

目次

1. 受賞のお知らせ 1
2. 最新研究成果 2
3. シンポジウム・研究会等の お知らせ 3
4. 新論文のご紹介 4

1. 受賞のお知らせ



林 高史 教授が、ドイツ政府とアレキサンダーフンボルト財団よりフンボルト賞を受賞しました。

この賞は、基本的な発見、新しい理論、または洞察が、自身の専門分野内外に大きな影響を与え、今後も最先端の学術成果を生み出し続けることが期待される学者に授与されます。

Professor Hayashi is an international authority in the area of applied bioinorganic chemistry. He has developed a variety of synthetic metalloproteins as catalysts for chemical transformations and as building blocks for functional nanoparticles. His original work to engineer heme cofactors enriched the emerging area of artificial metalloenzymes which combine the activity of organometallic catalysts with the selectivity of enzymes. In Germany, he will cooperate in the area of developing new protein scaffolds for artificial metalloenzymes with enhanced efficiency using directed evolution.

工学研究科ホームページでも紹介されました。



工学研究科附属
**アトミックデザイン
研究センター**
Center for Atomic and Molecular Technologies

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1

TEL:06-6879-7917

FAX:06-6879-7916

E-mail: info@camt.eng.osaka-u.ac.jp

<http://www.camt.eng.osaka-u.ac.jp>



大阪大学工学部 / 大学院工学研究科
School/Graduate School of Engineering, Osaka University

2. 最新研究成果



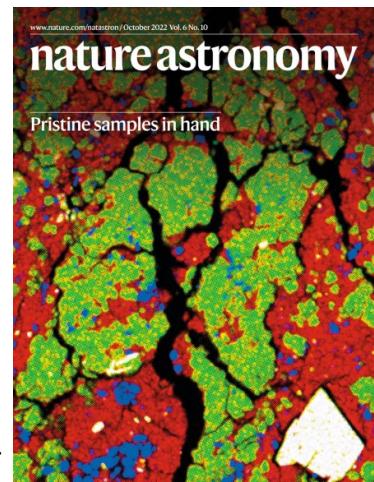
平原 佳織 深教授が参画する、「小惑星探査機「はやぶさ2」Phase-2キュレーション」の研究成果論文2件がオンラインジャーナル「Nature Astronomy」に掲載されました。

小惑星探査機「はやぶさ2」により2020年12月6日に地球へ帰還したリュウグウ試料の一部を分配されたPhase-2キュレーション高知チームが、約1年間にわたる日米英の研究機関・大学にまたがる多機関連携により実施したキュレーション活動の研究成果です。

小惑星リュウグウ：太陽系外縁部からの来訪者

—多機関連携分析が読み解いた小惑星の記録—

詳細は、[大阪大学研究ポータルサイト「ResOU」](#)をご覧ください。



A pristine record of outer Solar System materials from asteroid Ryugu's returned sample

