 120540-1–7 (2025). (DOI: [10.1016/j.apcata.2025.120540](https://doi.org/10.1016/j.apcata.2025.120540))
6. “Extension of quantum-chemistry-based accelerated molecular dynamics by decomposing total energy into constituent atoms: A case study for density functional tight-binding simulations of condensed phase systems”, Y. Nishimura, H. Nakai, *Chem. Phys. Lett.*, **882**, 142474-1–9 (2026). (DOI: [10.1016/j.cplett.2025.142474](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2025.142474)) (Editor’s choice)
7. “Investigation of Li-ion hopping in ionic-liquid-incorporated methyl cellulose/carboxymethyl cellulose solid polymer electrolyte: A molecular simulation insight”, K. Ishida, A. W. Sakti, S. T. C. L. Ndruru, H. Nakai, *J. Phys. Chem. B*, **129** (44), 11522–11529 (2025). (DOI: [10.1021/acs.jpccb.5c04146](https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.5c04146))
8. “Efficient optimization of low-rank antisymmetric product of geminals wavefunction using the direct Givens rotation method”, A. Kawasaki, R. Oshima, N. Nakatani, H. Nakai, *J. Chem. Phys.*, **163** (19), 194110-1–8 (2025). (DOI: [10.1063/5.0296913](https://doi.org/10.1063/5.0296913))
9. “Insights into proton transfer dynamics in histidine tautomers of amyloid- β (1-40)”, Y. Tang, Y. Nishimura, N. Li, H. Li, A. Salimi, K. Ishida, A. W. Sakti, H. Nakai, R. Parida, J. Y. Lee, *Commun. Chem.*, **8**, 408-1–10 (2025). (DOI: [10.1038/s42004-025-01790-x](https://doi.org/10.1038/s42004-025-01790-x))
10. “QCD-MLP: a machine-learning framework for predicting transformation products of organic micropollutants in radical-mediated systems”, D. Senevinanda, D. Dwinandha, M. Elsamadony, J. Liu, M. Fujinami, M. Fujii, *ACS ES&T Water*, **5** (10), 5881–5892 (2025). (DOI: [10.1021/acsestwater.5c00500](https://doi.org/10.1021/acsestwater.5c00500))
11. “Transfer learning from custom-tailored virtual molecular databases to real-world organic photosensitizers for catalytic activity prediction”, N. Noto, T. Nagano, M. Fujinami, R. Kojima, S. Saito, *Commun. Chem.*, **8**, 288-1–8 (2025). (DOI: [10.1038/s42004-025-01678-w](https://doi.org/10.1038/s42004-025-01678-w))
12. “Development of a fluctuation-assisted molecular dynamics method for the efficient exploration of chemical reactions”, S. Tsukamura, Y. Nishimura, H. Nakai, *J. Phys. Chem. Lett.*, **17** (11), 3102–3107 (2026). (DOI: [10.1021/acs.jpcllett.6c00047](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6c00047))
13. “Density-functional tight-binding molecular dynamics simulation of graphene oxide-ionic liquid electrolyte interface in sodium-ion batteries”, M. F. Maahury, A. W. Sakti, H. Nakai, *J. Phys. Chem. C*, **130** (12), 4524–4537 (2026). (DOI: [10.1021/acs.jpcc.5c07064](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5c07064))

- 原著論文（日本語，査読あり）

1. “Givens回転と誤差逆伝播法を組み合わせた自己無撞着場計算の高効率収束法の開発”，大島 玲生，中井 浩巳，*J. Comput. Chem. Jpn.*, **24** (1), 36–38 (2025). (DOI: [10.2477/jccj.2025-0003](https://doi.org/10.2477/jccj.2025-0003))
2. “知識グラフに対する力学シミュレーションによる oxaza[7]dehydrohelicene 誘導体の円偏光発光特性分析”，菅波 祐介，藤波 美起登，Salem Mohamed S. H., 滝澤 忍，中井 浩巳，*J. Comput. Chem. Jpn.*, **24** (3), 92–94 (2025). (DOI: [10.2477/jccj.2025-0018](https://doi.org/10.2477/jccj.2025-0018)) (SCCJ Annual Meeting 2025 Spring Best Poster Award Article)

- 総説（日本語，査読あり）

1. “円錐交差構造の支配因子に関する量子化学的検討”，吉川 武司，五十幡 康弘，中井 浩巳，坂田 健，*J. Synth. Org. Chem. Jpn.*, **83** (9), 814–823 (2025). (DOI: [10.5059/yukigoseikyokaishi.83.814](https://doi.org/10.5059/yukigoseikyokaishi.83.814))

- 著書

1. “Chapter 9 - Ultraviolet–visible and ^1H or ^{13}C nuclear magnetic resonance spectroscopic studies on the specific interaction between lithium and tropolonate ions in acetonitrile or other solvents”, M. Hojo, M. Kobayashi, H. Nakai, *Fundamental Coordination Ability of s-Block Metal Ions: New Aspects and Its Role in Solution Reactions*, M. Hojo (ed.), Elsevier, pp. 157–183 (2025). (DOI: [10.1016/B978-0-12-821980-5.00010-5](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821980-5.00010-5))
2. “Chapter 10 – Interaction between protons or alkaline earth metal ions and the benzoate ion in acetonitrile studied by ultraviolet–visible and ^1H and ^{13}C nuclear magnetic resonance spectroscopies”, M. Hojo, M. Kobayashi, H. Nakai, *Fundamental Coordination Ability of s-Block Metal Ions: New Aspects and Its Role in Solution Reactions*, M. Hojo (ed.), Elsevier, pp. 185–201 (2025). (DOI: [10.1016/B978-0-12-821980-5.00002-6](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821980-5.00002-6))

- 招待講演（国際会議）

1. “Recent Advances of Electronic Structure Theory for Large Complex Systems”, H. Nakai, *The 11th Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC-11)*, (Kobe, Japan), April 21–25, 2025.
2. “Development of Accurate and Efficient Relativistic Methods Based on Spin-free Infinite-order Two-Component Hamiltonian”, C. Takashima, H. Nakai, *The 11th Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC-11)*, (Kobe, Japan), April 21–25, 2025.
3. “Professor Hiroshi Nakatsuji: In Pursuit of Quantum Chemical Principles”, H. Nakai, *The 11th Molecular Quantum Mechanics Conference (MQM2025)*, (Kyoto, Japan), May 23–28, 2025.
4. “Breaking Barriers in Fragmentation Methods for Long-Range Interactions”, H. Nakai, *The 13th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025)*, (Oslo, Norway), June 22–27, 2025.
5. “Divide-and-Conquer Method Using Two-particle Reduced Density Matrix to Incorporate Static Correlation”, C. Takashima, *The 7th China-Japan-Korea workshop on theoretical and computational chemistry (CJK-WTCC-VII)*, (Xiamen, China), November 25–27, 2025.
6. “Exploring Oxaza[7]dehydrohelicene Derivatives with Strong Circularly Polarized Luminescence Using Machine Learning and Time-Dependent Density Functional Theory”, H. Nakai, M. Fujinami, *The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025)*, (Honolulu, Hawaii), December 15–20, 2025.

7. “Overcoming Limitations of Fragmentation Methods for Non-Local Interactions”, H. Nakai, *The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025)*, (Honolulu, Hawaii), December 15–20, 2025.
 8. “Integration of Computer Vision and Digital Technologies for Automated Recording of Chemical Experiments”, M. Fujinami, *7th Conference on Advanced Organic Synthesis (CAOS-7) & Digi-TOS Joint sympos*, (Hsinchu, Taiwan), January 9–11, 2026.
 9. “Optimization of Unitary Matrices for Quantum Chemistry via Givens Rotations and Error Backpropagation”, R. Oshima, *International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP 2026)*, (Hyogo, Japan), January 19–20, 2026.
- 招待講演（国内学会）
 1. “Large-scale bio and condensed-phase reactive molecular dynamics simulations by linear-scaling approximate quantum chemical method”, Y. Nishimura, H. Nakai, 第25回日本蛋白質科学会年会, アクリエひめじ（姫路）, 2025年6月18日–20日.
 2. “先端計算化学手法の開発および大規模複雑系の理論研究”, 中井 浩巳, 日本化学会第106春季年会(2026), 日本大学（千葉）, 2026年3月17–20日. (日本化学会賞受賞講演)
 - 競争的資金
 1. 環境省 地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業『革新的多元素ナノ合金触媒・反応場活用による省エネ地域資源循環を実現する技術開発』『非在来型反応場のシミュレーションに基づく理論設計』（研究代表者：北川 宏, 技術開発・実証参画者：中井 浩巳, 令和4-11年度）.
 2. 科学研究費助成事業 学術変革領域研究(A)『デジタル化による高度精密有機合成の新展開』研究領域 公募研究, 「有機金属反応のためのインタラクティブな反応設計システムの開発」（研究代表者：藤波 美起登, 令和6-7年度）.
2025年度 物質・デバイス領域共同研究課題 基盤共同研究, 「量子分子動力学計算による金属サブナノ粒子触媒反応の自由エネルギー解析」（研究代表者：西村 好史, 令和7年度）.
 - 受賞
 1. 第78回日本化学会賞, 中井 浩巳, “先端計算化学手法の開発および大規模複雑系の理論研究”.
 2. 2025年度早稲田大学リサーチアワード(独創的研究推進), 中井 浩巳, “量子化学の基盤理論の構築と実践的応用研究”.
 3. APATCC-11 Digital Discovery Poster Prize, Rei Oshima (D2), “Direct minimization method for SCF solution using Givens rotation and error backpropagation”.
 4. MQM2025 BCSJ Award for Poster Presentation, Chinami Takashima (Asst. Prof.), “Scalable Parallel Algorithms of Two-Electron Integrals in Two-Component Relativistic Theory”.
 5. 日本コンピュータ化学会 2025 春季年会最優秀ポスター賞, 菅波 祐介 (M1), “知識グラフを用いた oxaza[7]dehydrohelicene 誘導体の吸収発光特性分析” .

研究レビュー

（１）有機キラルナノ構造の光学特性

有機結晶に電子線を照射することで多量化学反応を誘起できる。本研究では微小領域を空間選択的に反応させ、新たな光学特性を有するナノ構造を作製した。電子線を精密制御することで、螺旋状の構造を作製した。近接場光学顕微鏡によりこの構造近傍のキラル光場を可視化し、その空間特性をナノメートルスケールで明らかにした。

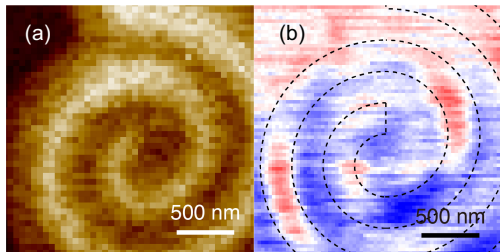


図 1. 作製した有機キラルナノ構造の (a) 表面形態像と (b) 近接場光キラル場像。

（２）超螺旋光励起を用いたプラズモニク物質の特性制御

本研究では、軌道角運動量をもつ超螺旋光を用いて金ナノ球二量体のプラズモンモードを選択的に励起し、光学特性を制御することを目的とした。電磁気学計算から、超螺旋光の照射により円偏光とは異なる共鳴モードが観測された。金ナノ球二量体から非線形発光が観測され、特徴的な励起確率分布が可視化されることが明らかとなった。

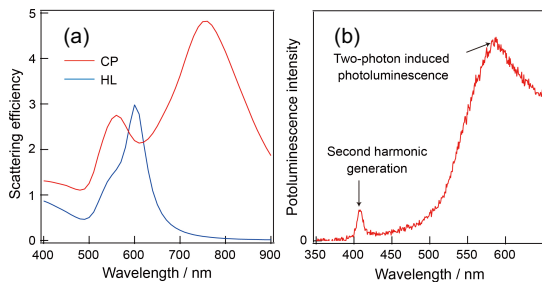


図 2. 金ナノ粒子二量体の (a) 散乱スペクトル（計算）と (b) 非線形発光スペクトル。

（３）円偏光発光分光装置の開発

円偏光発光（CPL）顕微鏡は、計測において、精度と測定速度がトレードオフの関係にある。本研究では、測定の精度と速度のそれぞれを最適化した CPL 測定系の開発を目的とした。高精度計測と計測時間の短縮は、それぞれシングルチャンネルとマルチチャンネル計測で実現し、それらの計測により定量的に g 値を算出できることを確認した。

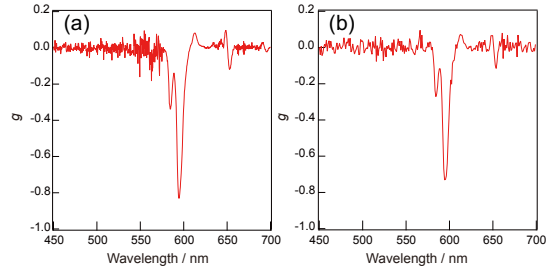


図 3. $\text{Eu}(\text{facam})_3$ の g 値スペクトル：(a) マルチチャンネル、(b) シングルチャンネル計測。

（４） $\text{CsPbBr}_3/\text{SiO}_2/\text{Ag}$ ハイブリッド体の光学特性およびレーザー発振特性の解明

本研究では、Purcell 効果により自然発光速度を変調し、低閾値でのレーザー発振を実現すること、またその光学特性の解明を目的とした。 Ag 薄膜蒸着前後で発光の励起光強度依存性測定を行い、蒸着後の試料においてレーザー発振が確認された。このことは、 Ag 薄膜の導入がレーザー発振の閾値低下に寄与したことを示す。

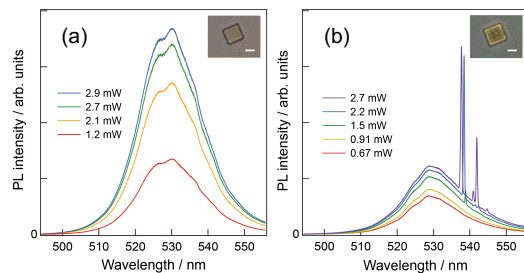


図 4. (a) CsPbBr_3 単体と (b) ハイブリッド体の発光スペクトルの励起光強度依存性。

論文・総説・その他

● 原著論文

1. K. Imura, N. Miwa, “Optical field enhancement in gold nanoplate assemblies”, *Chem. Phys. Lett.* 867, 141966 (6 pages) (2025). (DOI: 10.1016/j.cplett.2025.141966)
2. K. Imura, T. Matsuura, "Directional Light Scattering of a Single Si Nanoparticle Revealed by Three-Dimensional Near-Field Optical Microscopy", *J. Phys. Chem. Lett.* 16, 3518-3524 (2025). (DOI: 10.1021/acs.jpcllett.5c00254)
3. K. Imura, N. Hayashi, K. Kawashima, “Ultrafine Modulation of Plasmon Resonance in Single Gold Nanorods via Photothermal Effects”, *J. Phys. Chem. Lett.* 16, 11037-11042 (2025). (DOI: 10.1021/acs.jpcllett.5c02763)
4. K. Setoura, T. Oshikiri, M. Tamura, K. Morita, H. Fujiwara, S. Ishii, Y. Fujii, Y. Matsuo, T. Iida, K. Imura, "Chiral Plasmonic Surface Temperature Switching by Several Tens of Kelvins in Titanium Nitride Nanostructures", *Nano Lett.* 26, 351-357 (2026). (DOI: 10.1021/acs.nanolett.5c05212)

● 総説・解説

1. 井村考平, “貴金属ナノプレートに励起されるプラズモンの特性と光キラル場の可視化”, *表面と真空*, 68, 592-597 (2025).
2. 井村考平, “貴金属ナノ粒子の光学特性とその応用”, *化学と教育*, 74, 162-165 (2026).

