



名古屋大学物質科学国際研究センターニュース

RCMS NEWS

Nagoya University Research Center for Materials Science

Reports and Communications of RCMS Activities

〒464-8602 名古屋市千種区不老町

Phone: 052-789-5907 / Fax: 052-789-5900

平成28年5月 第17号



CONTENTS

平成27年度 統合物質創製化学推進事業	2
第19回共同セミナー (Core-to-Core Program)	4
グリーン自然科学国際教育研究プログラム	5
研究紹介	6
外国人客員教授紹介	11
化学測定機器室レポート	12
RCMSセミナー 一覧	13
受賞等	17
ケミストリーギャラリー	18
27年度の出来事	19
スタッフリスト	20



統合物質創製化学推進事業（四大学間連携事業） 平成27年度事業報告

統合物質創製化学推進事業—先導的合成の新学術基盤構築と次世代中核研究者の育成—（文部科学省特別経費）北海道大学触媒化学研究センター・名古屋大学物質科学国際研究センター・京都大学化学研究所附属元素科学国際研究センター・九州大学先導物質化学研究所連携事業において、最終年度となった平成27年度も各種シンポジウムが開催されました。

なお、本事業は平成28年度より「統合物質創製化学研究推進機構」として新たに始動いたします。

【第6回統合物質シンポジウム】

（平成27年4月14日、名古屋）



ポスター



来賓との記念写真



特別講演
川崎雅司教授（東京大学）



山内准教授（九州大学）



高橋教授（北海道大学）



異特任教授（名古屋大学）

【第6回若手研究会】

(平成27年7月3日、九州)



集合写真



研究会風景



夕食会場

【第5回統合物質国際シンポジウム】

(平成28年1月29日-30日、名古屋)



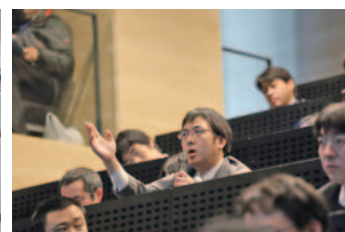
開会 阿波賀教授



Prof. DeBeer



ポスターセッション



質疑応答



Prof. Ruben



ランチ風景



集合写真

Core-to-Core Program

研究拠点形成事業 A. 先端拠点形成型

「革新的触媒・機能分子創製のための元素機能攻究」

第19回 共同セミナー

国際舞台で活躍が期待される優秀な若手研究者に、早い時期から海外での経験を積んでもらおうと展開されてきた「日独共同大学院プログラム」、「頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム」に続き、平成26年度より「Core-to-Core Program 研究拠点形成事業 A. 先端拠点形成型—革新的触媒・機能分子創製のための元素機能攻究」が採択されました。ドイツのミュンスター大学に加えてベルリン工科大学、またカナダのクイーンズ大学や日本側では京都大学も協力機関として加わり、機関同士の共同研究や研究者派遣が活発に行なわれています。

平成27年度も日独共同大学院プログラムから数えて第19回となる共同セミナーがドイツ・ミュンスター大学で開催されました。

【第19回共同セミナー】

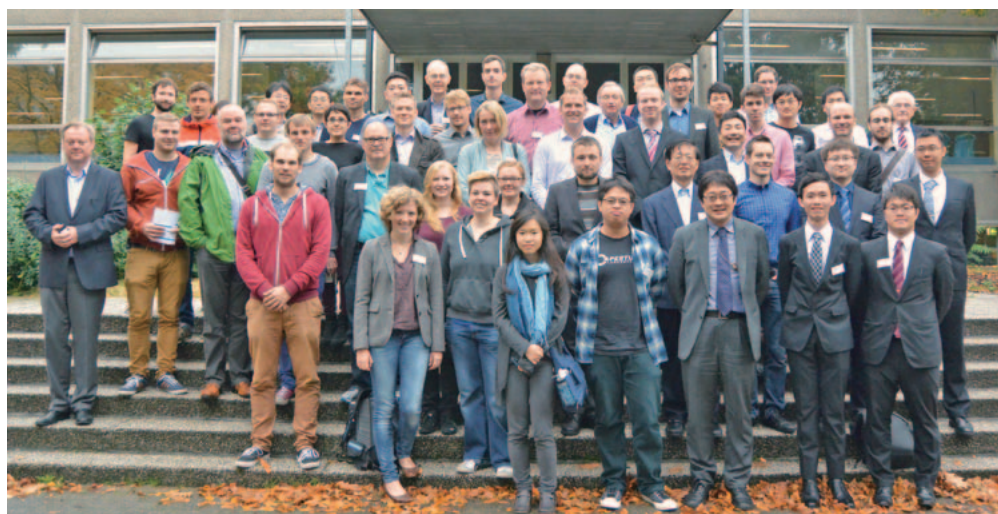
平成27年10月5日－6日 ドイツ・ミュンスター大学にて



山口教授のスライドより



山口茂弘コーディネーター



集合写真



齊藤進教授



質問する Erker 教授



会場風景



コーヒーブレイク

グリーン自然科学国際教育研究プログラム

グリーン自然科学国際教育研究プログラムは平成23年度に始まり、残り2年となりました。本プログラムでは、①最先端基礎自然科学研究の実践と、②それを可能にする十分なコースワーク履修と、③大学院リテラシー教育（英語研修や海外留学、スキルセミナーなど）を3本の柱とし、「全体を見渡す科学力と社会性」、「基礎研究から応用成果を引き出す展開力」、「地球規模で活動する国際性」を涵養し、次世代の環境分野を担う「シーズを産業に育てる企業研究者」、「新発想を学術領域に育てるアカデミア研究者」、「国際社会で活躍する環境科学コーディネーター・メンター」の育成を目指しています。

【切磋琢磨できる環境】 本プログラムは、できるだけ多くの学生が参加することで、お互いに切磋琢磨しながら、トップレベルの能力を伸ばしていくことを特徴としています。理学・工学・生命農学研究科の8専攻が協力したコースワークや、学内の各部局の協力による各種セミナー、英語研修やノースカロライナでのリーダーシップ研修などにおいて、分野や学年の異なる学生と協力、あるいは競争できる環境があります。研究成果だけでなく、プログラムで取り組んだ成果を可視化することで、学生同士刺激し合い、切磋琢磨の好循環が生まれています。また、それらを社会に発信することで、キャリアパスに役立てます。こうした取り組みにより、優秀な人材が着実に成長を遂げています。

【院生企画セミナー】 新しい研究分野を切り拓くためのチュートリアルセミナー、複数の分野の境界領域を開拓するためのワークショップ、大学の垣根を超えた学生による学生のための次世代へ向けての提案等、教育企画力育成を目的とした院生企画セミナーを実施しています。プログラム担当教員による審査を経て採択された企画は、教員に頼ることなく、学生自身で実施しなければなりません。企画の実施を通じて、リーダーシップ、チームビルディング、交渉力、問題解決力や実践力など様々な能力を身に付けます。