Motoo Ito, Naotaka Tomioka, Masayuki Uesugi, Akira Yamaguchi, Naoki Shirai, Takuji Ohigashi, Ming-Chang Liu, Richard C. Greenwood, Makoto Kimura, Naoya Imae, Kentaro Uesugi, Aiko Nakato, Kasumi Yogata, Hayato Yuzawa, Yu Kodama, Akira Tsuchiyama, Masahiro Yasutake, Ross Findlay, Ian A. Franchi, James A. Malley, Kaitlyn A. McCain, Nozomi Matsuda, Kevin D. McKeegan, **Kaori Hirahara**, Akihisa Takeuchi, Shun Sekimoto, Ikuya Sakurai, Ikuo Okada, Yuzuru Karouji, Masahiko Arakawa, Atsushi Fujii, Masaki Fujimoto, Masahiko Hayakawa, Naoyuki Hirata, Naru Hirata, Rie Honda, Chikatoshi Honda, Satoshi Hosoda, Yu-ichi Iijima, Hitoshi Ikeda, Masateru Ishiguro, Yoshiaki Ishihara, Takahiro Iwata, Kosuke Kawahara, Shota Kikuchi, Kohei Kitazato, Koji Matsumoto, Moe Matsuoka, Tatsuhiro Michikami, Yuya Mimasu, Akira Miura, Osamu Mori, Tomokatsu Morota, Satoru Nakazawa, Noriyuki Namiki, Hirotomo Noda, Rina Noguchi, Naoko Ogawa, Kazunori Ogawa, Tatsuaki Okada, Chisato Okamoto, Go Ono, Masanobu Ozaki, Takanao Saiki, Naoya Sakatani, Hirotaka Sawada, Hiroki Senshu, Yuri Shimaki, Kei Shirai, Seiji Sugita, Yuto Takei, Hiroshi Takeuchi, Satoshi Tanaka, Eri Tatsumi, Fuyuto Terui, Ryudo Tsukizaki, Koji Wada, Manabu Yamada, Tetsuya Yamada, Yukio Yamamoto, Hajime Yano, Yasuhiro Yokota, Keisuke Yoshihara, Makoto Yoshikawa, Kent Yoshikawa, Ryota Fukai, Shizuhiko Furuya, Kentaro Hatakeyama, Tasuku Hayashi, Yuya Hitomi, Kazuya Kumagai, Akiko Miyazaki, Masahiro Nishimura, Hiromichi Soejima, Ayako Iwamae, Daiki Yamamoto, Miwa Yoshitake, Toru Yada, Masanao Abe, Tomohiro Usui, Sei-ichiro Watanabe & Yuichi Tsuda

Nature Astronomy volume 6, pages 1163-1171 (2022)

doi: <https://doi.org/10.1038/s41550-022-01745-5>



October issueの冊子版表紙およびweb版バナーに選ばれました。

Incorporation of ^{16}O -rich anhydrous silicates in the protolith of highly hydrated asteroid Ryugu

Ming-Chang Liu, Kaitlyn A. McCain, Nozomi Matsuda, Akira Yamaguchi, Makoto Kimura, Naotaka Tomioka, Motoo Ito, Masayuki Uesugi, Naoya Imae, Naoki Shirai, Takuji Ohigashi, Richard C. Greenwood, Kentaro Uesugi, Aiko Nakato, Kasumi Yogata, Hayato Yuzawa, Yu Kodama, **Kaori Hirahara**, Ikuya Sakurai, Ikuo Okada, Yuzuru Karouji, Satoru Nakazawa, Tatsuaki Okada, Takanao Saiki, Satoshi Tanaka, Fuyuto Terui, Makoto Yoshikawa, Akiko Miyazaki, Masahiro Nishimura, Toru Yada, Masanao Abe, Tomohiro Usui, Sei-ichiro Watanabe & Yuichi Tsuda

Nature Astronomy volume 6, pages 1172-1177 (2022)

doi: <https://doi.org/10.1038/s41550-022-01762-4>



Wilson Agerico Diño 准教授が参画する研究グループは、一原子の厚みのグラフェン膜で水素と重水素を分離できることを示し、グラフェン膜H/D分離能力とそのメカニズムを実験および理論の両アプローチによって明らかにしました。

固体高分子形の電気化学デバイスを利用し、デバイス内の水素イオンと重水素イオンが生成する電極部位にグラフェン膜を張り付け、膜を通り抜けた水素イオンと重水素イオンの量を定量的に評価することで、実験的にH/D分離能を有することを示しました。また、得られた実験結果を理論計算と比較検証した結果、量子トンネル効果と呼ばれる現象に起因していることを示しました。

半導体、光通信用材料、重水素標識医薬品の開発といった幅広い分野でキーマテリアルである重水素の安価な製造法として、また、将来のエネルギー源として注目されている核融合炉での水素同位体ガスの新しい精製法として期待されます。

詳細は、[大阪大学研究ポータルサイト「ResOU」](#)をご覧ください。

3. シンポジウム・研究会等のお知らせ



PiAI Seminar Series - Physics informed AI in Plasma Science - Winter Season

機械学習を含むデータ駆動科学とAIのプラズマ科学への応用に関するWEBセミナーです。

主催：Satoshi Hamaguchi (Osaka University), Sadruddin Benkadda (Aix-Marseille University)

詳細は、[こちらをご覧ください](#)。

日時：2022年9月26日(月) から 2023年1月23日(月) 全9回 (残り4回)

11月21日(月)