● プロシーディングス

1. K. Imura, S. Hasegawa, “Control of plasmonic optical fields excited in a single gold nanoplate by helical light”, *Proceedings of SPIE the International Society for Optical Engineering*, 13703,137030V (2025).
2. K. Imura, “Characteristics of optical chiral fields around nanostructures revealed by scanning near-field optical microscopy”, *International Conference on Metamaterials Photonic Crystals and Plasmonics*, 272-273 (2025).
3. K. Morita, H. Okamoto, K. Imura, “Optical characterization of periodic subwavelength structures composed of polycyclic aromatic hydrocarbons”, *International Conference on Metamaterials Photonic Crystals and Plasmonics*, 1548-1549 (2025).

● 特許出願

1. 井村考平, 小澤隼, 森田賢 “円偏光発光測定装置及び円偏光発光測定方法”, 特願 2026-012916.

● 学会発表

1. Kohei Imura, Seiju Hasegawa, “Control of plasmonic optical fields excited in a single gold

- nanoplate by helical light”, OMC2025, April 2025, Yokohama.
2. 森田賢, 岡本裕巳, 井村考平, “空間選択的反応を用いたペリレン結晶表面上に作製したナノ構造の光学特性評価”, 2025 年度日本分光学会年次講演会, 2025 年 6 月, 東京.
 3. Ken Morita, Hiromi Okamoto, “Optical characterization of periodic subwavelength structures composed of polycyclic aromatic hydrocarbons”, Kohei Imura, META2025, July 2025, Spain.
 4. 佐々木寛和, 井村考平, “ガルバニック交換反応による貴金属ハイブリッドナノ構造の作製とその光学特性評価”, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2025 年 9 月, 名古屋.
 5. 森田賢, 岡本裕巳, 井村考平, “電子線照射により生成したペリレン多量体のナノ構造の作製とその光学特性評価”, 第 19 回分子科学討論会, 2025 年 9 月, 広島.
 6. 長谷川誠樹, 井村考平, “金ナノプレート近傍における光キラル場の増強とその空間特性”, 第 19 回分子科学討論会, 2025 年 9 月, 広島.
 7. 井村考平, “超螺旋光とナノ物質の相互作用の解明と光キラル場制御”, キラル物質科学 B 班会議, 2025 年 9 月, 大阪.
 8. 井村考平, “光濃縮基板の局所物性と光熱効果を用いた金ナノ構造の形状制御”, LAC-SYS 研究所第 5 回シンポジウム, 2025 年 9 月, 大阪.
 9. 高橋遼太郎, 井村考平, “CsPbBr₃-銀薄膜ハイブリッド体における光学特性の解明”, 第 15 回 CSJ 化学フェスタ, 2025 年 10 月, 船堀.
 10. 脇田晴輝, 井村考平, “超螺旋光を用いた金ナノ粒子集合体の光学特性制御”, 第 15 回 CSJ 化学フェスタ, 2025 年 10 月, 船堀.
 11. 井村考平, “超螺旋光とナノ物質の相互作用の解明と光キラル場制御”, キラル物質科学 領域会議, 2025 年 10 月, 大阪.
 12. 森田賢, 岡本裕巳, 井村考平, “電子線照射により作製した有機キラルナノ構造の光学特性評価”, 第 15 回日本光学会ナノオプティクス研究グループ第 30 回研究討論会, 2025 年 11 月, 豊橋.
 13. 高橋遼太郎, 井村考平, “CsPbBr₃/SiO₂/Ag 薄膜ハイブリッド体における光学特性およびレーザー発振の評価”, 第 15 回日本光学会ナノオプティクス研究グループ第 30 回研究討論会, 2025 年 11 月, 豊橋.
 14. 脇田晴輝, 井村考平, “超短パルス光渦を用いた金ナノ球集合体の非線形光学応答”, 第 15 回日本光学会 ナノオプティクス研究グループ 第 30 回研究討論会, 2025 年 11 月, 豊橋.
 15. Kohei Imura, “Near-field imaging of optical chiral fields around subwavelength structures”, Pachifichem 2025, December 2025, Honolulu.
 16. 森田賢, 岡本裕巳, 井村考平, “有機渦状ナノ構造のキラル光学特性評価”, 第 73 回応用物理学会春季学術講演会, 2026 年 3 月, 東京.
 17. 脇田晴輝, 井村考平, “光渦励起による金ナノ球二量体からの非線形発光”, 第 73

回応用物理学会春季学術講演会，2026年3月，東京.

● 招待・依頼講演

1. Kohei Imura, “Optical chiral fields and plasmon modes in gold nanostructures studied by apertured near-field spectroscopic imaging”, META2025, July 2025, Spain.
2. Kohei Imura, “Visualization of plasmon modes and chiral optical fields by near-field optical microscopy”, IMRC2025, September 2025, Mexico.
3. Kohei Imura, “Near-field imaging of plasmon modes and chiral optical fields near single gold nanoplates”, NSM2025, August 2025, Sapporo.
4. Kohei Imura, “Control of plasmonic optical fields toward photochemical reactions”, Pachifichem 2025, December 2025, Honolulu.
5. 井村考平, “ナノ物質の光物理化学研究：可視化と理解，さらにその先へ”，先端光科学研究の新展開，2026年3月，岡崎.
6. 井村考平, “金ナノ構造における光熱変換の可視化とその制御”，第73回応用物理学会春季学術講演会，2026年3月，東京.

● 受賞

1. 高橋遼太郎, 第15回CSJ化学フェスタ, 優秀ポスター発表賞
2. 高橋遼太郎, 日本光学会ナノオプティクス研究グループ第30回研究討論会優秀賞(ナノオプティクス賞)

● 競争的資金

1. 文部科学省 科学研究費補助金 学術変革領域研究(A)「超螺旋光とナノ物質の相互作用の解明と光キラル場制御」(研究代表：井村考平, 令和7-8年度)
2. 文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究B「光場制御と強結合によるナノ光増強場の高度化と機能開拓」(研究代表：井村考平, 令和5-8年度)
3. 未来社会創造事業(探索加速型)「低侵襲ハイスループット光濃縮システムの開発」(研究代表：飯田琢也), 「ナノ顕微分光計測による光濃縮基板の局所物性評価」(共同研究者, 令和7年度)

● 学内研究助成

1. 特定課題研究助成(基礎助成) 「金属ハイブリットナノ結晶の作製とその光学特性の解明」(研究代表, 令和7年度)

高分子物理化学研究室（廣井研究室）

研究レビュー

(1) 高空間分解能動的散乱法による高分子ゲルの不均一性評価

動的散乱法は、散乱光強度のゆらぎの早さを利用して、溶液中の高分子やコロイド粒子の大きさを決める手法として広く知られている。動的散乱法をゲルに応用した際には、ゲルの網目サイズと解釈される相関長というパラメータが得られる。従来のゲルの動的散乱法では、相関長の空間依存性についての議論はなされてこなかった。一方、中性子散乱などの観測結果から、ゲル内部には構造の不均一性が存在することが分かっていた。そのため、高空間分解能のゲルの動的散乱計測により、ゲルの不均一性を定量化する技術が求められてきた。

当研究室で開発した顕微動的散乱法は、回折限界に迫る空間分解能で動的散乱計測を行うことができる。そこで、一般的なゲルであるポリアクリルアミドゲルについて、架橋剤濃度を変えて不均一性を制御し、相関長がどの程度ばらついているのかを定量化した。その結果、架橋剤濃度が高く白濁したゲルにおいて、相関長に大きな標準偏差が生じることを明らかにした（図1）[3]。今後はステージの二次元走査によって、空間不均一性の可視化に挑む。

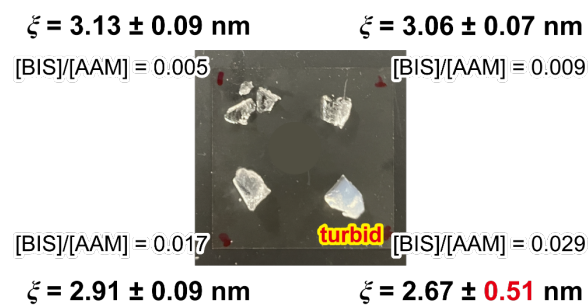


図1. 架橋濃度を変化させて調製したポリアクリルアミドゲルに対する網目サイズの分散評価の結果
3. *Colloids Surf. A*, 741, 140269 (2026).

(2) 顕微動的散乱法による数ゆらぎ計測

顕微動的散乱計測は、従来の典型的な動的散乱装置と比較すると、被照射体積が6桁程度小さい。そのため、高濃度分散液の計測を得意とする一方、低濃度分散液の計測については、試料から十分な散乱強度が得られないために不可能であった。この点を解決するため、共焦点顕微鏡の最適化及び油浸対物レンズの導入を行い、微弱な散乱光の検出を実現した。得られた散乱光強度の時間相関関数からは、通常見

られない二段階緩和が観測された。シミュレーションによる検討により、得られた遅い二段階目の緩和は、被照射体積中に散乱体が入り出す数ゆらぎによるものと予想された。現在は解析的な式を用いた時間相関関数のフィッティングに着手している。

(3) 溶液からの高分子結晶化のマルチプローブ計測

溶液からの結晶化は、薬の製剤過程や、歯・骨の形成などに代表されるバイオミネラリゼーションの観点から、研究が進んできた。代表的な研究手法としては、結晶化途中の結晶核の電子顕微鏡による直接観察が挙げられる。

当研究室では、溶液中の結晶化進行中における結晶核の成長過程を *in situ* 測定する、マルチプローブ計測装置を構築し、結晶化過程の解明に挑戦している（図2）。低分子の結晶

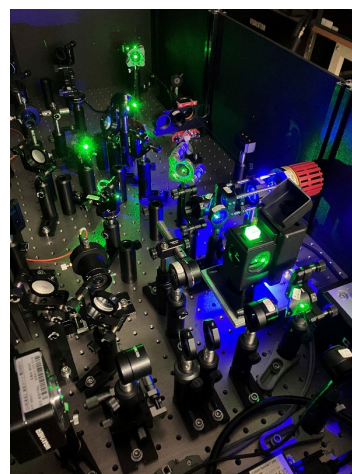


図2. マルチプローブ計測装置

化においては、液液相分離による溶質の濃縮を経る二段階核形成モデルが提唱されているが、内部での折り畳みを経る高分子の結晶化においても同様のモデルが成り立つかを立証するため、ポリエーテルサルホンのニトロベンゼン溶液からの結晶化過程について、動的散乱、ラマン散乱および光学像の同時計測による構造解析を行った。実験結果は、凝集体形成の後に内部での高分子の折り畳みが起こることお示唆する結果となり、低分子とは異なる二段階核形成モデルの提唱ができると考えている。

(4) 構造・物性計測に基づく共同研究

基板上の液滴の摩擦力計測装置の開発[1]およびペプチドゲルの粘弾性計測[2]を通じた共同研究を学内外で進め、共著論文を発表した。

1. *Appl. Phys. Lett.*, 126, 231602 (2025).
2. *Chem. Eur. J.*, e03278 (2026).

研究業績

• 原著論文(査読あり)

1. “Thicker lubricant layer enhances the droplet mobility on lubricant-infused smooth surfaces”, R. Sakai, T. Hiroi, R. Tamate, T. Mouterde, M. Tenjimbayashi, *Appl. Phys. Lett.*, **126**, 231602 (2025). (DOI: [10.1063/5.0274510](https://doi.org/10.1063/5.0274510))
2. “Hydrogels Formed by the Self-Assembly of Collagen-Mimetic Peptides With a Constrained Backbone Structure”, M. Noto, K. K. Fujii, Y. Shu, T. Hiroi, T. Koide, *Chem. Eur. J.*, e03278 (2026). (DOI: [10.1002/chem.202503278](https://doi.org/10.1002/chem.202503278))
3. “Effects of fabrication conditions on the bulk and surface network structures of polyacrylamide gels”, I. Yoda, T. Hiroi, Y. Akagi, *Colloids Surf. A*, **741**, 140269 (2026). (DOI: [10.1016/j.colsurfa.2026.140269](https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2026.140269))

• 招待講演 (国際学会)

1. “Fluctuation in Scattering: Dynamic Light Scattering”,
T. Hiroi, SI-Thru2025, Yokohama, Japan, April 21-23, 2025.

• 招待講演 (国内学会)

1. “動的光散乱法の基礎と応用”,
廣井 卓思, 高分子分析研究懇談会 第 424 回例会, 明治大学(東京), 2025 年 4 月 18 日.
2. “動的光散乱による高分子構造化学”,
廣井 卓思, 第 74 回高分子学会年次大会, オンライン, 2025 年 5 月 20 日.
3. “超高速でない分光”,
廣井 卓思, 2025 年度日本分光学会年次講演会 分光学夢シンポジウム, 東京大学(東京), 2025 年 6 月 20 日.
4. “動的光散乱法”,
廣井 卓思, 日本分光学会 夏期セミナー「光子相関分光法の基礎と応用」, オンライン, 2025 年 9 月 1 日.
5. “動的光散乱による構造化学”,
廣井 卓思, ISSP ワークショップ「先端的分光計測・化学イメージングが描き出す, 次世代化学研究」, 東京大学(千葉), 2025 年 9 月 5 日.
6. “動的光散乱: 光散乱強度のゆらぎを捉える”,
廣井 卓思, レーザー学会学術講演会第 46 回年次大会, 大阪南港 ATC(大阪), 2026 年 1 月 14 日.

- 学会発表

1. “Electron impact excitation spectroscopy of excited H₂”, T. Hiroi, Y. Morimoto, R. Kanya, K. Yamanouchi, *34th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC2025)*, (Sapporo, Japan), July 29-August 5, 2025.
2. “数ゆらぎが動的光散乱に与える影響”, 植松 虎真, 廣井 卓思, 第 74 回高分子討論会, 関西大学(大阪), 2025 年 9 月 17 日.
3. “溶液からの高分子結晶化過程のマルチスケール計測”, 廣井 卓思, 佐光 貞樹, 第 74 回高分子討論会, 関西大学(大阪), 2025 年 9 月 17 日.

- 競争的資金

1. 科学研究費助成事業 基盤研究(B), 「顕微光散乱法によるソフトマテリアルの精密組織構造解析」(研究代表者: 廣井 卓思, 令和 5-7 年度).
2. 科学技術振興機構 さきがけ ゆらぎの理解と制御による材料革新, 「ソフトマテリアルの表面選択的ゆらぎ計測法の開発」(研究代表者: 廣井 卓思, 令和 7-10 年度).