院生企画セミナー

【平成27年度の活動】 平成27年度には、約250名の大学院生が所属し、78名に海外で行われる国際会議等への参加のための短期渡航支援を行い、17名には、海外の大学等に2か月以上滞在して研究を行う、長期渡航支援を行いました。また、アメリカ・ノースカロライナ州におけるリーダーシップ研修に10名が参加し、リーダーシップ、起業、技術移転等の各種講義に加え、現地の大学の研究室訪問では、プレゼンや議論を通じて研究者と交流し、企業の訪問では、アメリカでのビジネス環境について学ぶ機会を得ました。



国際会議におけるポスター賞表彰式



ノースカロライナ研修

研究紹介

(有機物質合成研究分野)

リンを鍵元素に用いた蛍光イメージング分子の創製

(教授 山口 茂弘)

蛍光分子を用いた生体イメージングは、現代の生命科学において必須のツールである。この技術の発展には顕微鏡と蛍光色素の両面での進歩が必要である。前者においては、2014年ノーベル化学賞に輝いた超解像顕微鏡に代表されるように、近年目覚ましい進展を遂げているが、後者においては、新規な色素骨格自体の開発という観点では進展は遅く、既存の代表的な色素骨格を用いた応用展開が活発に検討されているのが現状である。蛍光イメージングのための色素骨格の開発において最も重要な課題の一つとして挙げられるのが、耐光性の付与である。これは特に超解像顕微鏡の一つであるSTEDイメージングへの応用において重要となる。STED顕微鏡は、光学顕微鏡の理論限界を超える高い空間分解能が実現できる反面、強いレーザー光の照射を必要とするため、色素の光褪色が深刻な問題であり、優れた耐光性をもつ新たな色素の開発が強く求められている。これに対して我々は、電子求引性のP=O部位を π 共役骨格へ導入するという設計指針のもと、いくつかの蛍光色素骨格の開発を進め^[1-3]、ごく最近、2-アリアルベンゾホスホールP-オキシドを基本骨格とする極めて耐光性に優れた化合物の合成に成功した。

ベンゾホスホールオキシドは、ホスホール基の電子求引性に起因して高い電子受容性をもつ。この骨格の2位に電子供与性のトリフェニルアミンを導入したdonor-acceptor型 π 電子系は、ICT遷移に起因して、ストークスシフトの大きな蛍光発光を示し、その発光色は周囲の溶媒の極性に応じて青緑色から赤橙色まで変化する。特筆すべきは、一般的なICT型の蛍光プローブとは異なり、溶媒の極性にかかわらず高い蛍光量子収率を維持できることである。この特性を利用してこの分子が環境極性に応答する蛍光プローブとして有用であることを、脂肪細胞の染色実験により示してきた^[2]。今回、この基本骨格に架橋構造をもたせた誘導体C-BphoxおよびC-Naphoxが極めて高い耐光性をもつことを見出した (Figure 1)^[3]。

吸収スペクトルを用いて光褪色の経時変化を追跡した結果、これらの化合物は、現在耐光性蛍光プローブとして広く用いられているAlexa Fluor 488やATTO 488をはるかに上回る耐光性をもつことがわかった。より高輝度の蛍光を示すC-Naphoxを用いてHeLa細胞を染色し、STEDイメージングを行った結果、50回の繰り返し観察を行っても83%の初期蛍光強度を保持していることが明らかとなった。同様の条件でAlexa Fluor 488を用いた場合には5

回の繰り返し測定で5%まで蛍光強度が減衰してしまうのとは対照的な結果であり、C-Naphoxの高耐光性蛍光色素としての潜在性を示したといえる。今後、このC-Naphoxを出発点とし、水溶性の付与や抗体ラベル化など、さらに化学修飾を施し、生命科学分野で広く用いられる蛍光色素群へと構造を造り込んでいきたいと考えている。

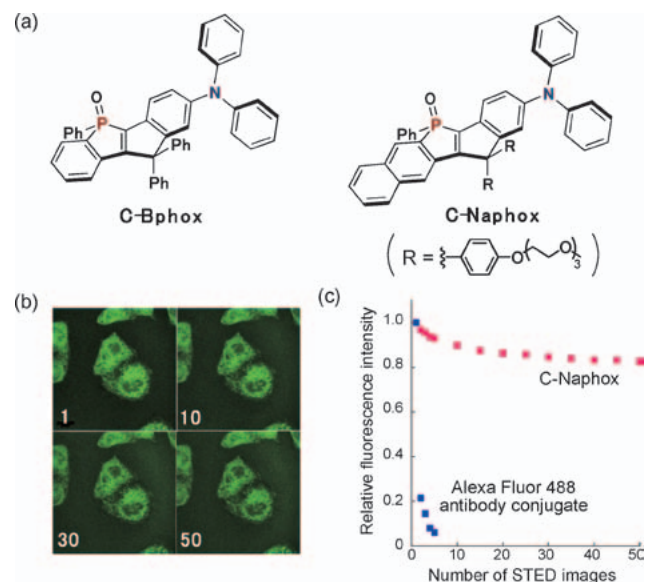
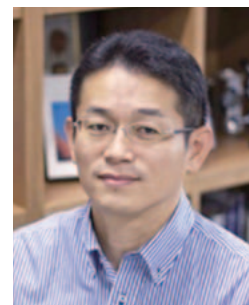


Figure 1. (a) Chemical structures of C-Bphox and C-Naphox, (b) repeated STED images of the fixed HeLa cells with C-Naphox, and (c) normalized intracellular fluorescence intensity plots as a function of the number of recorded STED images.

参考文献

- [1] A. Fukazawa, S. Suda, M. Taki, E. Yamaguchi, M. Grzybowski, Y. Sato, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, *Chem. Commun.*, **52**, 1120-1123 (2016).
- [2] E. Yamaguchi, C. Wang, A. Fukazawa, M. Taki, Y. Sato, T. Sasaki, M. Ueda, N. Sasaki, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 4539-4543 (2015).
- [3] C. Wang, A. Fukazawa, M. Taki, Y. Sato, T. Higashiyama, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 15213-15217 (2015).

研究紹介

(無機物質合成研究分野)

量子論に基づく無機化学反応研究

(准教授 高木 秀夫)



無機化学反応論の分野では (1) 配位子置換/交換反応と (2) 電子移動反応及びこれらの複合過程を対象として研究が行なわれてきたが、1990年頃には単純な反応系の研究はほとんど終わってしまったかのような印象を受ける。しかし実験事実はより深い論考によって詳細に見直すことが必要である。例えば、活性化パラメータに基づく配位子置換/交換反応機構の識別の試みは明らかな失敗であるし、機構を A, D, I_a, I_d などと分類すること自体、科学的根拠を欠いていた。

当研究室ではヤーン・テラー理論と配位子場活性化エネルギーに基づいて、電子配置の違いから反応機構を理論的に再検証した(「量子論に基づく無機化学」, 名古屋大学出版会(2010))。また電子移動反応に関する研究では、古典的式とMSA理論で有意な差を与えないことを証明した(*Chem. Phys. Lett.*, 248, 207 (1996))。

逐次1電子移動反応や二つの結合の同時生成/解裂を伴う配位子置換/交換反応では、非断熱性の関与があるときには活性化パラメータの値を拠り所にして反応機構を論じることは無意味である。当研究室では化学反応を物理学的な視点で捉えると共に、電子移動や配位子置換/交換における反応種の活性化分極を詳細分析し、イオン液体を含む色々な溶媒分子の挙動の解明と、溶媒分子の緩和挙動を利用した化学反応の制御に関する研究を行っている。以下に最近の具体例を示す。