"Multi-scale deep learning for estimating horizontal velocity fields on the solar surface"

11月28日(月)

"Physics-informed neural networks for synthesizing preferential concentration of particles in isotropic turbulence"

1月16日(月)

"Physics-informed neural networks modeling of turbulent natural convection"

1月23日(月)

TBA

4. 新論文のご紹介



Efficient Hydrogen Isotope Separation by Tunneling Effect Using Graphene-Based Heterogeneous Electrocatalysts in Electrochemical Hydrogen Isotope Pumping

Satoshi Yasuda, Hisayoshi Matsushima, Kenji Harada, Risako Tanii, Tomo-o Terasawa, Masahiro Yano, Hidehito Asaoka, Jessiel Siaron Gueriba, **Wilson Agerico Diño**, Katsuyuki Fukutani

ACS Nano, Volume 16 (2022) 14362-14369

 大阪大学研究ポータルサイト「ResOU」で紹介されました。

Deuterium (D) occurs in natural water, hydrogen, methane, etc. in a D/H molecular ratio of ca. 100-150 ppm. The ratio in hydrogen varies somewhat with the source of the hydrogen. Because deuterium is an isotope of hydrogen, the two cannot be separated by ordinary chemical methods. There are, however, a number of prior processes by which deuterium (heavy water) can be separated from hydrogen (ordinary/natural water). These include distillation, electrolysis, diffusion, normal kinetic isotope effect and various chemical exchange processes. All of these are expensive, requiring either large capital expenditures or large amounts of energy, or both. On an industrial scale, D₂ enrichment with an H/D separation factor of ~1.6 at 25 K involves D₂O electrolytes produced by the Girdler sulfide process and cryogenic distillation. Here, we report an H/D separation factor of ~25 at 0.15 V and room temperature. We realized this by polymer electrolyte membrane electrochemical hydrogen pumping (PEM-ECHP) through a heterogeneous electrode consisting of palladium and graphene layers. The hydrogen isotopes tunnel through the one-atom thick graphene layer during the electrochemical reaction. Application of a bias voltage enables one to switch the system from a quantum tunneling (dominant) regime to a classical over-the-barrier (dominant) regime.



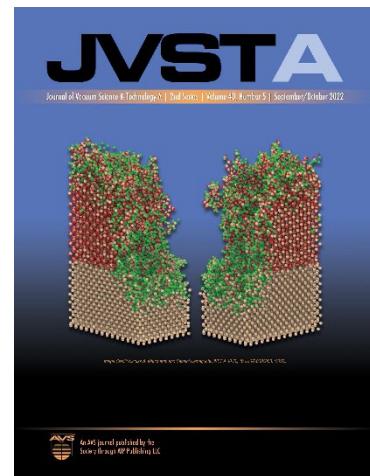
Molecular dynamics simulation of Si trench etching with SiO₂ hard masks

Nicolas A. Mauchamp and Satoshi Hamaguchi

Journal of Vacuum Science & Technology A 40, 053004 (2022)

 雑誌表紙でハイライト紹介されました。

Molecular dynamics simulations were performed to demonstrate nanometer-scale silicon (Si) trench etching with silicon dioxide (SiO₂) hard masks by chlorine (Cl⁺) ion beams possibly with low-energy chlorine (Cl) radicals. Although the sputtering yield of SiO₂ is typically much lower than that of Si, the etch rates of SiO₂ and Si can be comparable because of the lower Si atomic density of SiO₂. This implies that the erosion of the mask can significantly affect etched structures. This study has demonstrated that although the fluxes of incident ions and radicals are uniform in space and constant in time, the individuality of incident ions and radicals causes atomic-scale surface roughness, which cannot be neglected for nanometer-scale etched structures. Furthermore, some transient effects of surface etching, such as initial swelling of the Si surface due to incorporation of Cl atoms and preferential sputtering of oxygen, can affect the profiles of etched structures. The insufficiency of the local mechanical strengths of nanometer-scale materials also enhances their erosion, leading to the formation of nanometer-scale roughness on the sidewalls of masks and etched structures.