- 学内研究助成

1. 特定課題研究助成費(研究基盤形成) 「顕微動的散乱法による生細胞内のゆらぎ計測」(研究代表者: 廣井 卓思, 令和 7 年度).

研究レビュー

(1) 機械学習ポテンシャル由来の局所記述子を用いた分子物性予測システム

所望の分子物性を有する材料を効率的に設計するためには、AIを用いた高精度な物性予測が重要である。本研究では、機械学習ポテンシャルが獲得した局所的な原子環境表現を、3次元構造を直接扱うグラフニューラルネットワーク（GNN）に導入することで、有機分子および遷移金属錯体に対する多様な物性を高精度に予測可能なモデルを開発した（論文2）。

本システムの流れを図1に示す。Preferred Potential（PFP）により得られる原子ごとの局所記述子をノード特徴量として用い、距離情報や記述子間の類似度に基づく特徴をエッジ特徴量として構築し、同変性GNNに入力した。得られた集約表現に基づき分子全体の物性を予測するとともに、各原子の特徴量から局所的な物性の推定にも対応可能な設計とした。

有機小分子および金属錯体分子に対して、双極子モーメントやHOMO-LUMOギャップなどの分子全体の、またはNMR核磁気遮蔽定数などの各原子の局所的な物性の予測に適用し、その有効性が示された。特に遷移金属錯体では、全体の精度が顕著に向上し、遷移金属錯体の物性予測を最高水準の精度で実現した。

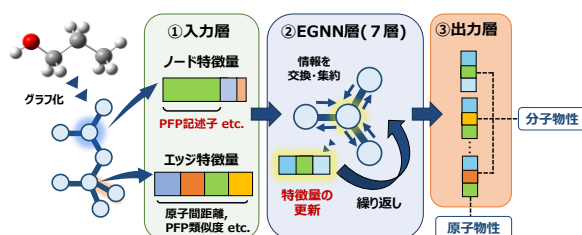


図1. 本システムの概要

(2) AI エージェントと知識グラフによる対話型電子実験ノートの開発

化学実験に関する知識やノウハウは実験者個人の経験に依存しやすく、研究室内での技術継承や他者による再現性の確保が重要な課題となっている。本研究では、大規模言語モデル（LLM）による自然言語処理、AIエージェントによる自律処理、知識グラフによる構造化を統合し、実験計画から記録、データ再利用までを一貫して支援する対話型ELNの新たな枠組みを提案する（論文3）。このシステムは簡便に記録を残すことと、再利用可能な形で情報を蓄積することを両立した次世代の電子実験ノートの基盤となりうる。

本システムの概略図を図2に示す。ユーザー（研究者）はWebアプリケーションのインターフェースを通じて、対話的に各機能进行操作する。本システムでは文献収集から実験整理までの各段階において、ユーザーとの対話を担うAIエージェント、知識グラフを構築・検索するAIエージェントなど、複数のエージェントが協調して動作し、文献、実験データ、ユーザー入力などの分散した多様な情報を、知識グラフとして統合・管理する。

開発したプロトタイプシステムの機能検証のために、特定の有機化合物の合成をデモシナリオに設定し、その有効性が示された。

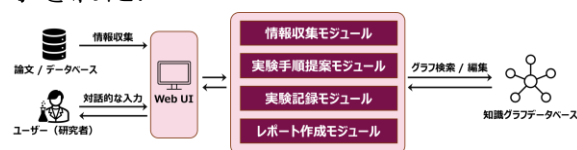


図2. システムの全体像

研究業績

● 原著論文

1. “Computational Chemical Analysis of the Molecular Mechanisms of Proteins Involved in Chromosome Segregation”
Marina Awaji, Yuichiro Asai, Koh Fukuchi, Yasuhiko Terada, Junji Seino
J. Comput. Chem. Jpn. 24, 102 (2025).
2. “Impact of Local Descriptors Derived from Machine Learning Potentials in Graph Neural Networks for Molecular Property Prediction”
Ryoichi Uchiyama, Yuya Nakajima, Yuta Tanaka, Junji Seino
arXiv:2602.03046 (2026).
3. “AI エージェントと知識グラフに基づく化学研究のための対話型電子実験ノートの開発”
門脇陽七詩, 中野匡彦, 清野淳司
人工知能学会全国大会論文集 第 40 回 (2026), 受理.

● 記事・寄稿

1. “ケモインフォマティクスと量子化学” (巻頭言)
清野淳司
日本化学会情報化学部会誌, 43, 1 (2025).
2. “生成系 AI による化学探究の深化”
清野淳司
化学と教育, 『ヘッドライン:第 32 回化学教育フォーラム: AI は化学探究活動を変えられるか?』, 受理.

● 学会発表

1. “知識グラフと機械学習を利用した抗がん活性化合物提案システムの開発”
増田幹太, 金子武史, 中嶋裕也, 町田光史, 神平梨絵, 中尾洋一, 清野淳司
日本コンピュータ化学会 2025 春季年会, 2025 年 6 月, 東京工業大学大岡山キャンパス (口頭発表)
2. “染色体分配に関連するタンパク質の分子メカニズムの計算化学的な解析”
淡路茉里奈, 浅井裕一郎, 宗安麻衣, 寺田泰比古, 清野淳司
日本コンピュータ化学会 2025 春季年会, 2025 年 6 月, 東京工業大学大岡山キャンパス (ポスター発表)
3. “係数最適化手法を導入した遺伝的プログラミングの開発と化学法則への適用”
玉江結々葉, 清野淳司
日本コンピュータ化学会 2025 春季年会, 2025 年 6 月, 東京工業大学大岡山キャンパス (ポスター発表)

4. “Effectiveness and Analysis of 3D Descriptors in Machine Learning Prediction of Anticancer Activity”
Thi Hoang Yen Bui, Takeshi Kaneko, Kanta Masuda, Yuya Nakajima, Koshi Machida, Junji Seino
第 19 回分子科学討論会, 2025 年 9 月, 広島国際会議場 (ポスター発表)
5. “収率予測モデルと証拠理論に基づく有望な化学反応の推薦システム”
上嶋蒼土, 中嶋裕也, 清野淳司
第 15 回 CSJ 化学フェスタ 2025, 2025 年 10 月, タワーホール船堀 (ポスター発表)
6. “3 次元情報を効果的に取り込むハイブリッド機械学習による分子物性・生物活性予測”
清野淳司, Thi Hoang Yen Bui, 増田幹太, 中嶋裕也, 町田光史
第 48 回ケモインフォマティクス討論会, 2025 年 11 月, 東広島芸術文化ホール くらら (口頭発表)
7. “知識グラフと生物活性予測を利用した抗がん活性化化合物探索システムの開発”
増田幹太, 中嶋裕也, 町田光史, 神平梨絵, 中尾 洋一, 清野 淳司
第 48 回ケモインフォマティクス討論会, 2025 年 11 月, 東広島芸術文化ホール くらら (口頭発表)
8. “同変グラフニューラルネットワークと Preferred Potential 記述子による分子物性予測と原子寄与解析”
内山諒一, 中嶋裕也, 清野 淳司
第 48 回ケモインフォマティクス討論会, 2025 年 11 月, 東広島芸術文化ホール くらら (ポスター発表)
9. “証拠理論とグラフニューラルネットワークを用いた反応収率予測における不確実性の評価: 信頼度関数の設計と最適化”
上嶋蒼土, 中嶋裕也, 清野 淳司
第 48 回ケモインフォマティクス討論会, 2025 年 11 月, 東広島芸術文化ホール くらら (ポスター発表)
10. “化学法則の自律的探索を指向したエージェント型シンボリック回帰ワークフローの実装”
吉田大晟, 中野匡彦, 清野 淳司
第 48 回ケモインフォマティクス討論会, 2025 年 11 月, 東広島芸術文化ホール くらら (ポスター発表)
11. “染色体分配に関与するタンパク質の実験的・計算化学的手法による分子メカニズムの解明”
淡路茉里奈, 浅井裕一郎, 宗安麻衣, 寺田泰比古, 清野 淳司
第 98 回日本生化学会大会, 2025 年 11 月, 国立京都国際会館 (口頭発表)
12. “Automated compound identification system using quantum chemical calculations, machine learning, and spectral information”

Junji Seino

The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025),
December 2025, Honolulu, Hawaii (Oral)

13. “AI-driven integrated system for anticancer drug discovery from small molecules”

Koshi Machida, Kanta Masuda, Takeshi Kaneko, Yuya Nakajima, Rie Kamihira, Yoichi Nakao, Junji Seino

The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025),
December 2025, Honolulu, Hawaii (Oral)

14. “Development of recommendation system of selecting quantum chemical method for target local property by using an error database and machine learning”

Yuya Nakajima, Junji Seino

The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025),
December 2025, Honolulu, Hawaii (Poster)

15. “Development of a mixture spectrum separation technique via machine learning, quantum chemical calculations, and multivariate spectral decomposition method”

Keitatsu Sekiya, Takumi Kumagai, Junji Seino

The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025),
December 2025, Honolulu, Hawaii (Poster)

16. “Development of a compound proposal system using knowledge graphs and AI prediction of anti-cancer activity”

Kanta Masuda, Takeshi Kaneko, Yuya Nakajima, Koshi Machida, Rie Kamihira, Yoichi Nakao, Junji Seino

The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025),
December 2025, Honolulu, Hawaii (Poster)

17. “活性パターン予測モデルを導入した遺伝的アルゴリズムに基づく抗がん剤候補化合物の設計”

金子武史, 増田幹太, 町田光史, 中嶋裕也, 神平梨絵, 中尾洋一, 清野淳司

日本化学会第106回春季年会, 2026年3月, 日本大学理工学部船橋キャンパス (口頭発表)

18. “機械学習による化合物の臨床通過予測システムとその根拠の明示化”

作田雄一郎, 増田幹太, 町田光史, 清野淳司

日本化学会第106回春季年会, 2026年3月, 日本大学理工学部船橋キャンパス (口頭発表)

19. “大規模言語モデルと知識グラフを用いた動的な実験記録・支援システムの開発”

門脇陽七詩, 中野匡彦, 清野淳司

日本化学会第106回春季年会, 2026年3月, 日本大学理工学部船橋キャンパス (ポスター発表)

● 招待講演・依頼講演

1. “Systematic Accuracy Assessment of Quantum Chemical Calculations Using Machine Learning”

Junji Seino

Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC11), April, 2025, Kobe (Japan).

2. “AI 技術と化学データに基づく明示的な化学法則の自動抽出”

清野淳司

化学工学会第 56 回秋季大会, 2025 年 9 月, 芝浦工業大学豊洲キャンパス

3. “ホワイトボックス型 AI による分子物性予測と化学原理の抽出”

清野淳司

新化学技術推進協会 (JACI) 戦略委員会 勉強会, 2025 年 12 月, 新化学技術推進協会会議室

4. “生成系 AI による化学探究の深化”

清野淳司

日本化学会第 106 春季年会 第 32 回化学教育フォーラム「AI は化学探究活動を変えられるか?」, 2026 年 3 月, 日本大学船橋キャンパス

● 競争的資金・プロジェクト

1. ENEOS 株式会社との共同研究「Matlantis の活用による種々の実験スペクトル予測手法の開発・拡張」

清野淳司 (研究代表, 2025 年度)

2. 文部科学省科学研究費助成金 若手研究「機械学習を利用した量子化学計算誤差データベースの開発」

中嶋裕也 (研究代表, 2024 年度–2026 年度)

● 受賞

1. 日本コンピュータ化学会 2025 年奨学賞, 増田幹太

“知識グラフと機械学習を利用した抗がん活性化合物提案システムの開発”

2. 日本コンピュータ化学会 2025 年優秀ポスター賞, 玉江結々葉

“係数最適化手法を導入した遺伝的プログラミングの開発と化学法則への適用”

3. 第 48 回ケモインフォマティクス討論会 優秀ポスター賞, 吉田大晟

“化学法則の自律的探索を指向したエージェント型シンボリック回帰ワークフローの実装”

研究レビュー

(1) Li-ion Diffusion in Cellulose-Based Solid Polymer Electrolytes

This work investigates Li⁺ transport in a bio-based solid polymer electrolyte composed of methyl cellulose (MC) and carboxymethyl cellulose (CMC) using classical molecular dynamics simulations with a modified OPLS-AA force field. Jump-distance distribution analyses reveal that Li⁺ migrates via a site-to-site hopping mechanism rather than by continuous diffusion, with ions remaining temporarily coordinated to oxygen-containing groups before relocating via ligand exchange. The incorporation of an ionic liquid enhances ion mobility by increasing polymer flexibility, generating free volume, and weakening Li⁺-polymer interactions. As illustrated in Fig. 1, Li⁺ transport is governed by a balance between coordination stability and dynamic exchange, providing atomistic insight into ion conduction in cellulose-based solid electrolytes.

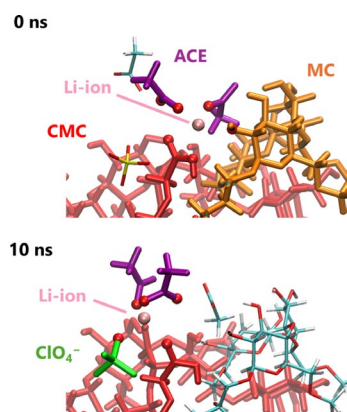


Fig. 1. Snapshots of Li⁺ ion hopping at 10% ionic liquid concentration, where Li⁺ (pink) is coordinated by oxygen atoms (red) from MC, CMC, acetate, and ClO₄⁻, shown in orange, red, purple, and green, respectively (Published in *J. Phys. Chem. B* **2025**, *129*, 11522-11529).

(2) Molecular Simulations on Graphene Oxide-Ionic Liquid Interface of Na-ion Battery

In *J. Phys. Chem. C* **2026**, *130*, 4524-4537,

we reported a molecular-level investigation of ion transport and interfacial interactions between graphene oxide (GO) and an ionic liquid electrolyte for Na-ion batteries, aiming to clarify how GO surface chemistry influences Na⁺ behavior. Using DFTB-based MD simulations, the ion coordination, spatial distribution, and dynamics at the GO interface. The calculated RDFs (Fig. 2) show that Na⁺ forms a transient coordination with oxygen functional groups on GO while the ionic liquids modulate these interactions and promote interfacial diffusion, leading to heterogeneous yet preferential migration pathways.

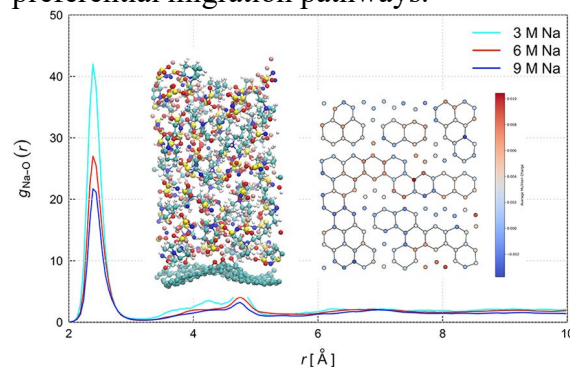


Fig 2. Calculated RDFs of representative Na-O interactions in the adopted GO-ionic liquid surface.