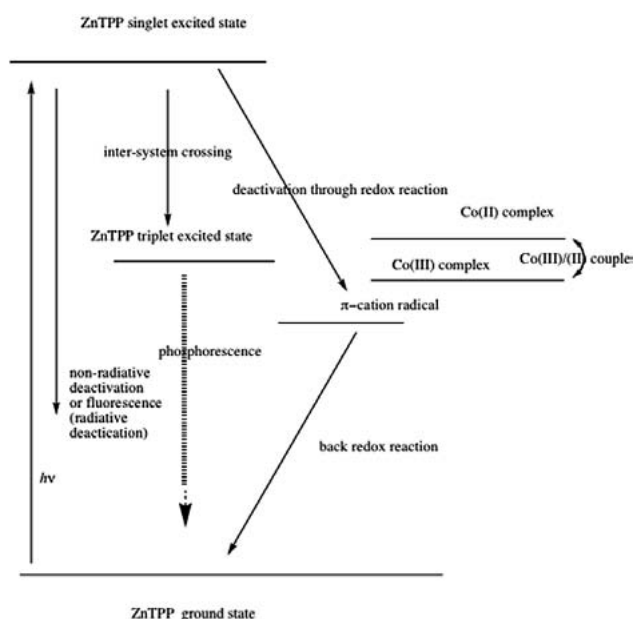


Figure 1. Photo-electron transfer reactions between ZnTPP – Co(sep)^{3+/2+} in various ionic liquids.

(光化学過程と熱化学過程による溶媒緩和機構の研究)

イオン液体は常温で液体の塩である。分極変化を伴う反応をイオン液体中で観測すると、イオン液体を構成する陽イオン部位と陰イオン部位が独立して緩和する現象が観測された(*Chem. A European Journal*, 2006, 12, 5328-8333.)。

現在、亜鉛ポルフィリン錯体の光励起種から籠状コバルト錯イオンへの電子移動反応とコバルト還元種とπカチオンラジカル種との電子移動過程を各種イオン液体中で観測し、電子移動反応に伴う外圏緩和過程に及ぼすイオン液体の効果を検討するとともに、イオン液体を用いた能動的反応制御に取り組んでいる。

(分子性液体中における電子移動反応過程の研究)

銅(II)錯体と銅(I)錯体の配位構造は大きく異なる。従来、この構造変化の活性化障壁が電子移動反応速度を支配すると考えられてきた。しかし、当研究室の一連の研究によって「反応相手に依存して変化する電子移動反応の断熱性」が見かけのGate現象の原因であることが証明されつつある(*Inorg. Chem.*, 1999, 38, 3352; *Chem. Phys. Lett.*, 1999, 306, 291; *Inorg. Chim. Acta*, 2001, 324, 252; *Chem. Phys. Lett.*, 2001, 344, 441; *Inorg. Chem.*, 2007, 46, 1419; *Dalton Trans.*, 2015, 13979-13990 (2015).)。

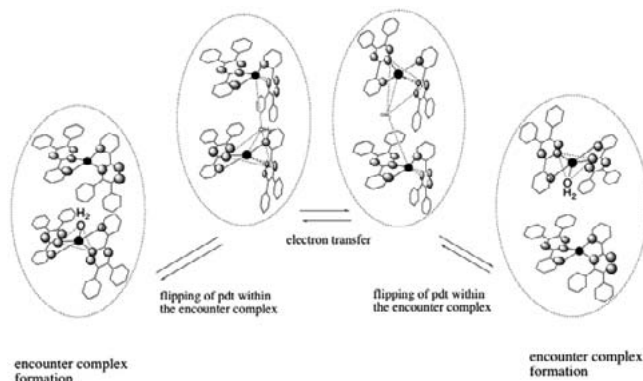


Figure 2. Electron self-exchange reaction for the $[\text{Cu}(3\text{-(2-pyridyl)-5,6-diphenyl-1,2,4-triazine})]^{2+/+}$ couple. The reaction involves flipping of coordinated triazine ring during the electron transfer process. However, the reaction is not Gated but concerted.

研究紹介 (物質機能研究分野)

Discovery of Novel Electrochemical Mechanism in a Metal-Organic Framework based Li-ion Battery

(助教 張 中岳)

The Li-ion batteries are widely considered as a promising energy storage and power supplying devices for the portable electronics and electrical vehicles. To improve the performance of these batteries, such as storage density and output rate, material scientists are always motivated to develop novel electrode materials. With previous studies, our group has successfully illustrated the potential of molecular materials, including polynuclear metal clusters and metal-organic frameworks (MOFs). Although intriguing electrochemical characteristics have been observed for them, their insulating nature have significantly hindered a broad application of these molecular materials.

Since the preparation of conductive molecular materials is very challenging, the low conductive issue of molecular materials can't be simply solved by increasing their conductivity with proper design strategy. Nevertheless, we discovered a novel electrochemical scheme, namely "bipolar charging mechanism" with a lately obtained redox active MOF, $Mn_7(2,7-AQDC)_6(2,6-AQDC)(DMA)_6$ (AQDC = anthraquinone dicarboxylates, DMA = N,N-dimethylacetamide) as

the cathode material of a Li-ion battery. Since the valence of manganese is Mn(II), they are oxidized to Mn(III) during the charge operation, and PF_6^- anions from the electrolyte are adsorbed to balance the charge of the framework. On the other hand, in the discharge step, the anions are firstly released and followed by the reduction of anthraquinones and the insertion of Li-ions. In other words, the electron storage process involves the movement of two type of ions from the electrolyte. With the contribution of two steps, this MOF exhibited a high capacity of 205mAh/g and a stable cyclic performance that the capacity drop is less than 10% within 50 cycles. This newly discovered mechanism is the first mechanism that involves the insertion of two ion species, and significantly reduced the ionic traffic, and improved the efficiency of batteries.

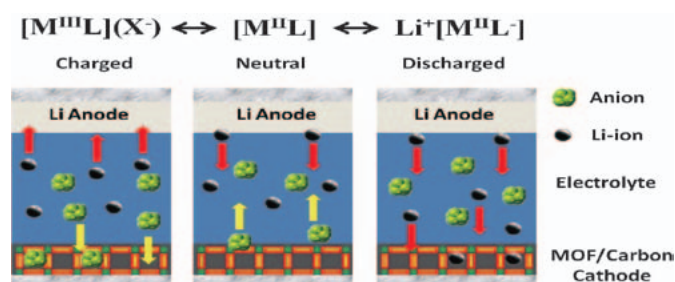


Figure 1. The scheme of bipolar charging mechanism.

References

- [1] Z. Zhang, H. Yoshikawa, K. Awaga, *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 16112 (2014).
- [2] Z. Zhang, H. Yoshikawa, K. Awaga, *Chem. Mater.*, **28**, 1298 (2016).