MOLECULAR DYNAMICS STUDY ON THE RELATIONSHIP BETWEEN DENSITY DEPLETION LENGTH AND INTERFACIAL THERMAL RESISTANCE AT NANOSTRUCTURED SURFACES

Zhiwen Jiang, **Masahiko Shibahara**

Heat Transfer Research 54(1) 77-92

CPUの冷却や微小な熱流体デバイスにおいては、界面における熱抵抗を予測し、低減することが重要です。本研究では、水と接する金属表面における界面熱抵抗を予測する指標（DDL）を提案し、表面の濡れ性や表面構造の幾何特性とDDLの関係、DDLと界面熱抵抗の関係を分子シミュレーションにより示しています。



Molecular dynamic study of local interfacial thermal resistance of solid-liquid and solid-solid interfaces: Water and nanotextured surface

Yoshitaka Ueki, Satoshi Matsuo, **Masahiko Shibahara**

International Communications in Heat and Mass Transfer 137 106232-106232

低温環境におけるヒートポンプや冷凍機の省エネルギー化のためには、熱交換器における着霜の抑制や除去が必要となります、表面性状による制御が考えられています。本論文では、金属面と水または氷の間の界面熱抵抗に対する表面ナノ構造の影響を分子動力学シミュレーションにより明らかにしています。また、金属面と水または氷間の界面熱抵抗に対する表面構造の幾何的寄与を、局所界面熱抵抗を定義することで考察しました。



Molecular dynamics study of instantaneous interfacial thermal resistance of droplets on flat crystalline surface during cooling and ice formation

Yoshitaka Ueki, Yuta Tsutsumi, **Masahiko Shibahara**

International Journal of Heat and Mass Transfer 194 123004-123004

低温環境におけるヒートポンプや冷凍機の省エネルギー化のためには、熱交換器における着霜の抑制や除去が必要となります。本研究では、金属面上の水滴の冷却・凝固過程について分子動力学シミュレーションを行うとともに、CHILLアルゴリズムを用いて核生成および結晶化過程を分子スケールで可視化しました。そのことにより、表面性状が水滴の核生成や結晶成長に与える影響を明らかにするとともに、本論文において瞬時の界面熱抵抗を定義し、水滴が氷滴に相変化する際の界面熱抵抗の時間変化とその要因についても明らかにしました。



Formation mechanism of maze-like open macropores in Mn_3O_4 microspheres by heating in water vapor and their single-particle compressive behavior

Takahiro Kozawa, Yuexuan Li, **Kaori Hirahara**

Adv. Powder Technol., vol.33 (2022) 103844.

クロ粒子の合成機構において、水蒸気が出発物質である Mn_3O_4 の分解を促進する効果があることを報告しました。また、合成した粒子の圧縮試験を行い、粒子の有する空孔の応力負荷による形状変化についても調べました。



Probing Copper and Copper-Gold Alloy Surfaces with Space-Quantized Oxygen Molecular Beam

Yasutaka Tsuda, Jessiel Siaron Gueriba, Hirokazu Ueta, **Wilson Agerico Diño**, Mitsunori Kurahashi, Michio Okada

JACS Au, Volume 2, pp. 1839-1847 (2022)

The interaction of O₂ with various metal surfaces induces changes in its chemical stability and reactivity. And the ability to control such processes bears on the chemical economy. Alloying of pristine metals provides one of the simplest and oldest way to do so. Understanding the microscopic mechanism entails unraveling the stereochemistry of the processes involved. Small rotational excitations render the reactants susceptible to dynamical steering. This makes direct comparison with theory rather challenging. Here, we directly probe and observe the (polar and azimuthal) orientation dependence of O₂ adsorption on Cu(110) and Cu₃Au(110) using space quantized O₂ molecular beams. We prepared the O₂ molecular beams by sorting the quantum states of the O₂ via Richtungsquantelung (more commonly known by its accepted English translation—space quantization, as first introduced by the 1922 Stern-Gerlach experiment). Chemisorption proceeded rather favorably with the O-O bond axis oriented parallel (vs. perpendicular) to the surface and, also, rather favorably with the O-O bond axis oriented along [001] (vs. along [-110]). Alloying with Au introduced a higher activation barrier to chemisorption, hindering the surface from further oxidation, and rendering an almost negligible azimuthal anisotropy. The presence of Au also prevented cartwheel-like rotating O₂ from further reactions.