(3) Furfural to Furfuryl Alcohol Hydrogenation Catalyzed by Cobalt (II) Phenoxyimine

Our work on the hydrogenation of furfural using a cobalt(II) phenoxyimine catalyst was published in *Mol. Catal.* **2025**, *587*, 115469. A DFT-based mechanistic study of hydrogenation via the MVP-type pathway, involving simultaneous hydrogen transfer through a cyclic transition state, was proposed. It is energetically favored over a stepwise mechanism, with a much lower activation barrier and a high-spin pathway. Ligand modifications with stronger electron-withdrawing groups further reduce the barrier. Overall, the study identifies the MVP-like mechanism as the dominant route and provides insights for designing more efficient biomass conversion catalysts.

論文など

● 原著論文

1. "Effect of carboxymethyl substitution position on urea interaction with carboxymethyl chitosan: a density functional theory study"
P. Siahaan, P. D. W. Karimah, M. B. Abid, D. Hudiyanti, S. Z. Hildayani, A. W. Sakti, D. S. B. Anugrah.
J. Mol. Model., **32**, 114 (2026).
2. "Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulation of Graphene Oxide-Ionic Liquid Electrolyte Interface in Sodium-Ion Batteries"
M. F. Maahury, A. W. Sakti*, H. Nakai
J. Phys. Chem. C **130**, 4524 (2026).
3. "Computational Study of Aryl Transfer Mechanism from Oxygen toward Nitrogen Catalyzed by Acridinium Ion"
M. A. Martoprawiro, N. K. Syuhada, N. P. Indriyani, A. W. Sakti
J. Phys. Chem. A **130**, 1447 (2026).
4. "DFT/TDDFT Study of Electronic and Optical Properties of Modified Indigofera Tinctoria Dyes as Solar Cell Sensitizers"
S. Syafri, F. Oktasendra, N. Widya, P. A. Putro, H. Amir, H. Alatas, F. Ahmad, A. W. Sakti
Trends Sci. **23**, 11890 (2026).
5. "Insights into proton transfer dynamics in histidine tautomers of amyloid- β (1-40)"
Y. Tang, Y. Nishimura, N. Li, H. Li, A. Salimi, K. Ishida, A. W. Sakti*, H. Nakai, R. Parida, J. Y. Lee
Commun. Chem. **8** (2025).
6. "Deciphering the reaction mechanisms of furfural to furfuryl alcohol hydrogenation by cobalt(II) phenoxyimine catalyst"
A. D. F. Natawardaja, N. P. Indriyani, A. W. Sakti*
Mol. Catal. **587**, 115469 (2025).
7. "Investigation of Li-Ion Hopping in Ionic-Liquid-Incorporated Methyl Cellulose/Carboxymethyl Cellulose Solid Polymer Electrolyte: A Molecular Simulation Insight"
K. Ishida, A. W. Sakti*, S. T. C. L. Ndruru, H. Nakai
J. Phys. Chem. B **129**, 11522 (2025).
8. "Separation mechanism and chiral-HPLC chromatogram profile of racemic mandelate compounds: a comparative study between experiment and computation using conformer-rotamer ensemble sampling tool (CREST)-XTB"
F. Fatmawati, A. W. Sakti, S. Z. Hildayani, Akhmaloka, F. M. Warganegara, M. A. Martoprawiro
J. Mol. Model. **31**, 206 (2025).
9. "Quantum Mechanical Simulation Analysis of the Impact of Amine Derived Compounds on Metal-Organic Frameworks MIL-53(Al) for CO₂ Gas Adsorption"
Muttaqin, M. K. Fadhlillah, D. Khairunnisa, R. Salsabila, A. W. Sakti
IOP Conf. Ser. Earth Environ. Sci. **1521**, 012026 (2025).
Inorg. Chem. Commun. **176**, 114186 (2025).
10. "Deciphering the Mechanism of the Nickel-Catalyzed Catalytic Transfer Hydrogenation of Furfural to Furfuryl Alcohol"
N. P. Indriyani, N. K. Syuhada, A. W. Sakti, M. A. Martoprawiro, Y. Permana, I. M. Arcana
J. Phys. Chem. A **129**, 4879 (2025).

● International Conferences

1. "Reactive MD Study on the Proton Conductivity of the Sulfonated PET-Based PEM"
M. Nakazawa, A. W. Sakti, N. Ataollahi, V. D. Neelalochana
(1st prize award) Poster Presentation at the Symposium for the Promotion of Applied Research Collaboration in Asia, Asia Pacific Society for Materials Research, 26 February-1 March 2026, Okinawa, Japan
2. "In Silico Drug Discovery of Macrocyclic Compound Derivatives for Mutant BMPR2 in Pulmonary Arterial Hypertension"
K. Endo, H. Nakai, A. W. Sakti
(2nd prize award) Poster Presentation at the Symposium for the Promotion of Applied Research Collaboration in Asia, Asia Pacific Society for Materials Research, 26 February-1 March 2026, Okinawa, Japan
3. "Reactive Molecular Dynamic Simulations of Lithium Metal–Liquid Electrolyte Interface of Li–S Battery"
M. F. Maahury, S. W. Norwood, S. Shen, K. Tabrizi, A. W. Sakti, C. Purwanto, G. Shukri, H. A. Rasyid
Pure and Applied Chemistry International Conference (PACCON), 12-13 February, Phitsanulok, Thailand.
4. "Exploration of Na superionic conductor-type solid electrolytes with low environmental impact and high ionic conductivity: A density-functional tight-binding study"
I. Fujikawa, A. W. Sakti, H. Nakai
Poster Presentation at the International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pachifichem), 15-20 December 2025.
5. **[Invited]** "Molecular Simulation on Carbon Capture as an Effort of Mitigating Global Warming"
A. W. Sakti
Guest Lecture at University Palangkaraya, Kalimantan, Indonesia, 5 December 2025.
6. **[Invited]** "Unraveling Li-Dendrite Formation via Machine Learned Interatomic Potential"
A. W. Sakti
The International Workshop on Frontier Materials Modeling and Computation. Bandung, Indonesia, 28-29 October 2025.
7. **[Invited]** "Biomolecular Simulations for Marine Chemistry Applications"
International Guest Lecture, Padjadjaran University, Bandung, Indonesia, 27 October 2025.
A. W. Sakti
8. **[Invited]** "Recent Advances on Molecular Simulation for Na-ion Battery Applications"
A. W. Sakti
Molecular Chemistry Conference, BRIN. South Tangerang, Indonesia, 14 October 2025.
9. "Molecular Simulation of Graphene Oxide–Ionic Liquid Electrolyte Interface in Sodium-Ion Batteries using DFTB-MD"
M. F. Maahury, A. W. Sakti
Oral Presentation at European Conference on Computational and Theoretical Chemistry, 15-18 September 2025, Naples, Italy.

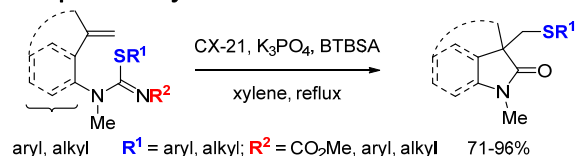
10. **[Invited]** "Machine Learning Molecular Simulation for Electrolyte-Solid Electrolyte Interface System"
A. W. Sakti
Guest Lecture on Engineering Physics, Bandung Institute of Technology, Indonesia, 28 August 2025.
11. "Density Functional Theory Study on Ligand Candidates for Cobalt Catalysts to Optimize Branching Selectivity and Esterification in the Carbonylative Polymerization of Undecenol"
C. Purwanto, A. W. Sakti, H. Nakai, A. D. F. Natawardaja, N. P. Indriyani
The 105th CSJ Annual Meeting, 26-29 March 2025, Osaka, Japan.

● 競争的資金

1. Tokutei Kadai, Research Base Creation FY 2025. "Development of Machine Learning-Based Reactive Force Fields for Screening of Non-Toxic Metals in Sodium and Lithium Ion Batteries" (Principal Investigator). Grant number: 2025C-514.
2. ITB's Leading Research 2025. "Towards a molecular picture of the LiNiO₂ cathode and ethylene carbonate liquid electrolyte interface reactions in high-energy Li-ion batteries". Grant number: 841/IT1.B07.1/TA.00/2025. (Fund: 1,500,000 JPY).

研究レビュー

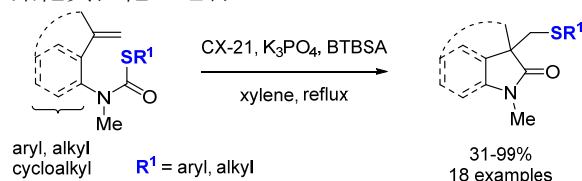
(1) Palladium-catalyzed cycloisomerization of thiocarbamates with consecutive formation of quaternary carbon and sulfide



Scheme 1.

構造異性体を生成する異性化反応は、理論上副生成物を生じず、生成物の単離や精製を容易にするため、優れた方法である。

最近、我々は、カルバミドチオエートの Pd 触媒による環化異性化反応により、第四級炭素とスルフィドが連続して生成することを報告した (Scheme 1)。この Pd 触媒によるカスケード反応において、カルバミドチオエートとアルケンの間の連結基がアルキレンの場合と同様に、フェニレンである場合にも収率が良好であることを確認した。さらに、アルキルカルバミドチオエートおよびアリールカルバミドチオエートのいずれについても、高い収率で環化異性化が進行した。



Scheme 2.

我々はチオカルバメートの Pd 触媒による環化異性化反応においても第四級炭素と炭素-硫黄結合が連続的に生成することを見出した (Scheme 2)。この反応はアリールチオカルバメートのみならず、アルキルチオカルバメートでも進行し、アリールチオカルバメートはアルキルチオカルバメートよりも速く反応することが観察された。開発された Pd 触媒反応は、アルケニル連結基を有する基質だけでなく、フェニレン連結基を有する基質にも適用可能であった。類似の構造を持つ基質における Pd 触媒による環化異性化反応において、チオカルバメートはカルバミドチオエートよりも反応性が低いことが判明した。開発された Pd 触媒反応は架橋環をもつ azabicyclo[3.2.1]octanone や azabicyclo[3.3.1]nonanone も形成した。したがって、この Pd 触媒反応は含窒素多環式天然物の環構築に利用されることが期待される。*Tetrahedron Lett.* **2025**, *154*, 155384.

(1) Synthetic studies on fusicoccin A: Alternative synthetic approach to the C-ring fragment

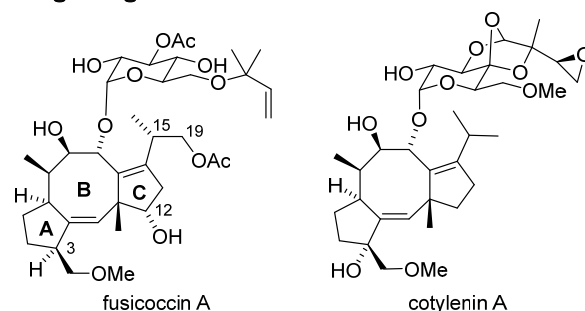
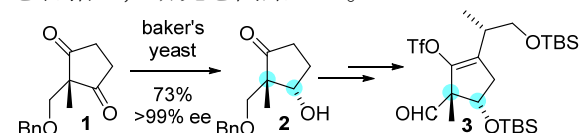


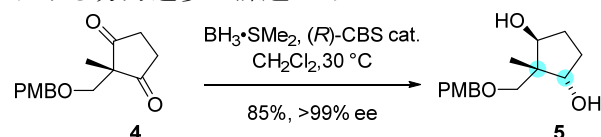
Figure 1.

フシコクシン A (Fig. 1) は、*Phomopsis amygdali* によって産生される萜調誘発性植物毒素として単離された。フシコクシン A とコチレニン A (Fig. 1) はタンパク質間相互作用を安定化させる「分子接着剤」として機能し、生物活性を発現させる。このユニークな作用機序と興味深い生物学的活性により、数多くの生化学的研究が報告されている。また、これらの化合物は合成困難な 8 員炭素環を含む三環式炭素骨格を有するため、合成化学の分野で大きな関心を集めている。フシコクシン A の全合成は未達成であるため、その生化学的研究に資する化合物の創製に繋がる世界初不斉全合成を目指し、研究を開始した。



Scheme 3.

我々は、**1** のパン酵母還元により創製した **2** (Scheme 3) からフシコクシン A の C 環フラグメントの不斉合成に成功したが、そのパン酵母還元の再現性と大量合成時の後処理操作における労力過多に課題があった。



Scheme 4.

そこで、**4** の CBS 還元により高エナンチオ選択的に高収率で得られる **5** (Scheme 4) を出発原料とする、**3** を再現性良く量的に供給し得る合成ルートを検討し、開発に成功した。*Tetrahedron Lett.* **2025**, *164*, 155631.

研究業績

- 原著論文(査読あり)

1. “Palladium-catalyzed cycloisomerization of thiocarbamates with consecutive formation of quaternary carbon and sulfide”, H. Kumazawa, M. Nakada, *Tetrahedron Letters* **154**, 155384 (2025). (DOI: [10.1016/j.tetlet.2024.155384](https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2024.155384))
2. “Synthetic studies on fusicoccin A: Alternative synthetic approach to the C-ring fragment”, R. Oshima, M. Nakada, *Tetrahedron Letters* **154**, 155631 (2025). (DOI: [10.1016/j.tetlet.2025.155631](https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2025.155631))

- 著書

1. “驚きと感動に満ちた天然物の全合成 Total Synthesis of Natural Products Full of Surprises and Emotion”, 中田 雅久, 有機合成化学協会誌, **83**, 156-159 (2025).

- 学会発表

1. “Fusicoccin A の不斉全合成研究”
大島陸斗, 中田雅久
日本化学会第 105 春季年会 (大阪), 関西大学千里山キャンパス, 大阪府吹田市,
2025 年 3 月 29 日 (口頭発表).