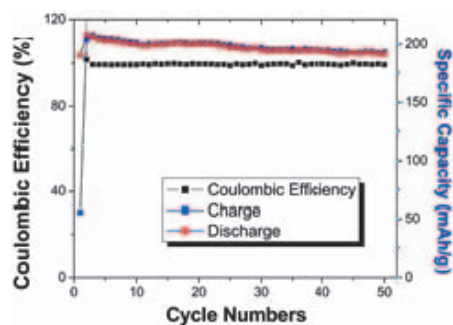


Figure 2. The cyclic performance of MOF-based battery.

研究紹介

(生命物質研究分野)

環状mRNAを用いたタンパク質発現

(助教 友池 史明)

タンパク質はそのアミノ酸配列によって様々な構造と機能を持つ生体分子であり、生体内で重要な役割を果たしている。そのため、タンパク質を理解、生産することは生命現象の解明のみならず、創薬への発展や産業応用が期待できる。また、特異的な基質に対する触媒能など、タンパク質の高度な機能はその立体構造によるものであり、アミノ酸配列をかえて構造を変化させることで、目的の機能をもつタンパク質をデザインできることが期待される。

20世紀後半より、タンパク質の機能解析や生産を目的として、人工的なタンパク質の生産がこれまで盛んにおこなわれてきた。従来では主に大腸菌などを利用して人工的にタンパク質が合成されてきたが、近年、無細胞タンパク質発現系を利用したタンパク質合成が行われている。しかし、無細胞タンパク質発現系を用いたタンパク質翻訳は、生体内の翻訳系に比べて効率が悪いという問題点があった。そのため、タンパク質翻訳機構の解明や効率的な翻訳を実現する手法の開発が求められている。

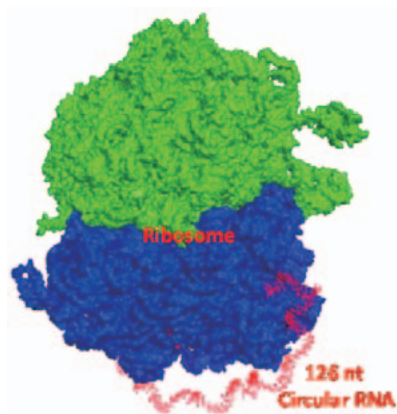


図1 環状RNAを用いた翻訳反応

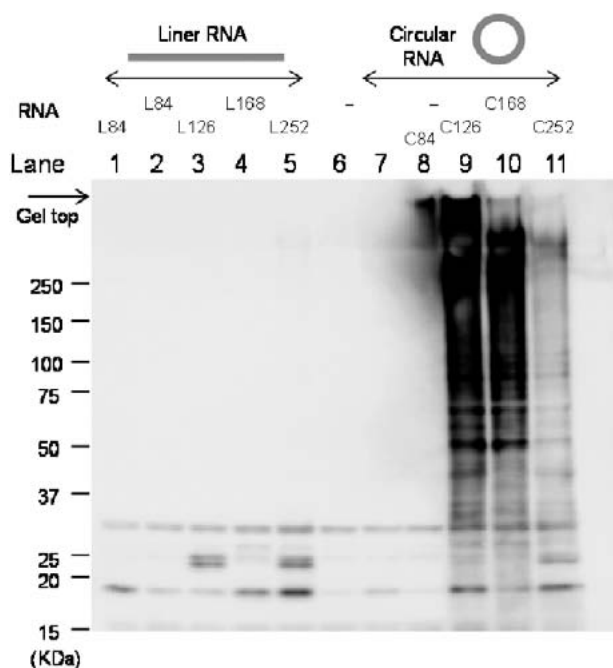


図2 環状RNAを鋳型としたタンパク質翻訳反応
2時間のタンパク質翻訳反応後、ウェスタブロット解析を行った。

そこで、我々は翻訳を担うリボソームがmRNAと結合・かい離する反応が翻訳における律速段階となっていることに着目した。この律速段階を克服するために、酵素反応を利用して、終始コドンを持たないmRNAを環化することで終わりのない翻訳系を構築した(図1)。この環状mRNAを無細胞タンパク質翻訳系に用いた翻訳反応を行ったところ、環状RNAを用いた翻訳は、一般的な直鎖状RNAに比べて、効率的にタンパク質発現が起こることがわかった。また、高分子量のペプチド鎖の合成が観察された(図2)。これにより、環状mRNA内でリボソームが繰り返しタンパク質を合成していることが明らかになった。また、真核生物の培養細胞内でも環状mRNAを用いた翻訳が可能であることを示した。現在、この系を用いて他のタンパク質の発現を試みている。

最近では、環状mRNAを用いた翻訳に加えて、タンパク質や核酸、また合成した有機化合物をターゲットとした生化学的・構造生物学的、また細胞生物学的アプローチも進めている。これは一月より着任した私の得意とする研究分野であり、これにより、分子から細胞まで、広い視野の研究を進めていく予定である。

研究紹介 (分子触媒研究分野)

脱水型不斉 Tsuji-Trost 型不斉アリル化反応の開発

(助教 田中 慎二)

我々の研究では、触媒的手法をキーワードに、効率的有機合成法の開発に取り組んでいる。理想的には、「安価、入手容易、安全な原料」を用いて、「簡単な操作、温和かつ柔軟な条件、短時間な反応」で「高付加価値、高純度、高収率の生成物」を得る反応が望ましい。置換反応においては、C-H、C-OH結合など通常不活性とされる結合を、化学量論的に活性化することなく直接的に変換できることが望ましい。共生成物もできる限り低分子としたい。

このような中で我々は、有機合成において利用価値の高い Tsuji-Trost アリル化反応に着目し、従来の All-X と Nu-M との「脱塩型」から All-OH と Nu-H を用いる「脱水型」への転換を目指してきた。これまでに、**図1**に示すような6位に軸不斉をもつナフチル骨格をもつピリジンカルボン酸 (Cl-Naph-PyCOOH) とカチオン性 CpRu との混合触媒1の有効性を見出した^[1,2]。例えば、分子内にヒドロキシ基をもつアリルアルコールに対して本触媒を作用させると、対応する α -アルケニルエーテルが定量的収率、高い光学純度で得られる。基質をアリルエステルやアリルコキシドに変換する必要がなく、共生成物の水も除去容易で単離操作も簡便である。ステップエコノミー、原子効率、Eファクタいずれの観点からも従来法に優る。エーテルだけでなく、窒素官能基を求核基とすることで環状アミンも合成でき、新しい複素環構築法として注目されている。

本反応は、想定中間体Aを経由して進行すると考えている。アリルアルコールのオレフィン部が、ソフトなルテニウムに配位すると同時に、カルボン酸部のプロトンがアリル位のヒドロキシ基と水素結合を形成して活性化される。これによって、容易に水の放出を伴いながら酸化付加してルテニウム π アリルカルボキシラト錯体を形成する。このソフトLewis酸・ハードBrønsted酸の協働効果が活性発現の根幹である。

近年、この脱水型不斉アリル化反応を用いて、キラルなアルケニルラクトン合成に取り組んだ。カルボキシ基を求核基とすれば目的のラクトンが得られるが、塩基性条件下、アリルエステルをアリル供給源として用いる従来法では、生成物であるラクトンに対しても高い反応性を示すためその適用例は特殊な系に限られる。上記不斉アリル化触媒では弱酸性条件下機能することが反応進行を有利とすると考え、 ω -カルボキシアリルアルコールからの一段階変換法を検証した結果、高い反応性、エナンチオ選択性で目的とする光学活性 γ -ブチロラクトン、 δ -バレロラク