Displacement of hydrogen position in di-hydride of V-Ti-Cr solid solution alloys

Kouji Sakaki, Hyunjeong Kim, Eric H. Majzoub, Akihiko Machida, Tetsu Watanuki, Kazutaka Ikeda, Toshiya Otomo, **Masataka Mizuno**, Daiju Matsumura, Yumiko Nakamura

Acta Materialia 234 (2022) 118055

放射光X線・中性子全散乱測定によりV-Ti-Cr固溶体合金の2水素化物の局所構造について調べました。金属格子の結晶構造は面心立方構造を示しますが、金属-水素の結合距離の分布は純金属の2水素化物の結晶構造であるCaF₂構造とは一致しませんでした。固溶体合金の原子配列モデル化する手法であるSQS法で作成した結晶構造モデルを第一原理計算により構造最適化を行った結果を利用した解析により、測定により得られた結合距離分布を再現することができました。その結果、Crと水素の結合距離はVと水素の結合距離より短く、Tiと水素との結合距離はVの結合距離よりも長いことが分かりました。以上のように中性子回折とSQS法を利用した第一原理計算により、水素が格子間位置の中心ではなく、Crに対しては近づく方向に、Tiに対しては遠ざかる方向にずれていることを明らかにしました。



Effects of pulse duration on laser-induced crystallization of urea from 300 to 1200 fs: impact of cavitation bubbles on crystal nucleation

Y. Tsuri, M. Maruyama, K. Tsukamoto, H. Adachi, K. Takano, S. Usami, **M. Imanishi**, M. Yoshimura, H. Y. Yoshikawa, Y. Mori

Applied Physics A, Vol.128, No.9, pp.803/1-7

DOI:<https://doi.org/10.1007/s00339-022-05909-y>

尿素のレーザー誘起結晶化は、キャビテーション気泡による過飽和の増加と温度上昇による過飽和の減少の相互作用によって支配されることを明らかにしました。この発見によりレーザー照射条件の最適化が容易になり、有機材料の結晶化をより効率的に行うことができるようになります。



Metastable Crystallization by Drop Impact

A. Nishigaki, M. Maruyama, S. Tanaka, H. Y. Yoshikawa, **M. Imanishi**, M. Yoshimura, Y. Mori, K. Takano

Crystals, Vol.12, No.8, pp.1104/1-7

DOI:<https://doi.org/10.3390/cryst12081104>

フェムト秒レーザーや超音波照射によるキャビテーション気泡は、多形制御における準安定相結晶化に有効であることが報告されています。本研究では、落下衝撃により準安定形態（II型）と三水和物を形成することに成功しました。落下衝撃による結晶化は全く新しい現象であり、今後の展開が期待されています。



Science-based, data-driven developments in plasma processing for material synthesis and device-integration technologies

Makoto Kambara, Satoru Kawaguchi, Hae June Lee, **Kazumasa Ikuse**, Satoshi Hamaguchi, Takeshi Ohmori, Kenji Ishikawa

Japanese Journal of Applied Physics

Low-temperature plasma processing technologies is essential for material synthesis, device fabrication, and surface treatment. The development of plasma-related products and services requires an understanding of the multiscale complex behaviors of plasma and the hierarchical integration of plasma generation, energy and mass transports through sheath region, surface reactions, and other processes. The importance of science-based and data-driven approaches to controlling systems is argued. The state-of-the-art of deep learning, machine learning, and artificial intelligence in low-temperature plasma science and technology is reviewed. In this review, the requirements and challenges for plasma parameter prediction and processing recipe discovery are asserted by researchers in the fields of material science and plasma processing. It also outlined a science-based, data-driven approach for development of virtual metrology in plasma processes.



