

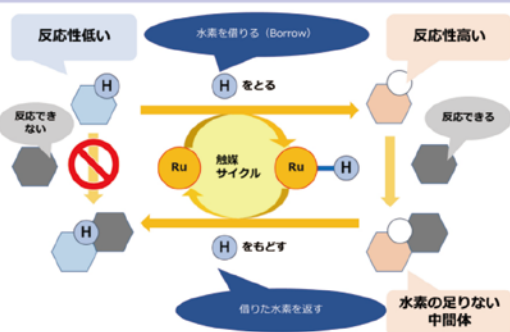
分子をつくる・はかる・予測する

生体情報には物理的な情報とともに化学的な情報があります。これらの情報を得ることは、生体の状態を知る上で非常に重要です。生体化学情報には、代謝物質や酵素活性などをはじめとする有機化合物にまつわるものが多いため、有機化合物の構造や性質、反応性、分析手法を熟知しておく必要があります。生体情報研究室では、**有機分子をつくる技術を究め、特定の機能をもつ分子を設計・合成し、それらを利用して生体化学情報を得るための基礎研究を行うとともに、呼気に含まれる化学情報を非侵襲的に測定・解析する研究も併せて行っています。**そこに、シミュレーションによる分子物性の予測などを取り入れ、研究の加速化を図ります。

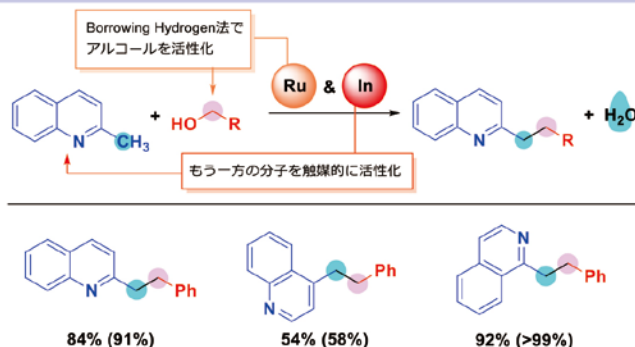
原子効率に優れた方法で、スマートに有用分子を構築する

分子を変換するとき、ゴミを出さず、使うエネルギーを減らすことができれば、環境への負担は小さくなります。これは、グリーンケミストリーとよばれる「環境にやさしい化学」の原則の一部です。原子効率はゴミの排出割合をはかる指標で、原料で使われた原子のうち何%が生成物に含まれるかという割合です。100%なら理論的にはゴミが出ないことになります。ゴミが出ても、水のような環境にやさしいものであれば問題はありません。分子を変換するときのエネルギーを下げるには、触媒を使います。これらを組み合わせ、原子効率に優れた触媒反応を開発することで、環境にやさしいものづくりを実現できると考えています。当研究室では**Borrowing Hydrogen法**を利用する**環境にやさしい触媒反応の開発**をおこなっています。Borrowing Hydrogen法とは、分子中の水素原子を触媒の力で動かして反応性をコントロールする方法で、この方法を利用すると「**水だけ**」を廃棄物として、**アルコールとほかの物質を結合させる**ことができます(①)。これまでに、この方法論に基づいたさまざまな反応を開発し、医薬品の骨格となるような有用分子を効率的につくることが可能になりました(②&③)。また、この方法論の進化系として、**水すらも排出しないC=C結合へのアミンやアルコール類の付加反応**を開発しました(④)。一般的に、C=C結合への付加反応を末端側で起こすことは難しいとされていますが、本法はそれを簡単に効率的に実現できます。