トンが得られることがわかった(**図2**)^[3]。最大で定量的収率、エナンチオマー比99:1以上に及ぶ。オレフィンに置換基をもつ基質を用いることもでき、4置換不斉炭素中心の構築が可能である。酸性度の高い安息香酸型基質を用いることでイソベンゾフラン類も合成できる。光学活性な α -アルケニルラクトン類は、香料あるいはその前駆体として利用されるだけでなく、生理活性物質の部分骨格としてもしられ、全合成研究における重要なキラルビルディングブロックの1つである。本手法が有用物質の全合成戦略に有力な手段を提供するものとして注目される。

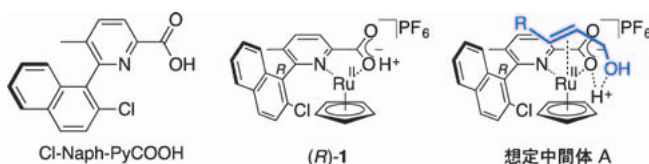
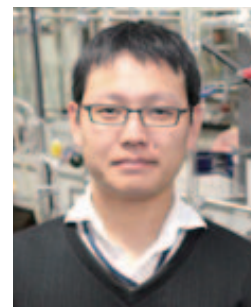


図1 脱水型不斉アリル化触媒

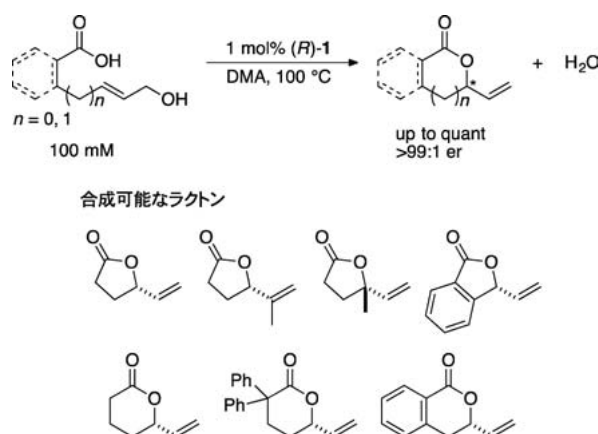


図2 脱水型不斉アリル化による光学活性アルケニルラクトン合成

参考文献

- [1] S. Tanaka, T. Seki, M. Kitamura, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 8948-8951.
- [2] T. Seki, S. Tanaka, M. Kitamura, *Org. Lett.* **2012**, *14*, 608-611.
- [3] Y. Suzuki, T. Seki, S. Tanaka, M. Kitamura, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9539-9542.

外国人客員教授紹介

Prof. Fernando Palacio

フェルナンド・パラシオ
Saragosa 大学教授、スペイン



滞在期間：平成27年10月13日～平成27年12月12日
研究テーマ

「新しい分子およびナノ磁性体の開発」

スペインSaragosa大学のFernando Palacio教授が、「新しい分子およびナノ磁性体の開発」という研究課題のもと、平成27年10月13日から約2ヶ月間滞在された。同教授は、分子磁性体やナノ磁性体を専門とする物性科学者で、物理と化学の垣根を越えて、また基礎と応用の垣根を越え、さまざまな系の磁気特性を実験的に研究してきた。チアジル有機ラジカル結晶の強磁性転移の研究や、最近の鉄酸化物ナノ磁性体の生体センサーとしての応用研究は、きわめて高名である。分子磁性研究の草分け的存在で、この分野を長らく牽引されてこられた。

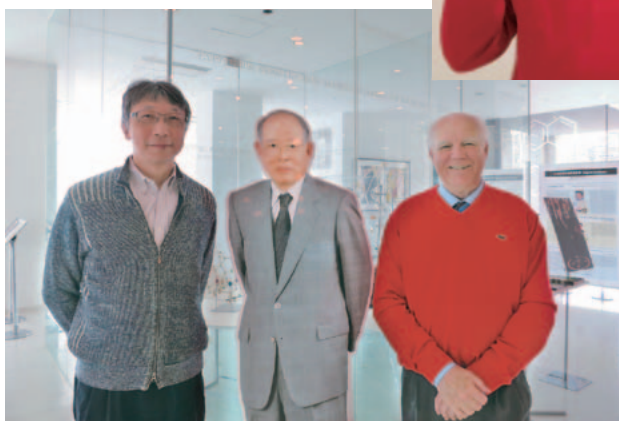
本学滞在中には、我々のグループのセミナーに毎回参加され、学生や若手研究者に有益なアドバイスをいただいた。何にでも好奇心旺盛な姿勢は大変印象的だった。またこの滞在中には、IGER-RCMSセミナー「THERMOMETRY AT THE NANOSCALE USING FUNCTIONALIZED NANOPARTICLES」(12月3日)でもご講演いただき、教育研究面で大変ご協力いただいた。

Palacio先生は大の日本びいきで、日本食、日本旅館、温泉の大ファンである。滞在期間中、奥様が2週間ほど来日されたが、お二人で週末の箱根を楽しまれた。また、エジンバラ大学からの交換学生と一緒に奈良をご案内する機会があったが、日本庭園の借景やコンセプトについて本当に造詣が深く、エジンバラの学生に楽しそうにレクチャーされていた。

共同研究の更なる推進と、次の来日の機会を楽しみにされ、平成27年12月12日に帰国された。



セミナーにて



ケミストリーギャラリーにて



高山にて



湯葉作りに挑戦



八事興正寺にて

化学測定機器室レポート

化学測定機器室は、核磁気共鳴装置 (NMR)、質量分析装置 (MS)、分光分析装置などの分子構造を解析するための機器分析装置が集められた全学共同利用施設です。化学測定機器室では、これらの測定機器の維持管理、測定方法の講習、特殊測定相談、依頼測定を通して、教職員・研究者・学生などの利用者に対してサービスを提供しています。平成27年度は、「機器室利用状況」に示しましたように学内全体で86の研究グループに利用登録して頂きました。一年間の利用登録者の教職員、学生、研究者の皆さんの数は、800人でした。



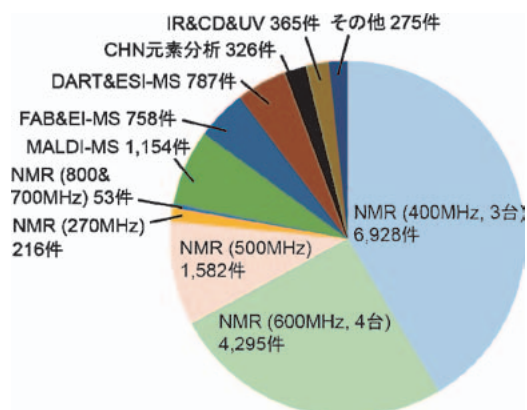
ESR (JES TE-200, JEOL)

[機器室利用状況]