Low-energy ion irradiation effects on chlorine desorption in plasma-enhanced atomic layer deposition (PEALD) for silicon nitride

Tomoko Ito, Hidekazu Kita, **Kazuhiro Karahashi**, Satoshi Hamaguchi

Japanese Journal of Applied Physics 61(SI) SI1011-SI1011

Precise control of silicon nitride (SiN) film quality is required for SiN plasma-enhanced atomic layer deposition (PEALD) processes. In this study, we examined the interactions of SiCl_4 adsorbed Si surfaces with incident ions in the desorption/nitridation half-cycle of typical SiN PEALD with nitrogen plasma irradiation. Reactions of low-energy ion beams with Cl-terminated Si surfaces were investigated with in situ X-ray photoelectron spectroscopy. It was found that N_2^+ ion injection in the incident energy range of 30-100 eV formed a SiN_x ($x \approx 1.33$) layer on a Cl-terminated Si surface at room temperature. It was also confirmed that, although low-energy ion injection tends to remove Cl atoms from the surface, some Cl atoms are pushed into a deeper layer by knock-on collisions caused by incident ions. This observation indicates that the complete removal of Cl atoms from the surface by N_2^+ ion irradiation only is not feasible.



Low-energy Ar⁺ ion beam induced chemical vapor deposition of silicon carbide films using dimethylsilane

S. Yoshimura, S. Sugimoto, T. Takeuchi, K. Murai, M. Kiuchi

Nuclear Inst. and Methods in Physics Research B, Vol. 527 (2022) 40-44.

ジメチルシランを原料に用いたシリコンカーバイド(SiC)の成膜実験が、さまざまな研究機関で行われています。ジメチルシランは、その分子中に、ケイ素原子を1個、炭素原子を2個持っているため、ジメチルシランを用いた熱CVDやCat-CVDによる成膜実験では、炭素が過剰なSiCになることがあります。我々は、ジメチルシランを用いた熱CVDプロセスにより成膜中のSiC膜に、同時にアルゴンイオンビームを照射し続けることにより、炭素過剰な状態を改善できることを実証しました。これは、照射したアルゴンイオンビームが、膜中の炭素原子を選択的にスパッタしたためと考えられます。



Low-energy oxygen ion beam induced chemical vapor deposition using methylsilane or dimethylsilane for the formation of silicon dioxide films

S. Yoshimura, S. Sugimoto, T. Takeuchi, M. Kiuchi

Thin Solid Films, Vol. 760 (2022) 139508.

イオンビーム誘起CVD(IBICVD)技術は、各種金属の酸化膜の成膜、ナノスケールの立体構造形成、磁気媒体の開発、などの多方面で利用されています。一方、メチルシランとジメチルシランは、プラズマCVDなどによる炭化ケイ素の成膜の際の原料として利用されています。我々は、0.3 sccmの流量で、メチルシランを基板に吹き付けつつ、そこに100eVの酸素イオンビームを照射することによりIBICVD反応を誘起すれば、炭素をほぼ含有しない酸化ケイ素の成膜が可能であることを実証しました。一方、ジメチルシランを原料として同様の実験を行った場合にも、やはり酸化ケイ素の成膜は可能であることが分かりましたが、この場合には膜に少量の炭素が含まれることが分かりました。



Injection of low-energy SiCH₅⁺ ion-beam to Si substrate during chemical vapor deposition process using methylsilane

S. Yoshimura, S. Sugimoto, T. Takeuchi, K. Murai, M. Kiuchi

AIP Advances, Vol. 12, 115104 (2022).

メチルシランは、シリコンカーバイド(SiC)成膜の原料物質として注目されています。熱CVDなどの原料にメチルシランを用いることにより、容易にSiCを成膜できることが知られています。一方、近年になって、メチルシランをイオンビーム成膜法の原料として用いた研究も報告されるようになりました。我々は、メチルシランを用いたCVD成膜プロセスに、メチルシランから作成したSiCH₅⁺イオンを同時に照射し続けるという、全く新しい試みに取り組みました。その結果、550°Cという低温の基板においては、熱CVD、イオンビーム成膜とともにSiCを成膜することはできませんが、熱CVDにSiCH₅⁺イオンビームを重畠した場合には、両手法のなんらかの相乗効果によりSiCが成膜されるということを明らかにしました。



Cerebrospinal fluid-based boron delivery system may help increase the uptake boron for boron neutron capture therapy in veterinary medicine: A preliminary study with normal rat brain cells

Sachie Kusaka, Yuri Morizane, Yugo Tokumaru, Shingo Tamaki, Indah Rosidah Maemunah, Yoko Akiyama, Fuminobu Sato, **Isao Murata**