- 競争的資金

1. 文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究 B (一般)
「抗腫瘍性架橋多環式天然物の不斉全合成研究」, (研究代表者, 令和 7-10 年度)

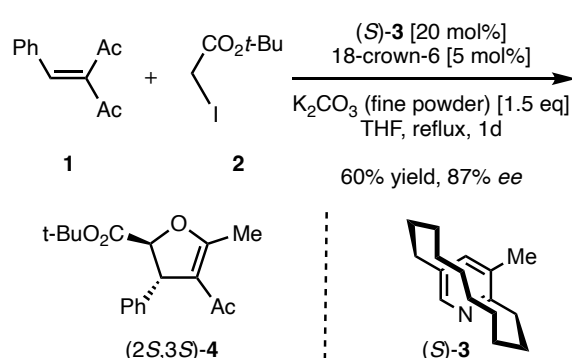
- 学内研究助成

1. 特定課題研究助成 (基盤形成) 「有機クロム試薬を用いたキラルヒドラゾンの立体選択的アリル化に関する研究」 (研究代表, 2025 年度)

研究レビュー

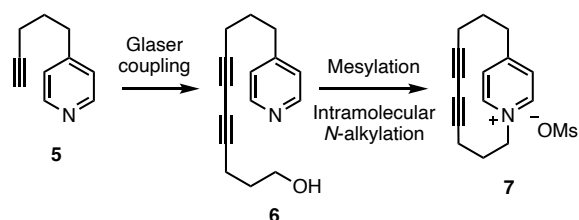
(1) 面不斉ピリジニウムイリドを活性種とする触媒的不斉ジヒドロフラン化反応

面不斉ピリジンであるピリジノファンは、異性化晶出法により光学活性体として入手でき、反応系内でピリジニウムイリドを容易に発生できる。本研究では、この面不斉イリドを活性種とする触媒的不斉ジヒドロフラン化反応を検討した。電子不足アルケン **1** とヨード酢酸エステル **2** との反応において、面不斉ピリジノファン触媒 (*S*)-**3** を用いることで、*trans*-2,3-ジヒドロフラン誘導体 (*2S,3S*)-**4** が良好なエナンチオ選択性で得られた。さらに、微細粉末 K_2CO_3 と 18-crown-6 の併用により、反応性が大きく向上することを確認した。



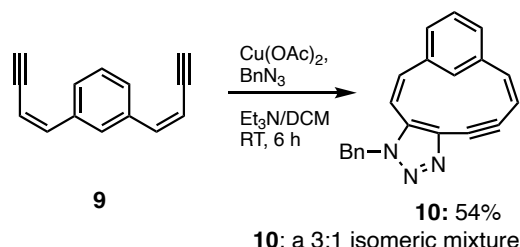
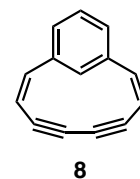
(2) 新規な[10](1,4)ピリジノファジイニウム塩の合成とその分子歪み特性

本研究では、4-ブロモピリジン塩酸塩から根岸カップリングにより調製した **5** を出発原料とし、Glaser カップリングで得られる **6** の分子内 *N*-アルキル化を経て、ピリジン環の 1,4 位をジイン鎖で架橋した新規な[10](1,4)ピリジノファジイニウム塩 **7** の合成に成功した。さらに DFT 計算および ^{15}N NMR 解析により、本化合物の窒素上に顕著な歪みが生じていることを明らかにした。



(3) [8]メタシクロファジエンジンの歪み促進型アジド-アルキン環化付加反応

本研究では、SPAAC の反応速度向上を目的として、新規[8]メタシクロファジエンジンを設計した。前駆体末端ジイン **9** を分子内 Glaser 環化しても **8** の単離には至らなかったが、ベンジルアジド共存下では環化付加体 **10** が得られた。以上の結果より、**8** が反応系内で高反応性化学種として発生し、アジドで捕捉されたものと考えられる。

(4) 相分離・相混和スイッチングによる CO_2 吸収・放散システムの創製

本研究では、 CO_2 吸収時に均一化し、吸収前および放散後に相分離する相分離・相混和スイッチングを利用した CO_2 吸収・放散系を構築した。オリゴアミンとエチレングリコール、深共晶溶媒、イオン液体との混合系を検討し、高い吸収量と放散率を両立する可逆系を複数見いだした。本成果は、低エネルギー型 CO_2 回収系の設計に新たな指針を与えるものである。

研究業績

● 原著論文(査読あり)

1. “Short Synthesis of [10]Paracyclophanes from Strained [10]Paracyclopha-4,6-diynes Obtained via a Double Negishi Coupling Followed by an Intramolecular Glaser Cyclization”
Y. Kamata, T. Sugawara, H. Kikkawa, R. Hori, Y. Miyashita, N. Kanomata, R. Ono, M. Kakinuma, Y. Ono, Y. Sato, T. Kashima, Y. Kanetaka, S. Maruyama, H. Takizawa
J. Org. Chem. **2025**, *90*, 14949–14956.
<https://doi.org/10.1021/acs.joc.5c01567>

● 寄稿

1. 「高効率 CO₂ 回収を目指した低分子オリゴアミン吸収液の開発とその概要」
鹿又宣弘
ニチアス技術時報, **2025**, *411*, 1–6.

● 国際学会発表

1. “Evaluation of CO₂ absorption performance of paracyclophane-oligoamine in ethylene glycol solution”
N. Kanomata, N. Senga
8th Post-Combustion Capture Conference (PCCC-8) in Marseille, France, September 16–18, 2025.
2. “Evaluation of CO₂ absorption efficiency using amine/ionic liquid mixed absorbents for flue gas”
H. Jung, N. Kanomata
8th Post-Combustion Capture Conference (PCCC-8) in Marseille, France, September 16–18, 2025.

● 国内学会発表

1. 鹿島拓巳・鎌田祐輝・鹿又宣弘, 「様々な置換基を有する[8]パラシクロファジイン類の合成と歪み促進型アジド-アルキン環化付加反応」, 日本化学会第 106 春季年会, 野田, 2026 年 3 月.
2. 佐々木一太・鹿又宣弘, 「[8]メタシクロファジエンジインの歪み促進型アジド-アルキン環化付加反応」, 日本化学会第 106 春季年会, 野田, 2026 年 3 月.
3. 熊井真帆・鹿又宣弘, 「BAPED 誘導体を含む吸収液の CO₂ 吸収放散性能評価」, 日本化学会第 106 春季年会, 野田, 2026 年 3 月.
4. 鎌田祐輝・菅原翼・吉川初・堀莉里花・宮下裕輔・鹿又宣弘・小野龍太郎・柿沼匡希・小野雄輝・佐藤優次・鹿島拓巳・金高峰土, 「Negishi カップリングと分子内 Glaser 環化を用いた[10]パラシクロファン類の短工程合成」, 第 89 回有機合成化学協会関東支部シンポジウム-新津シンポジウム, 新津, 2025 年 11 月.

5. 杉山蒼・鎌田祐輝・藤安陽介・鹿又宣弘, 「塩基性条件の検討による不斉ジヒドロフラン化反応の効率化」, 第 89 回有機合成化学協会関東支部シンポジウム－新津シンポジウム, 新津, 2025 年 11 月.
6. 鹿島拓巳・鎌田祐輝・鹿又宣弘, 「[8]パラシクロファジイン類の歪み促進型アジド-アルキン環化付加反応における置換基効果と溶媒効果」, 第 89 回有機合成化学協会関東支部シンポジウム－新津シンポジウム, 新津, 2025 年 11 月.
7. 金高峰土・鹿又宣弘, 「窒素上に架橋鎖末端を有する新規[10]パラピリジノファジニウム塩の合成」, 第 89 回有機合成化学協会関東支部シンポジウム－新津シンポジウム, 新津, 2025 年 11 月.
8. 金高峰土・鹿又宣弘, 「新規な[10](1,4)ピリジノファジニウム塩の合成とその性質」, 第 54 回複素環化学討論会, 東京, 2025 年 10 月.
9. 杉山蒼・鎌田祐輝・藤安陽介・鹿又宣弘, 「ピリジノファン触媒を用いた不斉ジヒドロフラン化反応におけるクラウンエーテルの加速効果」, モレキュラー・キラリティー2025, 名古屋, 2025 年 5 月.
10. 鎌田祐輝・鹿島拓巳・金高峰土・鹿又宣弘, 「面不斉架橋ニコチン酸類の結晶構造解析とキラル結晶特性」, モレキュラー・キラリティー2025, 名古屋, 2025 年 5 月.

● **競争的資金**

1. 科学研究費補助金 挑戦的研究 (萌芽), 「相分離・相混和スイッチングを活用した二酸化炭素吸収・放散システムの創製」 (研究代表者).

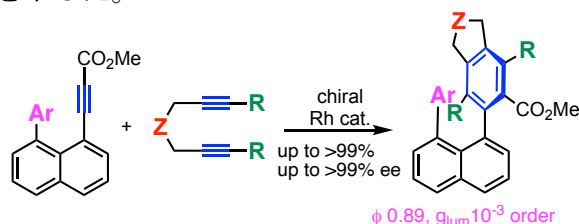
● **学内研究助成**

1. 特定課題研究助成費 (研究基盤形成), 「光学活性ピリジニウムイリドを触媒とする不斉ジヒドロフラン化反応の探索」 (研究代表者).

研究レビュー

(1) 1,8-ジアリールナフタレン類の初の触媒的不斉合成とキロプティカル特性の評価

本研究では、Rh 触媒による [2+2+2] 付加環化反応を鍵とし、軸不斉を有する 1,8-ジアリールナフタレン類の初の触媒的かつエナンチオ選択的合成法を開発した。不斉配位子として BINAP 誘導体を用いることで、広い基質適用範囲において 99%ee を超える高い鏡像異性体過剰率を達成した。従来は対称体や光学分割に依存していた本キラル骨格に対し、直接的な不斉合成を可能にした点に新規性がある。さらに、ピレンやジベンゾカルバゾールなどの発光性置換基を導入することで、高い蛍光量子収率（最大 0.89）と円偏光発光 ($|g_{lum}|$ 最大 1.6×10^{-3}) を示すことを明らかにし、機能性キラル材料としての可能性を示した。

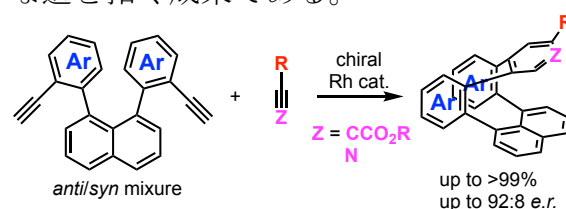


2. *Org. Lett.*, **2025**, 27, 4524-4528.

(2) 安定な固有キラリティを有する鞍型化合物の付加環化反応によるエナンチオ選択的合成

本研究では Rh 触媒を用いた [2+2+2] 付加環化反応により、固有キラリティーを有する鞍型分子をエナンチオ選択的に合成する新手法を開発した。1,8-ナフチレン骨格を有する 1,10-ジインとアルキノエートを基質とし、適切なキラル配位子および対アニオンの最適化により、高収率かつ高エナンチオ選択的に熱的に極めて安定なキラルな鞍型構造を有する環化生成物を得た。本反応では、原料のジインが *anti/syn* の混合物であるが、反応条件下において両異性体間で平衡混合物となるため、結果として *syn* 体のみが反応する。さらに本反応では、アルキンに関し

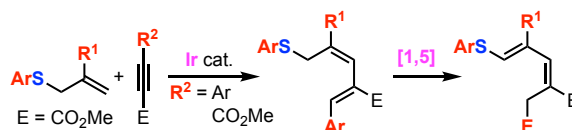
て広い基質適用範囲を示した。さらに含窒素基質としてアリールシアニドを用いたヘテロ [2+2+2] 反応への展開も可能であり、ピリジン環を導入した骨格の構築も可能である。従来困難であった鞍型炭素骨格のエナンチオ選択的構築に新たな道を拓く成果である。



3. *Chem. Eur. J.*, **2025**, e202501193.

(3) アルキノエートを用いた Ir 触媒による硫黄配向ビニル C-H アルケニル化による 1,3-ジエンの立体選択的合成

本研究は、遷移金属触媒による C-H 活性化を基盤に、硫黄系配向基を活用した新規 C-H アルケニル化反応を開発したものである。従来、硫黄は触媒毒性の問題から利用が限定的であったが、本研究ではカチオン性イリジウム触媒を用い、アリールメタリルスルフィドとアルキノエートの反応により、高選択的に硫黄含有 1,3-ジエンを合成する手法を確立した。特にジメチルアセチレンジカルボキシレートでは、生成物の二重結合が異性化し、完全な立体選択性で生成物が得られた。この異性化は重水素標識実験から熱的 1,5-シグマトロピー転位に起因することが示唆された。一方、フェニルプロピオレートでは、低転化率条件により異性化を抑制することにより、高い位置および立体選択性を達成した。



4. *Asian J. Org. Chem.*, **2025**, e00192.

研究業績

- 原著論文（査読あり）

1. T. Shibata, R. Tokutake, M. Ito, “TfOH-catalyzed Markovnikov-selective hydrothiolation of tri- and tetrasubstituted alkenes”, *Tetrahedron Lett.*, **2025**, *160*, 155550. DOI: 10.1016/j.tetlet.2025.155550
2. T. Shibata, H. Nikawa, E. Kadosaka, M. Ito, T. Taniguchi, K. Monde, “Enantioselective Synthesis of Axially Chiral 1,8-Diarylnaphthalenes by Rh-Catalyzed [2 + 2 + 2] Cycloaddition and Evaluation of Their Chiroptical Properties”, *Org. Lett.*, **2025**, *27*, 4524-4528. <https://doi.org/10.1021/acs.orglett.5c01037>
3. T. Shibata, M. Nakada, K. Senda, M. Ito, “Catalytic and Enantioselective Synthesis of Inherently Chiral Saddle-Shaped Compounds by [2 + 2 + 2] Cycloaddition of 1,8-Naphthylene-Based 1,10-Diynes with Alkynoates”, *Chem. Eur. J.*, **2025**, e202501193. <https://doi.org/10.1002/chem.202501193>
4. T. Shibata, H. Marumo, “Ir-Catalyzed Sulfur-Directed Vinylic C–H Activation for the Stereoselective Synthesis of 1,3-Dienes Using Alkynoates”, *Asian J. Org. Chem.*, **2025**, e00192. <https://doi.org/10.1002/ajoc.202500192>
5. K. H. N. Tang, T. Kishi, N. Sugimura, Y. Horio, T. Shibata, “Ligand-Governed Regio- and Enantioselective [2 + 2 + 2] Cycloaddition of 1,7-Enynes: Assembly of the Benzo[*c*]chromen-1-ol Backbone and Access to Enantioenriched Cannabinol Bioisostere”, *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, *147*, 6214-6226. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c18319>
6. M. Kadota, K. H. N. Tang, T. Shibata, “Ir-catalyzed distal branch- and enantioselective hydroarylation of internal alkenes using acetanilides via chain-walking and C-H activation”, *Tetrahedron Lett.*, **2025**, *173*, 155823. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2025.155823>
7. T. Otani, Y. Wu, K. Ueda, Y. Ikeda, Y. Tada, N. Kinoshita, T. Shibata, “Tetraaza[7]-[15]helicenes Synthesized by Two-Step Strategy: Length-Controlled Chiral π -Systems Exhibiting Amplified Circularly Polarized Luminescence”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2026**, e24463. <https://doi.org/10.1002/anie.202524463>
 - Selected as a Hot Paper
 - Selected as a front cover
8. Y. Wu, C. Kumagai, N. Sugimura, T. Shibata, “Synthesis of Aryl-Substituted Hexa-Alkynyl Hexaazatrinaphthylenes via Sonogashira Coupling and Evaluation of Their Photophysical Properties”, *Chem. Asian J.*, **2026**, *21*, e01003. <https://doi.org/10.1002/asia.202501003>
9. H. Takahashi, T. Shibata, “Iridium-Catalyzed Linear-Selective sp^3 C–H Alkylation of *N*-Methylamides Using Alkenes Enabled by Diphosphite Ligands”, *Chem. Eur. J.*, **2026**, e202670913. <https://doi.org/10.1002/chem.70913>

- 国際会議

1. Y. Wu, “Synthesis of a New Family of Triple Polyazahelicenes Using Hypervalent Iodine-Mediated Oxidative Cyclization”, 8th International Conference on Hypervalent Iodine Chemistry (ICHIC-8), Tianjin (China), 2025 年 6 月.
2. T. Shibata, “Marriage” of C–H Activation and Chain-Walking: Ir-Catalyzed Hydroarylation for the Remote Functionalization”, 16th European Congress on Catalysis (EUROPACAT 2025), Trondheim (Norway), 2025 年 9 月.