平成27年度 (26年4月 - 27年3月) の年間利用状況について以下紹介します。



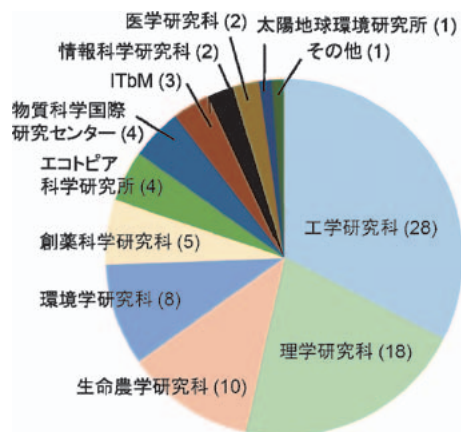
NMR室 (ECS-400, JNM-A 600, JEOL)



測定機器別測定件数



FAB-MS (JMS 700, JEOL)



部局別利用登録状況
(計 86 グループ、800 人)

RCMSセミナー

平成27年4月1日 Dr. Thanyada Rungrotmongkol
(Department of Biochemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University
Bangkok 10330, Thailand)
“Molecular dynamics studies on infectious diseases of humans”

IGER/RCMS Seminar
Theoretical Chemistry Colloquium
April 1, 2015 (Wed), 16:00-17:00
RCMS, 2nd floor, Chemistry Gallery

Molecular dynamics studies on infectious diseases of humans

Dr. Thanyada Rungrotmongkol
Department of Biochemistry, Faculty of Science, Chulalongkorn University
Bangkok 10330, Thailand

Abstract: We aimed at gaining insight into molecular details on the target proteins related to certain human diseases and health problems including influenza and cancer. The functional machinery of such proteins as well as drug inhibition, source of drug resistance and drug screening were studied using various computational techniques, i.e., homology modeling, combinatorial chemistry, molecular dynamics (MD) simulation, combined quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) and three-dimensional reference interaction site model (3D-RISM). As a result, several questions have been revealed, for example, why and how high pathogenicity of influenza H5N1 virus was experimentally better caused by substrate-like surface protein than the low pathogenic hemagglutinin; how available anti-influenza drugs can well inhibit the neuraminidase and/or M2 protein but less susceptibility against their mutants; and how protein is selectively transported through a M2 channel. The combinatorial chemistry and damped MD were successfully used to design and screen the active compounds from available databases for inhibiting anti-neuraminidase and hepatitis C NS5A protease, respectively. In addition, the release inhibition of NS5A by boceprevir and telaprevir has been explained using the semi-empirical QM/MM MD simulations. As a result, the mutation step is occurred in the concerted manner, with a consequence of inhibitor covalently bonded with arginine formed in the last step of reaction.

Contact: Prof. Dr. Stephan Irie
E-MAIL: siri@chem.nagoya-u.ac.jp Tel.: 8297

IGER-ITbM-RCMS Seminar

Prof. Mark S. Taylor
University of Toronto

“Noncovalent and Reversible Covalent Interactions:
Fundamental Studies and New Applications”

May 11, 2015 (Mon) 16:00-17:30
Noyori Materials Science Laboratory 2F,
Lecture Hall

Host: Shigehiro Yamaguchi (789-2291)

プラットフォーム：グリーン物質変換コース

平成27年5月11日 Prof. Mark S. Taylor
(University of Toronto)
“Noncovalent and Reversible Covalent Interactions: Fundamental Studies
and New Applications”

平成27年5月12日 Prof. Daniel T. Gryko
(Polish Academy of Sciences)
“From Pyrrolo[3,2-b]pyrroles to Π -expanded diketopyrrolopyrroles
– the fluorophores for the future”

IGER-ITbM-RCMS Seminar

Prof. Daniel T. Gryko
Polish Academy of Sciences

“From pyrrolo[3,2-b]pyrroles to Π -expanded diketopyrrolopyrroles
– the fluorophores for the future”

May 12, 2015 (Tue) 10:30-12:00
Noyori Materials Science Laboratory 2F,
Lecture Hall

Host: Shigehiro Yamaguchi (789-2291)

プラットフォーム：グリーン物質変換コース

RCMS Theoretical Chemistry Colloquium
Platform: Nano-Energy
May 12, 2015 (Tue), 16:00-17:00
RCMS, 2nd floor, Chemistry Gallery

**Understanding and Designing
Heterogeneous Catalysts from First
Principles**

Prof. Dr. Andreas Heyden
Associate Professor of Chemical Engineering
University of South Carolina, Columbia, SC, USA

Abstract: In the last ~15 years computational catalysis started to significantly impact catalysis research by providing a new tool for testing experimental hypotheses and by screening a large number of materials in silico. In this seminar, I will present two case studies illustrating the strengths and challenges of computational catalysis. For these topics, I will highlight the importance of solvent effects in catalysis and present recent tools for including solvation effects in computational studies.

Contact: Stephan Irie
E-MAIL: siri@chem.nagoya-u.ac.jp Tel.: 8297

平成27年5月12日 Prof. Dr. Andreas Heyden
(Associate Professor of Chemical Engineering, University of South Carolina,
Columbia, SC, USA)
“Understanding and Designing Heterogeneous Catalysts from First Principles”

平成27年5月14日 Dr. J. B. Brown
(Assistant Professor, Department of Clinical System Onco-Informatics
Graduate School of Medicine, Kyoto University)
“Computational studies of photosensitive flavoproteins: from
spectroscopy to understanding functional mechanisms”

ITbM-RCMS Seminar

Dr. J. B. Brown
Assistant Professor, Department of Clinical System Onco-Informatics
Graduate School of Medicine,
Kyoto University

**Computational studies of photosensitive
flavoproteins: from spectroscopy to
understanding functional mechanisms**

May 14th, 2015, 15:00-16:00
Chemistry Gallery
Noyori Materials Science Laboratory 2F
Language: English

Contact: Stephan Irie
E-MAIL: siri@chem.nagoya-u.ac.jp

RCMS-IGER Seminar

"New Materials for Hybrid Photovoltaics"

Lecturer : Dr. Neil Robertson
(University of Edinburgh)
Date : Sat. 6th June 13:30 – 15:30
Place : SA321

Substrate dye-sensitized solar cells (DSSCs) have shown promise as a light-weight, flexible and easily-fabricated photovoltaic technology. Efficiencies however, remain lower than that of liquid-electrolyte DSSCs and new dyes and new hole-transport materials (HTM) are required to optimize these devices. Recently, porous silica scaffolds, derived from diatomic siloxanes and materials, have emerged as a new high-efficiency thin-film solar cell technology and these also require new HTMs with enhanced stability, charge stability and lower cost. The talk will introduce the above hybrid solar cells and will describe the design, synthesis, characterization and application of new dyes and HTMs.