Research in Veterinary Science 148 1-6

本論文は、薬剤を血液循環ではなく、脳脊髄液循環を利用して、脳腫瘍に届ける手法を提案しています。この手法のホウ素中性子捕捉療法(BNCT)への応用に向けて、脳脊髄液中に投与するホウ素薬剤の適切な量や投与時間を検討するため、正常ラットに様々な量のホウ素薬剤を側脳室から投与し、脳内のホウ素濃度の上昇率が、血管投与の場合とどのように異なるかを調べました。さらに、側脳室からホウ素薬剤を脳脊髄液中に投与すると同時に、大槽で経時的に脳脊髄液を採取してホウ素濃度を測定することで、ホウ素薬剤の脳脊髄液中の動態をつかみました。



Experimental verification of real-time gamma-ray energy spectrum and dose monitor

Hikari Nishimura, Moe Shinohara, Takaaki Miyoshi, Nikolaos Voulgaris, Sachie Kusaka, Shingo Tamaki, Fuminobu Sato, **Isao Murata**

Applied Radiation and Isotopes 185

医療現場では多くの放射線源が使用されており、特にPET薬剤の作製など高エネルギー荷電粒子を用いる場合、周りの機器の放射化があり、従事者の被ばくが懸念されています。本研究では、そのような医療現場で従事者に放射線リスクを認識させ、最終的に被ばく線量を減らすことができるようなサーバイメータの開発を行いました。携帯電話程度の大きさで、 γ 線のエネルギー分布と線量がリアルタイムで同時に表示されるものであり、これまでには、波高分布のみの表示だったことから、より正確な被ばく情報を隨時従事者に知らせることができます。



Synthesis of Cage - Shaped Borates Bearing Pyrenylmethyl Groups: Efficient Lewis Acid Catalyst for Photoactivated Glycosylations Driven by Intramolecular Excimer Formation

Yuya Tsutsui, Daiki Tanaka, Yoshiyuki Manabe, Yuka Ikinaga, Kumpei Yano, Koichi Fukase, **Akihito Konishi**, Makoto Yasuda

Chemistry - A European Journal

ルイス酸は様々な有機化合物の合成に用いられる有用な試剤です。今回、ピレンを光捕集部位として導入したルイス酸を新規に設計・合成し、光照射時にピレン同士の相互作用が引き金となってルイス酸自体の反応性が大きく向上することをあきらかにしました。この光活性化機能を活用し、従来未開拓であったフッ化糖の光駆動型グリコシル化反応を見出し、様々な糖鎖の合成へと展開できました。



A disulphide bond-mediated hetero-dimer of a hemoprotein and a fluorescent protein exhibiting efficient energy transfer

Julian Wong Soon, Koji Oohora, **Takashi Hayashi**

RSC Adv., 12, 28519?28524 (2022) Open Access. DOI: 10.1039/D2RA05249K

本研究では、ジスルフィド結合で連結した異なる2種類の色素含有タンパク質から成るヘテロ2量体の効率的な調製を達成しました。通常、ジスルフィド結合でタンパク質2量体を調製する場合、同一タンパク質が結合したホモ2量体も得られますが、ピリジルジスルフィド基を利用したチオール交換反応を利用して、選択的にヘテロ2量体が形成することを見出しました。本調製法は非常に簡便なため、有用な機能を有する2量体の探索手法として展開できます。実際に、8種類のヘテロ2量体を調製し、タンパク質に含まれる色素間のエネルギー移動を評価し、96%の高いエネルギー効率を示す系を発見しました。



Nucleophilic Aromatic Substitution of Non-Activated Aryl Fluorides with Aliphatic Amides

A. Matsuura, **Y. Ano** and N. Chatani

Chem. Commun., 2022, 58, 9898-9901.

フッ化アリールを求電子剤に用いるアミドの α -アリール化反応を開発しました。フッ化アリールの芳香族求核置換反応では強い電子求引基の導入が必要ですが、ナトリウムヘキサメチルジシラジドを用いる本手法では、これを必要としない点が特長です。量子化学計算による反応機構解析から芳香族求核置換反応は協奏的な遷移状態を経て進行することが示唆されました。