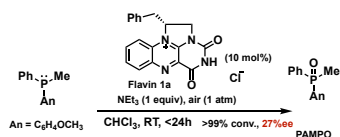
- 競争的資金

1. 公益財団法人長瀬科学技術振興財団 研究助成「不活性結合活性化とチェーンウォーキングの融合による不斉官能基化」柴田 高範（代表）

研究レビュー

(1) Oxidation of phosphorous compounds.

山本研では不斉酸化反応を利用したリン不斉化合物の実用的合成法の開発に取り組んでいる。これまで一般的な反応条件に加え、触媒構造や補助剤の影響についてモデル基質の立体選択性を検討したが、顕著な相関は見られず、最高でも 27%ee であった。今年度は、基質構造と立体選択性の相関に焦点を当てて調査を行なった。

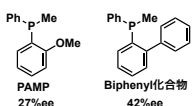


基質として、嵩高さや電子的性質の異なる 6 種類の基質を設計・合成した。先行研究により最適化されたフラビン誘導体触媒および反応条件下で不斉酸化反応を実施し、生成物の光学純度の経時変化を測定した。

その結果、立体効果、電子的効果、および置換基の水素結合能が複合的に立体選択性に影響することが示唆された。特に、電子的性質が類似した基質間では嵩高さの増大に伴い立体選択性が向上する傾向が見られた一方、CF₃置換基ではその嵩高さにも関わらず選択性が低下するなど、基質依存性の高い挙動が見られた。

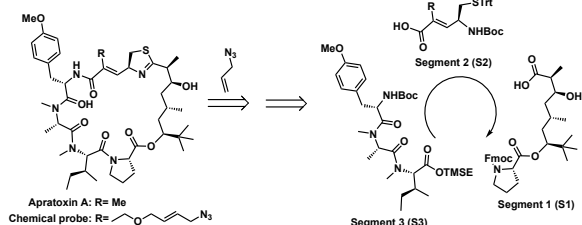
注目すべき点として、ビフェニル基について基質において、42%ee の立体選択性が再現性よく得られたことが挙げられる。現在、この化合物およびその誘導体の合成を進めており、立体選択性の主因を検討している。

注目の点として、ビフェニル基について基質において、42%ee の立体選択性が再現性よく得られたことが挙げられる。現在、この化合物およびその誘導体の合成を進めており、立体選択性の主因を検討している。



(2) Natural product syntheses.

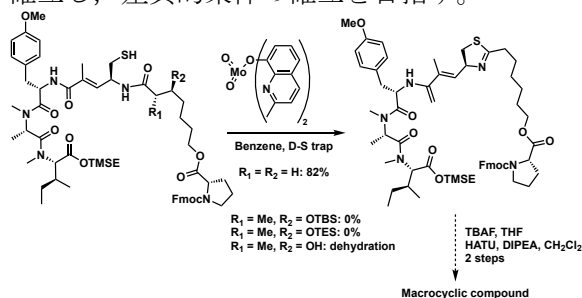
(2-1) Apratoxin (Apx)-based chemical probes



今年度も中尾研究室との共同研究により、天然物 Apratoxin (Apx) の作用機序解明を目的とした分子プローブの合成に取り組んだ。これまでに、天然物誘導体を構成するフラグメント合成を完了しており、特に不斉中心が集中するポリケチド部位については、高立体選択的に総収率 9.9% で合成を達成した。また各

フラグメントを従来とは異なる順序で縮合することで、短工程合成の実現を目指している。

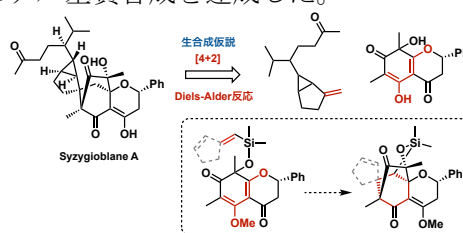
全合成の鍵反応の一つはペプチド存在下でのチアゾリン環化であるが、Mo 触媒の起用により脱水縮合が進行し、環化前駆体までの合成を達成した。一方、より天然物に近い化合物では同触媒では反応しなかった。これは嵩高い 34 位水酸基の保護基に起因すると考えられる。今後は、嵩高さや脱保護条件を考慮した別の保護基への変更を検討し、最適条件を確立し、差別的条件の確立を目指す。



なお、現在の ApxA 基盤で用いている *t*Bu 基を導入は再現性のほか試薬確保が問題となったため、天然物合成確立後は、同程度の活性を有し *i*Pr 基を持つ ApxC 基盤のプローブに切り替える計画である。*i*Pr 基導入については、グリニャール試薬による良好な結果を確認している。

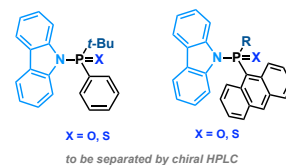
(2-2) Synthetic studies toward Sygioblane A

新規に天然物 Sygioblane A の合成に着手し、生合成仮説に基づく鍵反応の検証のためのモデル基質合成を達成した。



(3) P-Chiral chiroptical materials.

新たに阪大および中央大学（韓国）との共同研究として、リン不斉中心を導入した光電子分子の設計・合成に着手した。*P*-キラリティが電子状態、励起状態特性、分子配列および円偏光発光特性に与える影響を明らかに



し、キラリティを設計変数として活用する新しい光電子分子設計の可能性を探索する。

研究業績

- 論文発表

Fujimoto, J.; Suruga, E.; Sugimura, N.; Yamamoto, K.* Structure–selectivity correlation in asymmetric baeyer–villiger oxidation of 3-arylcyclobutanones by a flavinium ion-pair catalyst. *Tetrahedron Letters* **2025**, 171–172(May), 155826. doi:10.1016/j.tetlet.2025.155826.

Ajith Yapa Mudiyansele, Sridhar Viamajala, Sasidhar Varanasi, Kana Yamamoto*
“Cross-metathesis of methyl oleate and cis-2-butene-1,4-diol: a direct route to bifunctional polymer building block” *Synthesis* **2026**. doi: 10.1055/a-2845-3635

- 学会発表

○角野裕基・京本航・成石梓・Ren Weiwen・中尾洋一・山本佳奈「天然物アプラトキシンの作用機序解明に向けたケミカルプローブの合成」
第 88 回工学院大学シンポジウム 5/17, 2025. (Oral)

○Kana Yamamoto・Wataru Kyomoto・Hiroki Kadono・Shintaro Kawai・Azusa Nariishi・Weiwen Ren「Progress toward the synthesis of apratoxin-based chemical probes」
ACS Annual Meeting, Washington D.C.,8/17-21,2025. (Oral)

○Kana Yamamoto・Zhu Ruiqi・Ziying Jin・Shunji Takemura・Jonax Chan・Motonari Asano Masahiro Kobayashi「Towards new routes for P-chirogenic compounds: Asymmetric oxidation of phosphines」
ACS Annual Meeting, Washington D.C.,8/17-21,2025. (Poster)

○角野裕基・京本航・成石梓・Ren Weiwen・河合信太郎・中尾洋一・山本佳奈「天然物アプラトキシンの作用機序解明に向けたケミカルプローブの合成」
第 127 回有機合成化学協会シンポジウム, 11/6, 2025. (Poster)

○麻野志成・Zhu Ruiqi・Jin Ziying・武村俊志・小林将大・Chan Jonax・山本佳奈「フラビン誘導体を用いた触媒的リン不斉酸化反応の開発」
第 127 回有機合成化学協会シンポジウム, 11/6, 2025. (Poster)

○角野裕基・京本航・成石梓・Ren Weiwen・河合信太郎・中尾洋一・山本佳奈「Apratoxin A の作用機序解明に向けたケミカルプローブの合成」
第 106 回日本化学会春季年会, 3/17-20, 2025. (Oral)

- 競争的資金

山田科学振興財団 2024 年度研究援助「不斉酸化と動的速度論的光学分割を用いるリン不斉中心構築法の開発」(代表)
令和 5 年 11 月—令和 7 年 3 月

- 学内研究助成

特定課題(研究基盤形成)「不斉酸化による動的速度論的光学分割を伴う、新規リン不斉中心構築法の開発」(代表)

無機物質化学研究室（石井研究室）

研究レビュー

(1) 一次元らせんペロブスカイト薄膜の光電流・スピン物性の解明

円偏光の検出は、複屈折や応力の可視化を可能とする技術として注目されている。本研究ではこれまでに、有機キラル分子とハロゲン化鉛からなる一次元らせん構造薄膜デバイスを構築し、紫外領域において円偏光を高感度に直接検出できることを実証してきた (*Science Adv.* 2020, *Angew. Chem. Int.* 2025)。この特性は、構造全体のキラリティ（空間反転対称性の破れ）と重原子由来の強いスピン軌道相互作用に起因すると考えられる。今回、ヨウ化鉛系一次元らせんペロブスカイト薄膜の光電流および磁気応答を走査型プローブ顕微鏡 (SPM) により評価し、スピンが関与する光電磁物性の解明を行った（論文投稿中）。

PbI_2 は、1-NEA⁺と反応し、 $[\text{PbI}_6]^{4-}$ の六配位八面体が面共有で連結した一次元らせん構造 (*R/S*-1-NEA) PbI_3 を形成する (Fig. 1a)。本結晶は、キラル空間群 $P2_12_12_1$ に属し、分子の立体配置に応じてらせん鎖の巻き方向が反転する。これに対応して、400 nm 付近に強い円二色性 ($g_{\text{CD}} = 0.08$) が観測された。これらの薄膜デバイスは、左右円偏光に対して高い消光比を持つ光電流応答を示し、円偏光励起によるスピン偏極状態の形成が光電流に寄与していることが示唆された。さらに、SPM 測定により紫外光照射下で電流像の増加が確認され、KPFM 測定ではデバイス断面の表面電位の上昇が観測された (Fig. 1c)。加えて、電流像と磁気力像の同時測定により、*R*体と*S*体で異なる応答が確認され、

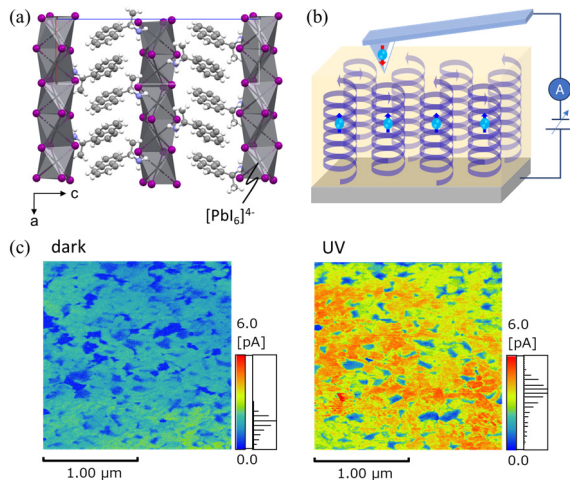


Fig. 1 (a) The crystal structure of (*S*-1-NEA) PbI_3 . (b) Schematic diagram of SPM measurement setup and (c) current images of (*R*-1-NEA) PbI_3 thin films under dark and UV light irradiation.

一次元らせんペロブスカイト表面におけるスピン偏極状態の形成への寄与が示唆された。

(2) 近赤外光線力学療法に向けたアップコンバージョン駆動型一重項酸素生成材料の創製

光線力学療法 (PDT) は低侵襲性で局所治療が可能であり、薬剤耐性の問題が少ないことから、有望ながん治療法として注目されている。クロロフィルは紫外・可視光照射により一重項酸素を生成するため、PDT の光増感剤 (PS) として利用されてきた。しかし、紫外・可視光は生体透過性が低く、生体深部での治療には適さないという課題がある。また、現在用いられている PS の多くは高価で、合成プロセスが複雑である。本研究では、近赤外光を可視光に変換するアップコンバージョン技術 (*Adv. Photon. Res.*, 2023, *Adv. Opt. Mater.*, 2025) と天然由来色素を組み合わせることで、近赤外光照射下で一重項酸素生成の実現を目指している。さらに、生体応用を視野に薄膜での一重項酸素生成についても検討を行った。

天然色素から抽出したクロロフィル誘導体 (MPPa) を DMF に溶解し、希土類系アップコンバージョン粒子 (UCNP) を分散させた溶液に近赤外光 (980 nm) を照射した。一重項酸素検出試薬として 1,3-ジフェニルイソベンゾフラン (DPBF) を用いて、MPPa 溶液と混合した際の吸収スペクトル変化を観測した (Fig. 2)。近赤外光照射により、DPBF に由来する吸収帯の減少が確認され、一重項酸素の生成が示された。さらに、MPPa を含む薄膜試料においても、同様に近赤外光照射下で一重項酸素の生成が確認された。以上より、MPPa を用いることで、溶液および薄膜のいずれの条件下においても、近赤外光照射下で一重項酸素を生成できることが明らかとなった（論文審査中）。

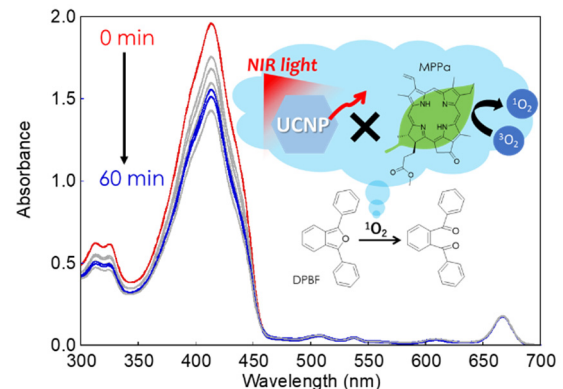


Fig. 2 Absorption spectral change of DPBF in DMF with MPPa and UCNP under irradiation with 980 nm.