Contact : Kunio Awaga (ext. 2487)

平成27年6月6日 Dr. Neil Robertson
(University of Edinburgh)
"New Materials for Hybrid Photovoltaics"

IGER & RCMS Seminar

Professor Philip JESSOP
Queen's University, Canada

"Switchable Solvents"

July 3rd (Fri) 2015, 16:30-18:00
Noyori Materials Science Laboratory 2F
Conference Room

Contact: Susumu SAITO, ext. 5945
: saito.susumu@f.mbox.nagoya-u.ac.jp

IGER
プラットフォーム:
グリーン物質実証コース

平成27年7月3日 Professor Philip JESSOP
(Queen's University, Canada)
"Switchable Solvents"

RCMS-IGER Seminar

"Magnetic Molecules and Hybrid Materials for Molecular Spintronics"

Lecturer : Prof. EUGENIO CORONADO
(University of Valencia)
Date : Tue. 18th Aug. 13:30 – 15:00
Place : SA321

Spin-based electronics is one of the emerging frontiers in today's nanotechnology and the most active area within nanotechnology. In the past years we have been based on conventional materials like magnetic oxides and nitrides. For molecular electronics we need to design a material as a promising possibility to conduct or store or replace conventional magnetic elements when it goes into. In this seminar, I will present a recent review of molecular spintronics in that of some magnetic molecules, as well as molecular-based materials, as components of new spintronic systems.

In the talk we explore the role that chemistry can play in molecular spintronics. In the first part I will show that magnetic molecules based on lanthanide complexes are possible candidates of spin qubits. In the second part I will discuss the possibility of using the magnetism of the spin through the temperature or through an electric field will be illustrated in molecules formed by spin-conjugated complexes. In the third part molecular materials will be designed in spintronic architectures in order to fabricate molecule-based spintronic devices. In particular, I will report the fabrication of spin qubits in which the spin can be read through a magnetic field.

Contact : Kunio Awaga (ext. 2487)

平成27年8月18日 Prof. EUGENIO CORONADO
(University of Valencia)
"Magnetic Molecules and Hybrid Materials for Molecular Spintronics"

RCMS & IGER Seminar

新谷 亮 先生
東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻

「有機ケイ素化合物の選択的合成における新展開」

2015年9月7日 (月) 10:00-11:30
野依記念研究館2F ケミストリーギャラリー

IGER
プラットフォーム:
グリーン物質実証コース

Host: 山口茂弘 (789-2291)

平成27年9月7日 新谷 亮 先生
(東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻)
"有機ケイ素化合物の選択的合成における新展開"

IGER & RCMS Seminar

The Amazing Nonheme High-Valent Iron-Oxo Reaction Landscape

Prof. Lawrence Que, Jr.
University of Minnesota

Sep. 30, 2015 13:00 ~ 14:30

Noyori Materials Science Laboratory 2F,
Chemistry Gallery

Contact: Yoshitomo Watanabe
E-mail: yoshi@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp

平成27年9月30日 Prof. Lawrence Que, Jr.
(University of Minnesota)
"The Amazing Nonheme High-Valent Iron-Oxo Reaction Landscape"

IGER & RCMS Seminar

中村 慎吾 博士 (Shingo NAKAMURA)
(株)産業革新機構 戦略投資グループ
健康・医療チームディレクター

特定のmRNAを狙った低分子医薬品創出のこころみ:
siRNA様の効果を低分子で実現する

Sep 30th (Wed) 2015, 16:30-18:00
Noyori Materials Science Laboratory 2F
Nobel Prize Exhibition Room

Contact: Susumu SAITO, ext. 5945
: saito.susumu@f.mbox.nagoya-u.ac.jp

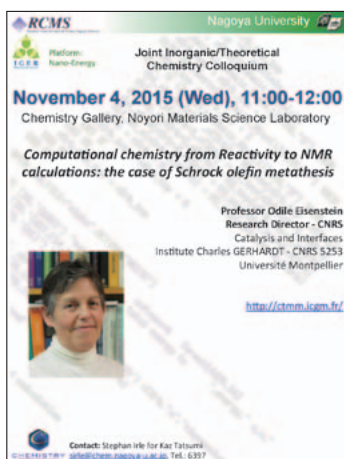
IGER
プラットフォーム:
システムバイオ

平成27年9月30日 中村 慎吾 博士
(株)産業革新機構 戦略投資グループ
健康・医療チームディレクター)
"特定のmRNAを狙った低分子医薬品創出のこころみ:
siRNA様の効果を低分子で実現する"



平成27年10月20日 Prof. Daniel B. Werz
(Technical University of Braunschweig, Germany)
“Domino Reactions with Three-Membered Rings and Triple Bonds”

平成27年11月2日 山下 正廣 教授
(東北大学大学院理学研究科化学専攻)
“強相関電子系ナノワイヤーPd(III)モット絶縁体の創製と相転移と
光物性：野茂とイチローは科学的にどちらが偉いか？”



平成27年11月4日 Professor Odile Eisenstein, Research Director - CNRS
(Catalysis and Interfaces Institute Charles GERHARDT – CNRS 5253
Université Montpellier)
“Computational chemistry from Reactivity to NMR calculations:
the case of Schrock olefin metathesis”

平成27年11月4日 Prof. Légaré François
(Institut national de la recherche scientifique-Centre Énergie,
Matériaux, Télécommunications (INRS-ENT), Canada)
“Ultrafast and biomedical imaging at the Advanced Laser Light Source”
Part 1: Ultrafast, Part 2: Biomedical”

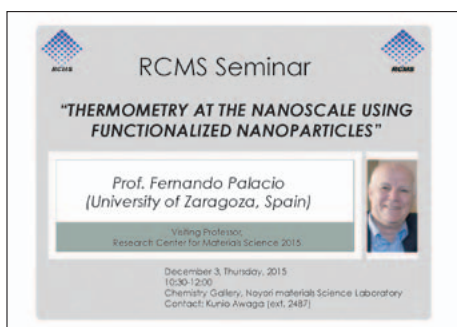


平成27年11月4日 Prof. Jin-Quan Yu
(The Scripps Research Institute USA)
“Developing diverse catalytic cycles for C-H activation reactions”



平成27年11月30日 Prof. Jeremiah A. Johnson
 (Department of chemistry, Massachusetts Institute of Technology, USA)
 “Closing the loop: towards control of structure and topology in polymers”

平成27年11月30日 大塩 寛紀 教授
 (筑波大学大学院数理物質科学研究科)
 “多重双安定性金属錯体の化学”



平成27年12月3日 Prof. Fernando Palacio
 (University of Zaragoza, Spain)
 “THERMOMETRY AT THE NANOSCALE USING
 FUNCTIONALIZED NANOPARTICLES”

平成28年1月15日 堂免 一成 教授
 (東京大学大学院工学系研究科)
 “光触媒シートによる水分解の最近の進展”



平成28年1月20日 Prof. Tae-Lim Choi
 (Seoul National University, Korea)
 “Applying New Synthetic Methodologies to Versatile Polymerizations”

RCMS, IGER, & ITbM Seminar

入江 正浩 先生
立教大学未来分子研究センター・教授
名古屋大学物質科学国際研究センター・客員教授

「光機能を創る」



平成28年2月5日 (金) 16:00-17:30
野依記念研究館2F 講演室
連絡先：山口茂弘 (789-2291)

RCMS IGER ITbM


プラットフォーム：グリーン物質変換コース

平成28年2月5日 入江 正浩 教授
(立教大学未来分子研究センター)
“光機能を創る”

Theoretical Chemistry Colloquium

March 14, 2016 (Mon), 14:00-15:00
RCMS, 2nd floor, Chemistry Gallery

Scanning Photoelectron Microscopy as a tool to analyze plasma fluorinated graphene



Dr. Carla Bittencourt
Department of Chemistry
Université de Mons
Mons, Belgium

Abstract: X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) has been extremely used for probing the composition and electronic structure of solid surfaces and interfaces. The instruments using X-ray photon optics for demagnifying the photon beam to submicrometer dimensions are called scanning photoelectron microscopes (SPEM).