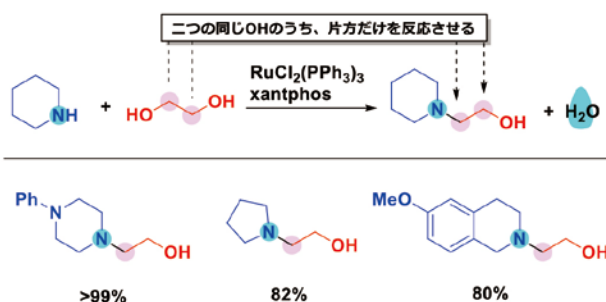
① Borrowing Hydrogen法とは



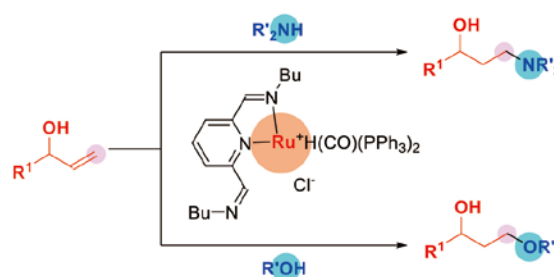
② 二つの触媒が協奏的にはたらく



③ 二つのOHのうち片方だけと反応



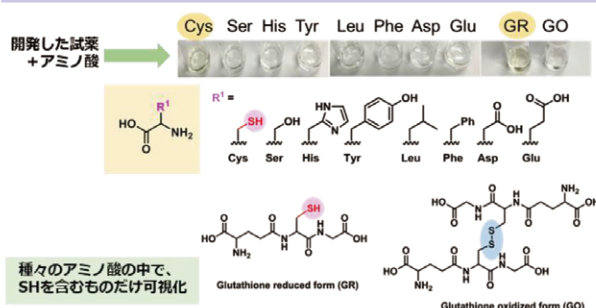
④ Borrowing Hydrogen法進化系の付加反応



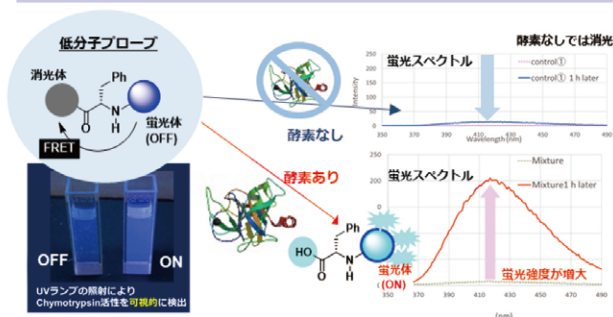
色や光のOFF→ONを切り替えられる分子を設計・合成・利用する

色素分子や蛍光物質は、分子構造を変化させることで色や光をOFFにすることができます。このOFFとなっている分子が特定の酵素や生体内小分子と遭遇して反応すると、その機能がONとなり、それらの存在や量を可視的に取り出すことができます。この分子の設計・合成は、分子の機能と反応性を知る有機化学者にしかできません。このような機能をもった新しい分子をつくり、それを利用する計測システムを考案し、実際の測定に応用する研究を行っています。これまでに、重要な生体化学情報のひとつである「SH」をもつ物質の存在を色で知らせてくれるシステム(①)や、特定の酵素を蛍光により検出・定量することができるシステム(②)を開発しました。

① SHの存在を色で伝えるシステム



② 酵素の存在を蛍光で伝えるシステム



呼気に含まれた成分から、ヒトのストレス状態を推定する

呼気にはVOCと呼ばれるさまざまな有機物質が含まれています。呼気を分析することで疾患が見つかるという研究報告もあり、呼気は生体情報を大いに含むサンプルです。当研究室では、**呼気中のVOCからストレス状態を判定する研究**を行っています。ストレスには多様な原因がありますが、当研究室では運転中にドライバーが感じるストレスについて研究を行っています。呼気の採取・分析は運転中でも容易ですので、うまくいくと「煽り運転」に代表される危険運転の原因のひとつであるストレスを事前に察知し、それらを未然に防ぐことができると期待されます。

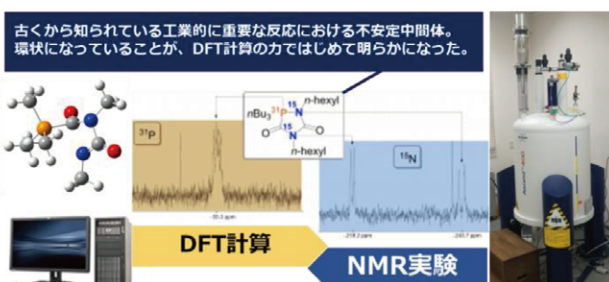
呼気の分析によるストレス解析



医情報学科で学んだプログラミング技術と分析化学の知識を組み合わせ、ストレス状態の解析に挑む

PCで分子の性質を予測し、研究を加速化する

シミュレーション×実験→研究の加速



分子の性質は分子中の電子状態で決まります。電子状態はDFT計算という方法で知ることができ、物質の性質や反応の進み方を予測することができます。左図に示した研究では、DFT計算と実際の実験を組み合わせ、ある反応中に生じるこれまで正体がわからなかった不安定な中間体について詳細に調査し、その構造を決定することができました。これにより、この反応の進み方が明らかになり、合理的な触媒改良に繋げることができます。このように、**研究を加速化できる実際の実験とPCを用いた予測を組み合わせ**た研究も行っています。