研究業績

●原著論文

- [1] A. Ishii, S. Matsumura, M. Taima, T. Yamanaka, R. Komatsuzaki, "Photon Management in Lanthanide Hybrid Materials: Upconversion and Quantum Cutting for Broadband Light Harvesting", *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, 66, 100738 (2026).
- [2] R. Nakamura, Y. Sawamura, K. Nakada, R. Mizoguchi, A. Ishii, T. Yamashita, H. Yokota, G. J. Richards, and A. Hori, "Red-fluorescence under UV and green-SHG under NIR dual-mode emission in yellow crystal of 1,2,5-thiadiazole derivative", *Chemical Communications*, 62, 1836-1840 (2026).
- [3] A. Ishii, S. Matsumura, M. Ota, R. Mizoguchi, T. Miyasaka, "NIR-Harvesting Upconversion CsPbI₃ Perovskite Solar Cells with Dye-Hybridized Nanoparticles", *Advanced Optical Materials*, 13, 33, e01682 (2025).
- [4] K. Oyama, A. Ishii, S. Matsumura, T. G. Oyama, M. Taguchi, and M. Suzuki, "Spatiotemporal temperature control by holographic heating microscopy unveils cellular thermosensitive calcium signalling", *Lab on a Chip*, 25, 5863-5874 (2025).
- [5] Z. Liu, Q. Zhao, Y. Song, S. Sasaki, A. Ishii, N. Shibayama, X. Wang, M. Ikegami, N. Saito, S. Duan, H. Tamiaki, T. Miyasaka, X. Wang, "Achieving high-performance bio-inspired perovskite solar cells via molecular-level dual-function interface engineering", *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 167, 101129 (2025).
- [6] A. Ishii, M. Noto, D. Nakamura, S. Matsumura, K. Suzuki, "Evaluation of internal quantum efficiency in MAPbI₃ single crystals via omnidirectional photoluminescence spectroscopy", *Chemistry Letters*, 54, 9, upaf153 (2025).

●学会発表

<日本物理学会2026年春季大会オンライン開催, 2026年3月23日-26日>

- [1] 石井あゆみ, 鈴木ひかり, 中村大輝, 木下雄介, 中野和志, 田中慎二, 伊藤哲明「キラル分子による一次元らせんペロブスカイト結晶の光電磁物性制御」

<日本化学会第106春季年会 (2026), 日本大学理工学部 船橋キャンパス, 2026年3月17日-20日>

- [2] 小松崎 涼太, Truptimayee Behera, 木下 雄介, 石井 あゆみ「近赤外光線力学療法に向けたアップコンバージョン駆動型一重項酸素生成材料の創製」

- [3] 松村 脩平, 秋山 誠治, 石井 あゆみ 「有機・無機ハイブリッド構造による希土類アップコンバージョンナノ粒子の発光増強」

- [4] 山中 匡, 坪山 明, 石井 あゆみ「希土類添加ハロゲン化鉛ペロブスカイトにおける量子切断型近赤外発光の励起光強度依存性」

- [5] 杉本 翔牙, 木下 雄介, 田中 慎二, 甲村 長利, 石井 あゆみ「フェナントレン系有機キラル分子を用いたハロゲン化鉛ペロブスカイトの低次元キラル構造と光学特性」

<電気化学会第93回大会, 東京理科大学 野田キャンパス, 2026年3月17日-19日>

- [6] 石井あゆみ「一次元らせんペロブスカイトの特異光電磁物性とキラル分子による制御」

<第73回応用物理学会春季学術講演会, 東京科学大学 大岡山キャンパス, 2026年3月15日-18日>

- [7] 鈴木ひかり, 藤井岳直, 小暮亮雅, 石井あゆみ「一次元らせんペロブスカイト薄膜の光電流・スピン物性評価」

- [8] 堀田駿介, 中村大輝, 木下雄介, 石井あゆみ「pH応答性キラルカチオンを利用した低次元ペロブスカイトの構造制御と光機能発現」

<The 2nd RIST International Symposium: Carbon Value Science & Technology, Tokyo University

of Science, Noda Campus, March 9-12, 2026 >

[9] Shuhei Matsumura, Ayumi Ishii 「Enhanced Upconversion Luminescence in Lanthanide-based Hybrid Nanomaterials for Broadband Solar-light Utilization」

<The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu, Hawaii, USA, December 15-20, 2025 >

[10] Hikari Suzuki, Daiki Nakamura, Ishii Ayumi 「Enhanced circularly polarized light detection properties in Pb(II)/Bi(III)/Te(IV)-based one-dimensional helical perovskite crystalline films」

[11] Daiki Nakamura, Hikar Suzuki, Yusuke Kinoshita, Shinji Tanaka, Nagatoshi Koumura, Ayumi Ishii 「Control of spatial inversion symmetry breaking in one-dimensional helical perovskites single crystal with organic chiral molecules.」

[12] Shuhei Matsumura, Ryusuke Mizoguchi, Ayumi Ishii 「Synthesis and Photophysical Properties of Dye-sensitized Lanthanide Up-conversion Nanoparticles」

<第86回応用物理学会秋季学術講演会, 名城大学 天白キャンパス, 2025年9月7日-10日 >

[13] 鈴木ひかり, 中村大輝, 石井あゆみ 「一次元らせん構造を有するPb(II)/Bi(III)/Te(IV)系ペロブスカイト薄膜デバイスの円偏光検出特性」

[14] 中村大輝, 鈴木ひかり, 木下雄介, 石井あゆみ 「有機キラル分子による一次元ヨウ化テルル単結晶の空間反転対称性の制御とバルク光起電力効果」

<2025年光化学討論会, 立教大学 池袋キャンパス, 2025年9月4日-6日 >

[15] Ryota KOMATSUZAKI, Truptimayee BEHERA, Yusuke KINOSHITA, Ayumi ISHII 「NIR Light-Driven Singlet Oxygen Generation by Chlorophyll Derivatives via Lanthanide Upconversion Nanoparticles」

[16] Shuhei MATSUMURA, Yusuke KINOSHITA, Ayumi ISHII 「Development of Photofunctional Hybrid Materials Based on Lanthanide Up-conversion Systems」

[17] 鈴木ひかり, 中村大輝, 木下雄介, 田中慎二, 甲村長利, 石井あゆみ 「可視円偏光検出に向けたBi系一次元らせんペロブスカイトの創製」

[18] 當麻真由, 松村脩平, 太田充紀, 溝口隆介, 木下雄介, 石井あゆみ 「水素生成光触媒の可視光応答に向けた希土類系紫外アップコンバージョン材料の開発」

[19] 廣比祐貴, 木下雄介, 佐藤来希, 田中慎二, 甲村長利, 石井あゆみ 「ナフチルエチルアミン系有機キラル分子を用いた無機一次元らせん配列の制御と光学特性」

[20] 安田遥花, 木下雄介, 鈴木健吾, 石井あゆみ 「ペロブスカイトナノ結晶の低次元キラル構造制御と発光特性」

[21] 中村大輝, 鈴木ひかり, 堀田駿介, 中野和志, 木下雄介, 伊藤哲明, 石井あゆみ 「一次元らせん構造を有するハロゲン化鉛ペロブスカイトの電子状態とキラル光学特性の解明」

<247th ECS Meeting (The Electrochemical Society), Palais des Congrès de Montréal, Canada, May 18-22, 2025 >

[22] H. Suzuki, D. Nakamura, Y. Kinoshita, and A. Ishii 「Chiroptical Devices Using Pb(II)/Bi(III)/Te(IV)-Based One-Dimensional Helical Perovskites」

●招待講演

[1] The 2nd RIST International Symposium: Carbon Value Science & Technology, Tokyo University of Science, Noda Campus, March 9-12, 2026

石井あゆみ 「Broadband Photon Management in Lanthanide-Doped Perovskites」

[2] The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025), Honolulu, Hawaii, USA, December 15-20, 2025

Ayumi Ishii 「Spin-induced Photoelectronic Functions in One-dimensional Helical Perovskites」

[3] Materials Research Meeting 2025 (MRM, Pacifico Yokohama North, December 8-13, 2025

石井あゆみ 「Spin-driven Photoelectric Conversion in One-dimensional Helical Perovskites Nanomaterials」

- [4] コロイド先端技術講座2025：コロイド・界面化学が繋ぐエネルギーハーベスティング，同志社大学東京サテライト・キャンパス，2025年12月5日
石井あゆみ「有機無機界面制御による次世代光エネルギー変換システムの創製」
- [5] The 14th International Conference on High-Performance Ceramics (CICC-14) , Haikou, China , November30 to December3, 2025
石井あゆみ「NIR-harvesting Lead Halide Perovskite Solar Cells with Lanthanide-based Upconversion Nanoparticles」
- [6] シンポジウム「ペロブスカイト科学のフロンティア～材料から応用まで～」，千葉大学西千葉キャンパス ，2025年11月14日
石井あゆみ「ペロブスカイトによる次世代光センシング～“見えない光情報”を“見える光情報”に～」
- [7] 25-1無機高分子研究会 ，積水化学工業株式会社 京都研究所・研修センター ，2025年10月17日-18日
石井あゆみ「有機無機ハイブリッド低次元材料が拓く革新的光・スピン機能」
- [8] OPTICAL PROBES, OHORI PARK NOH THEATRE (大濠公園能楽堂) , 2025年9月21日-26日
- [9] 石井あゆみ「Spin-selective Photodetection and Bulk Photovoltaic Effect in One-dimensional Helical Perovskites」
- [10] ISSPワークショップ【先端的分光計測・化学イメージングが描き出す、次世代化学研究】，東京大学 物性研究所, 2025年9月5日-6日
石井あゆみ「低次元ナノ材料が拓く次世代光イメージング」
- [11] 理工学部創立60周年記念事業「The 15th International Mini-symposium on Coordination Chemistry for Advanced Materials」，青山学院大学 相模原キャンパス, 2025年9月2日
Ayumi Ishii 「Spin-Induced Optical Functions in Low-Dimensional Organic-Inorganic Hybrid Materials」
- [12] International Conference on Nanoscale, Single-Molecule and Related Spectroscopies[NSM], Hokkaido University Conference Hall, 2025年9月1日-5日
Ayumi Ishii 「Spin-induced Photoelectric Functions in One-dimensional Helical Materials with Organic-inorganic Hybrid Structures」
- [13] 2025 KJF International Conference on Organic Materials for Electronics and Photonics(KJF-ICOME 2025), Osaka International Convention Center (OICC), 2025年8月25日-28日
Ayumi Ishii 「One-dimensional Helical Hybrid Perovskites for Opto-spintronics Devices」
- [14] 33rd International Materials Research Congress (IMRC2025), Cancún Center in Cancún, Mexico, 17 to 21 August, 2025
Ayumi Ishii 「Molecularly Engineered One-Dimensional Helical Hybrid Perovskites for Opto-Spintronics Devices」
- [15] International Symposium on Solar Energy 2025 (ISSE 2025), Hall A&B, I2CNER, Kyushu University, 2025年7月23日-24日
Ayumi Ishii 「Spin-Induced Photo-Electric Functions in One-Dimensional Helical Perovskite」
- [16] トピカルミーティング「アシンメトリ量子物質の新展開：多極子のスケールシームレス化に向けて」 ，山梨県立図書館, 2025年6月11日-13日
石井あゆみ「一次元らせん物質が拓く光とスピンの新展開」
- [17] 25-1有機エレクトロニクス研究会 ，東京科学大学大岡山キャンパス西9号館デジタル多目的ホール, 2025年6月3日
石井あゆみ「有機無機ハイブリッド一次元らせん材料による新しい光・スピンデバイス機能」
- [18] 247th ECS Meeting (The Electrochemical Society), Palais des Congrès de Montréal, Canada, May 18-22, 2025

Ayumi Ishii 「Spin-Induced Photo-Electric Conversion in One-Dimensional Helical Perovskites」

- [19] Molecular Chirality 2025, 名古屋大学, 2025年5月16日-17日
石井あゆみ 「有機無機ハイブリッド一次元らせんマテリアルによる特異光スピン機能」
- [20] 強光子場科学研究懇談会(JILS), パシフィコ横浜, 2025年4月25日
石井あゆみ 「有機無機ハイブリッド一次元らせんマテリアルによる光・スピン情報の検出と利用」

●受賞

- [1] 【Poster award】 Shuhei Matsumura 「Enhanced Upconversion Luminescence in Lanthanide-based Hybrid Nanomaterials for Broadband Solar-light Utilization 」 The 2nd RIST International Symposium: Carbon Value Science & Technology
- [2] 【関根吉郎賞】 鈴木ひかり 「一次元らせんペロブスカイトを用いた円偏光検出デバイスの創製と特異光電磁物性の解明」

●競争的資金

- [1] 国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）CREST 「ナノ物質を用いた半導体デバイス構造の活用基盤技術」領域, 「一次元有機無機ハイブリッドらせんナノ物質による近未来光デバイス技術の創出」 （研究代表, 2023~2028年度）
- [2] 国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）A-STEP産学共同（育成型）, 「光エネルギー超高効率利用を可能とする有機無機ハイブリッドアップコンバージョン材料の開発」 （研究代表, 2023~2025年度）
- [3] 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）官民による若手研究者発掘支援事業／共同研究フェーズ 「可視・近赤外ソーラー水素製造に向けたアップコンバージョン光触媒システムの開発」 （研究代表, 2023~2026年度）

研究レビュー

(1) 紡錘体軸配向制御の解析

多細胞生物において、細胞分裂の向きは細胞の分化や組織の極性の維持にとって重要である。HeLa 細胞において Cep169 を発現抑制すると紡錘体軸の角度に異常が起きることから、Cep169 は dynein/dynactin 複合体の構成因子のうち、dynactin のサブユニット Arp1 と相互作用し、この相互作用が紡錘体軸の配向制御に関わることを解明した。

(2) CEP169 の増殖制御解析

CEP169 が 1-135 aa 領域を介して自己会合する AlphaFold3 等のツールを用いて CEP169 の自己会合部位を解析した結果、その候補として、10 個の残基が同定された。CEP169 の 1-135 aa 領域を欠失した CEP169- Δ N を RPE1 細胞に外因的に発現させたところ、ドミナントネガティブ効果により細胞増殖が抑制された。このことから、CEP169 の 1-135 aa 領域が細胞増殖に関する機能をもつことが示唆された。

(3) がん抑制タンパク質 p53 による多極紡錘体形成の修復機構の解析

CEP169 を発現抑制すると多極紡錘体が形成するが、がん抑制タンパク質 p53 が修復に関係していることを明らかにした。さらに、p53 が持つどのようなドメインが多極紡錘体形成の修復に関与しているのかを明らかにする目的で、HCT116 p53^{-/-}細胞に p53^{WT}、および、四量体の p53 の遺伝子を導入したところ、四量体形成ができない変異型 p53 では修復

できなかつたことから、p53 の四量体を形成が多極紡錘体形成の修復には重要であることが明らかになった。p53 の四量体形成は転写制御に重要であることから、p53 の転写制御因子の一つである p21 による細胞周期のチェックポイントによる停止機構が多極紡錘体形成の修復に関与していることが示唆された。

(4) SASP を伴う老化細胞を特異的に除去する化合物の探索

一部の老化細胞は老化随伴分泌現象 (Senescence-Associated Secretory Phenotype, SASP) と呼ばれる炎症性サイトカインやケモカインを細胞外に分泌する現象を呈する。分泌されるタンパク質は SASP 因子と呼ばれ、周囲の細胞に作用し組織の過剰炎症を亢進させることで加齢性疾患の悪化の要因となることが示唆されている。SASP 因子の一つである IL-8 の発現を指標とした老化細胞を特異的に除去するスクリーニング系の開発に成功した。分子標的が判明している 6670 化合物からなる化合物ライブラリーを用いてスクリーニングを行った結果、3 次候補化合物の中で、有力な候補化合物として最終的に 2 個の異なる化合物を得ることができた。この化合物の分子標的は細胞膜を貫通する薬剤排出ポンプとして機能するタンパク質で、このタンパク質の機能を RNA 干渉で遺伝子発現を抑制し機能を損傷させると、化合物と同様に老化細胞のみを死滅させる効果があることが明らかになった。今後、この化合物をリード化合物として利用できるか否かを製薬会社との共同研究で行う予定である。

論文・総説・その他

●論文

1. Marina Awaji, Yuichiro Asai, Koh Fukuchi, Yasuhiko Terada, Junji Seino, “Computational Chemical Analysis of the Molecular Mechanisms of Proteins Involved in Chromosome Segregation” J. Comput. Chem. Jpn. 24, 102 (2025).