In the first part of the seminar we will discuss the recent developments in Scanning Photoelectron Microscopy (SPEM) and their use for analyzing functionalized graphene.

In the second part of the seminar we use the SPEM to compare the plasma fluorination of graphene using two different gases CF₄ and SF₆. These results pave the way towards optimization of fluorination mechanism and selectivity in covalent modification of graphene chemistry.

Contact: Stephan Irie
sirie@chem.nagoya-u.ac.jp, Tel.: 6397

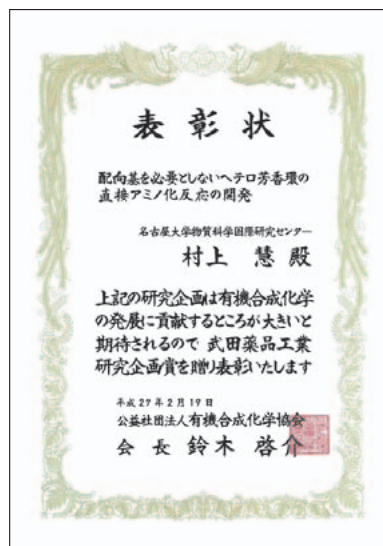
平成28年3月14日 Dr. Carla Bittencourt
(Department of Chemistry, Université de Mons, Belgium)
“Scanning Photoelectron Microscopy as a tool to analyze plasma fluorinated graphene”

受 賞

【村上 慧 助教】

ITbM research award
2016年1月5日

有機合成化学協会
「武田薬品工業」研究企画賞
2015年2月



ケミストリーギャラリー

ケミストリーギャラリー（野依記念物質科学研究館2階）には、平成27年度も大変多くの見学者が訪れました。

個人で見学に来られる方、団体での大学訪問の際に立ち寄られる高校生、父兄のみなさま、視察で訪れるお客様、また学内イベントにおける一般開放を利用して来場される方々など、来場のスタイルは様々です。時折、学内保育園に通園するかわいい来場者もおみえになります。

8月7日、10日、11日 オープンキャンパス期間中来場者 641名

10月17日 ホームカミングデー 1,200名



ストラスブール大学副学長 来訪



愛知県副知事 来訪



メダルをじっと見つめる園児



学内保育園の園児たち



センター外国人客員教授 パラシオ教授（右端）

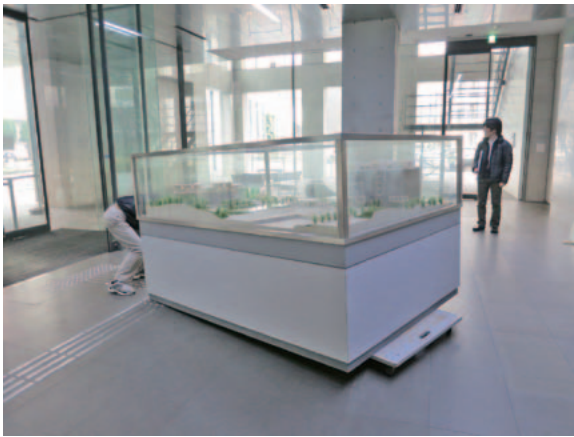
27年度の出来事



客員教授室前のスペースが
待ち合いとして整備される



野依記念物質科学研究館
1、2階の名古屋大学
無線LANシステムが
整備される



野依記念物質科学研究館1階の模型が改修される



新しくなった建物模型
(ケミストリーギャラリーにて)



野依記念物質科学研究館1階ロビーの整備



ソファ、テーブル、映像システム等が整備された
1階ロビー

スタッフリスト

センター長 特別顧問	教 授 特別教授	阿波賀邦夫 (2487) 野依 良治	awaga@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp
有機物質合成研究分野	教 授 助 教	山口 茂弘 (トランスフォーマティブ生命分子研究所) (2291) 村上 慧 (4525)	yamaguchi@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp murakami@chem.nagoya-u.ac.jp
無機物質合成研究分野	教 授 准教授 准教授 特任教授	唯 美津木 (6200) 高木 秀夫 (5473) 山田 泰之 (2471) 巽 和行 (2474)	mtada@chem.nagoya-u.ac.jp htakagi@chem.nagoya-u.ac.jp yy@chem.nagoya-u.ac.jp i45100a@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp
物質機能研究分野	教 授 助 教 助 教	菱川 明栄 (2494) 張 中岳 (5106) 大町 遼 (3660)	hishi@chem.nagoya-u.ac.jp zhangzhongyue@i.mbox.nagoya-u.ac.jp omachi.haruka@a.mbox.nagoya-u.ac.jp
生命物質研究分野	教 授 助 教	渡辺 芳人 (3049) 友池 史明 (2950)	p47297a@nucc.cc.nagoya-u.ac.jp tomoike@chem.nagoya-u.ac.jp
分子触媒研究分野	特別教授 助 教 助 教	野依 良治 (2956) 中 寛史 (5411) 田中 慎二 (2960)	noyori@chem3.chem.nagoya-u.ac.jp h_naka@nagoya-u.jp tanaka@os.rcms.nagoya-u.ac.jp
共同研究分野	客員教授 客員教授	入江 正浩 (立教大学理学部特任教授) フェルナンド パラシオ (サラゴザ大学教授)	
化学測定機器室	室長・教授 助 教 技術職員 技術職員	山口 茂弘 (2291) 韓 春光 (3072) 前田 裕 (3069) 尾山 公一 (3069)	yamaguchi@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp hanc@cic.nagoya-u.ac.jp maeda@cic.nagoya-u.ac.jp oyama@cic.nagoya-u.ac.jp
国際アドバイザーボード		グルンツェ, ミカエル (ハイデルベルグ大学名誉教授) ホフマン, ロールド (コーネル大学名誉教授、ノーベル化学賞受賞者) カガン, アンリ, ボリ (パリ南大学名誉教授) 辻 篤子 (朝日新聞社論説委員)	
協力教員	教 授 教 授 教 授 教 授 特別招聘教授	篠原 久典 (理学研究科) (2482) 伊丹健一郎 (トランスフォーマティブ生命分子研究所) (6098) 北村 雅人 (創薬科学研究科) (2957) 斎藤 進 (理学研究科) (5945) 飯島 澄男 (6460)	noris@nagoya-u.jp itami.kenichiro@a.mbox.nagoya-u.ac.jp kitamura@os.rcms.nagoya-u.ac.jp saito.susumu@f.mbox.nagoya-u.ac.jp ijimas@nagoya-u.jp
センター事務	事務補佐員 事務補佐員 研究支援推進員	木原 優子 (5907) 山本千亜紀 (5902) 丹菊 園恵 (5908)	kihara@os.rcms.nagoya-u.ac.jp yamamoto@os.rcms.nagoya-u.ac.jp tankiku@os.rcms.nagoya-u.ac.jp
事務支援組織	理学部・理学研究科技術部 理学部・理学研究科事務部		