●学会発表

1. 今井俊輔、寺田加奈子、山本康生、栗原颯太、寺田泰比古 “中心体タンパク質 CEP169 の細胞増殖における機能解明” 第 48 回 日本分子生物学会、横浜、2025 年 12 月.
2. 寺田加奈子、石毛碧、波江野杏珠、今井俊輔、中山実咲、寺田泰比古 ”p53 は中心タンパク質 CEP169 発現抑制時の多極紡錘体形成を抑制する” 第 48 回 日本分子生物学会横浜、2025 年 12 月.
3. 上原理紗子、剣持浩一、鈴木希奏、寺田泰比古 “SASP を伴う老化細胞を特異的に除去する化合物の探索” 日本分子生物学会、横浜、2025 年 12 月.
4. 山本康生、森勇介、新富美雪、堂田怜香、井上陽子、倉持尚吾、今井俊輔、寺田泰比古 “中心体タンパク質 Cep169 は紡錘体軸の適切な配向を制御する” 第 48 回 日本分子生物学会、横浜、2025 年 12 月.
5. 淡路茉里奈、浅井裕一郎、宗安麻衣、寺田泰比古、清野淳司 “染色体分配に関連するタンパク質の分子メカニズムの計算化学的な解析” 日本コンピュータ化学会 2025 春季年会、2025 年 6 月、東京工業大学大岡山キャンパス
6. 淡路茉里奈、浅井裕一郎、宗安麻衣、寺田泰比古、清野 淳司 “染色体分配に關与するタンパク質の実験的・計算化学的手法による分子メカニズムの解明” 第 98 回日本生化学会大会、2025 年 11 月、国立京都国際会館

●競争的資金

1. 公的研究費：（2025 年）金沢大学・がん進展制御研究所共同研究(研究代表)
2. 公的研究費：戦略政策情報推進本部戦略事業部（Blockbuster TOKYO）
「Ras の下流のシグナルを完全に遮断する画期的な方法を利用した新規抗がん剤の開発」(研究代表)

ケミカルバイオロジー研究室（中尾研究室）

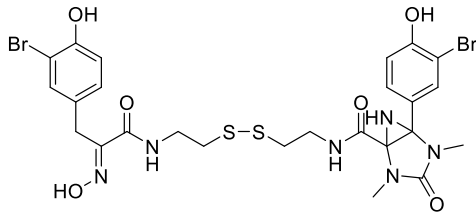
研究レビュー

2025 年度の研究活動について、(1) 海洋生物からの生物活性物質の探索、(2) 機能性食品素材の探索、および (3) AI を基盤とした化学物質の毒性予測システムの開発について報告する。

(1) 海洋生物からの生物活性物質の探索

イタリアおよび日本国内で採集された *Petrosia* 属海綿から見出した新規アセチレン化合物について論文投稿中である。

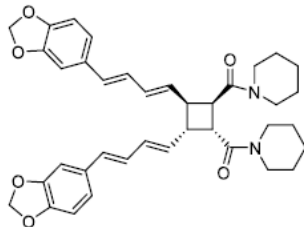
ミクロネシア産 *Aplysilla* 属海綿から、新規ヒストン脱アセチル化酵素阻害剤を見出し、推定構造の決定を行った。[投稿準備中]



(2) 機能性食品素材の探索

食用キノコチャーガ *Inonotus obliquus* から見出した、犬膀胱がんオルガノイドモデルにおける抗がん活性を示した 4 種の既知のランスタン型トリテルペンについて、NMR データの修正も含めて論文投稿中である。

また、マレーシア産黒コショウ *Piper nigrum* から見出した新規アルカロイド類について、DP4+解析を行って立体配置の決定を行った。[投稿準備中]



カカオ成分に含まれるテオブロミンおよびカフェインの混合比率を変えて遺伝子発現解析を行い、混合比率による神経分化誘導活性への影響を解析した。[投稿準備中、招待講演（国際）2]

国産ヘーゼルナッツの生産拡大と活用のため、ヘーゼルナッツに含まれる成分の機能性を調べるとともに、菓子メーカーと共同して国産ヘーゼルナッツを使用したチョコフィナンシェの試作を行った。



試作品をもとに、東京丸の内中通で開催された農林水産省主導の国民運動『ニッポンフードシフト』、および東京ビッグサイトで開催された『アグリビジネス創出フェア 2025』に出展し、社会実装に向けた活動を行った。[競争的資金 2, 下図]



ジャパンフードシフトへの出展

塩焙煎コーヒー豆の製造における、海底湧海水処理条件の検討を行い、特許申請を行った。[特許 1]

(3) AI を基盤とした毒性予測システムの開発
AI を用いた長期毒性予測システム StemPanTox α 版を発展させた β 版の完成に向けて、ヒト ES/iPS 細胞を用いてデータ収集を行っている。[競争的資金 1, 招待講演（国内）]

研究業績

• 原著論文(査読あり)

1. “Bhatnagar, S.; Tse, W. L.; Yoneta, H.; Nakao, Y.; Aoyagi, H. Chemiluminescent and fluorescent properties of extracellular red pigment from *Talaromyces purpureogenus*, *J. photochem. photobiol., B Biol.* (2025). <https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2025.113178>

• 著書

1. 神平梨絵, 中尾洋一, 「AlphaScreen」, 『論文図表を読む作法 PREMIUM』, 編集: 牛島俊和, 中山敬一, 羊土社, 東京, pp162-164, (2025).

• 招待講演 (国際会議)

1. “Verification of the effects of histone modification inhibitors on cell function via intracellular histone modification changes” T. Ichiuvara; Y. Nakao, *The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem 2025)*, ホノルル, 2025年12月16日.
2. “Biological Functions of Cacao Ingredients” Y. Nakao, *The 7th IUMS Outreach Program 2025*, インドネシア ジョグジャカルタ, 2025年8月22日.

• 招待講演 (国内会議)

1. 中尾洋一, 『StemPanTox の活用例: StemPanTox alphaを用いた天然化学化合物の生物活性の予測』, CBI学会2025年大会 (フォーカストセッション 計算科学が支える毒性予測: 幹細胞×AIの挑戦), 東京, 2025年10月30日.

• 特許

1. 発明の名称: コーヒー抽出液の製造方法, 出願日: 令和8年3月23日, 発明者: 中尾洋一, 神平梨絵, 中村文彬, 小野澤真帆, 出願番号: 特願2026-046821, 出願人: 学校法人早稲田大学

• 競争的資金

1. JST A-STEP (本格型) 「細胞科学と AI 技術による毒性・機能性効果予測のシステム開発」 (研究代表者: 喜納惟人, 令和5-8年度).
2. 農林水産省 令和7年度「知」の集積による産学連携推進事業のうちバイオエコノミー推進人材活動支援事業 (第2回公募) 「長野市を中心とした国産ヘーゼルナッツの生産拡大と, 健康に貢献するチョコレートなどへの活用 社会実装モデル」 (事業実施責任者, 令和7年度)

生物分子化学研究室（小出研究室）

研究レビュー

(1) ランダムペプチドライブラリからのタンパク質結合性 3 重らせん型ペプチドの取得とコラーゲン-タンパク質相互作用様式の解明

当研究室で開発した、ランダムペプチドライブラリから酵母 2-hybrid 法を用いて標的タンパク質に結合するペプチドを取得するためのスクリーニングを本格化させ、様々なコラーゲン結合タンパク質に結合する新規な 3 重らせんペプチドが取得されつつある。以下のその進捗を示す。

コラーゲン結合型インテグリン: コラーゲン受容体として働くインテグリン $\alpha 1\beta 1$, $\alpha 2\beta 1$, $\alpha 10\beta 1$, および $\alpha 11\beta 1$ においてコラーゲンの分子認識を担うそれぞれの αI ドメインに結合する 3 重らせんペプチドのアミノ酸配列を探索している。本年度はスクリーニングから、 $\alpha 1I$ ドメインに対して高い選択性と親和性を示す非天然の新規 3 重らせんペプチドを取得した。昨年度までに得られていた $\alpha 2I$ ドメインに結合する新規な 3 重らせんペプチドは構造活性相関研究によりペプチドの $\alpha 2I$ ドメイン認識に関わる構造的特徴を明らかにした。

VII 型コラーゲン: 表皮-真皮の強固な結合に必須な繋留線維を形成する VII 型コラーゲン中の von Willebrand factor (VWF) 様ドメイン 2 (VWF-2) は他の型のコラーゲンと結合する。昨年度得られた非天然の VWF-2 結合 3 重らせんペプチドと、VWF-2 の共結晶を作製し、その X 線結晶構造解析結果をもとに分子動力学シミュレーションを行い、VWF-2 と線維形成コラーゲン 3 重らせんとの結合様式を明らかにした。

マトリリン: 軟骨細胞外マトリックス構造の構築と維持に寄与するマトリリン 1 の 2 つの VWF 様ドメイン (VWF-1 および-2) もまたコラーゲン 3 重らせん結合ドメインである。昨年度 VWF-1 に特異的に結合する 3 重らせんペプチドが得られたが、本年度はその構造活性相関研究により、結合に特に重要なアミノ酸残基を同定した。また、VWF-2 を標的としたスクリーニングから、新規かつ標的的特異的な 3 重らせんペプチドが得られた。

(2) 折れ曲がったコラーゲン様ペプチドの超分子化によるハイドロゲル

昨年度までに、その主鎖の中央部分に、折れ曲がり構造を導入したコラーゲン様ペプチド (kinkCMP) が設計され、それらがハイドロゲルを形成することが分かっていた。kinkCMP は、その鎖長の増加に伴ってハイドロゲル形成に必要な最小濃度が低下し、ゲルの熱安定性が向上することが明らかとなった。また、レオロジー測定からは、kinkCMP ハイドロゲルが濃度および温度依存的な粘弾性を示し、ゼラチンゲルと同様のゾルーゲル転移挙動を示すことが確認された。さらに、インテグリン結合配列 Gly-Phe-Hyp-Gly-Glu-Arg (GFOGER) を含む直鎖 CMP を混合してゲル化することで、kinkCMP ハイドロゲルへの生物的機能の付与を試みた。GFOGER 含有ハイドロゲルは体温でもゲル状態を安定に維持でき、HeLa 細胞培養実験においてインテグリンに依存した細胞接着および顕著な伸展を示した。

(3) 蛍光ペプチドプローブを用いた 3 重らせんのフォールディング・アンフォールディングの検出

末端を蛍光標識したコラーゲン様ペプチド (CMP) は、その 3 重らせん形成により蛍光基の自己消光が生じ、1 本鎖への解離により蛍光強度が増大する。設計した蛍光標識 CMP を用いて、コラーゲン特異的分子シャペロン HSP47 が 3 重らせん構造に結合することで、その構造熱安定性が向上することを直接的に評価できた。このような蛍光ペプチドプローブは、とくにタンパク質結合による 3 重らせん構造の安定化あるいは不安定化機構の解析に有用であることが示された。

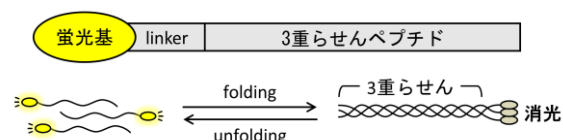


図 1. 蛍光標識ペプチドプローブを用いたコラーゲン様 3 重らせん構造変化の検出

研究業績

● 原著論文(査読あり)

1. “Hydrogels Formed by the Self-Assembly of Collagen-Mimetic Peptides with a Constrained Backbone Structure”, M. Noto, K.K. Fujii, Y. Shu, T. Hiroi, T. Koide, *Chemistry – A European Journal*, e03278 (2026). (DOI: 10.1002/chem.202503278)

● プレプリント

1. “A facile method for fluorescent visualization of newly synthesized fibrous collagen by capturing the allysine aldehyde groups serving as cross-link precursors”, J. Kuroda, K.K. Fujii, S. Futaki, A. Hirata, Y. Taga, T. Koide, *bioRxiv*, 2025.06.19.660320. (DOI: 10.1101/2025.06.19.660320)
2. “Triple-helical ligands selectively targeting the closed αI domain of integrin $\alpha 2\beta 1$ ”, S.S. Shibata, H. Oki, K. Kawahara, R. Masuda, K.K. Fujii, T. Koide, *bioRxiv*, 2025.07.28.667101. (DOI: 10.1101/2025.07.28.667101)
3. “Molecular basis of collagen triple helix recognition by VWF A-like domain 2 of collagen VII: Implications for interlaced anchoring fibril formation”, M. Hashimoto, H. Oki, K. Kawahara, K. K. Fujii, T. Koide, *bioRxiv*, 2026.03.16.711976 (DOI: 10.64898/2026.03.16.711976)

● 受賞

1. 第 62 回ペプチド討論会 Young Presentation Award, 橋本萌, “Insights into the recognition of triple-helical peptides by collagen VII”
2. 2025 年度 (第 15 回) 関根吉郎賞, 能登萌花, 「主鎖構造を制限したコラーゲン模倣ペプチドからなるハイドロゲルの開発」

● 競争的資金

1. 文部科学省科学研究費補助金 挑戦的研究 (萌芽) 「変性コラーゲンを標的とした新規光温熱療法: 「雪だるま式」作用増強の実現に向けて」 (代表: 小出隆規)
2. 文部科学省科学研究費補助金 基盤研究 (C) 「機能性アミノ酸配列含有のコラーゲン様「3重らせんペプチド」を用いた脳梗塞治療戦略」 (代表: ケレベール オレリアン)
3. 文部科学省科学研究費補助金 基盤研究 (C) 「人工コラーゲン様ポリペプチドを用いた新規的黄斑円孔治療の最適化に向けた基礎的研究」 (代表: 小嶋健太郎)
4. 文部科学省科学研究費補助金 基盤研究 (C) 「医療用材料を指向した新規コラーゲン金属錯体架橋ゲルの応用検討」 (代表: 市瀬慎一郎)

● 学内研究助成

1. 特定課題（研究基盤形成）「De Novo デザインしたコラーゲン様ペプチドを基盤とする超分子マテリアルの創製」（代表：小出隆規）
2. 特定課題（研究基盤形成）「コラーゲン様ペプチドを利用した血管新生制御機構の解析」（代表：藤井一徳）