

生物由来合成酵素の分子構造情報に基づく新規生体触媒の開発～創薬に向けた合理的な合成リデザインの一步～

平成 30 年 1 月 9 日

東京大学

高エネルギー加速器研究機構

■発表のポイント：

- X線結晶構造解析により天然物の複雑骨格を構築する多段階反応性酸化酵素の構造を明らかにし、その基質特異性を改変し、触媒能を拡大することに成功した。
- 多段階反応を触媒する酸化酵素の構造解析、機能改変に初めて成功し、天然には存在しない新規化合物を創出した。
- 活性物質を合成する新規生体触媒の創出によって、創薬研究の発展に貢献することが期待される。

■発表概要

天然に存在する生物由来の物質（天然物）は医薬品の原料として有用ですが、構造が複雑なため、これを人工的に合成することは難しいと考えられています。

東京大学薬学系研究科の阿部 郁朗 教授と中嶋 優 大学院生、高エネルギー加速器研究機構の千田 俊哉 教授らの研究グループは、天然物の酵素の構造情報に基づいて、その機能改変を行うことで、驚異的な多段階反応性酸化触媒の創出に成功しました。研究グループはまず、複雑な骨格形成を触媒する酸化酵素に着目し、それらの X線結晶構造解析を行いました。さらに構造情報に基づく機能改変実験を行って、多段階反応を起こす新規酸化触媒を開発しました。

酵素工学の手法を活かし、活性物質を合成する新規生体触媒を用いた物質生産法を開発することで、創薬研究へ貢献することが期待されます。（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/NewsRoom/Release/pressrelease20180109.pdf> をご覧ください）。

■雑誌名：Nature communications（1月9日オンライン版掲載予定）

論文タイトル：Structure function and engineering of multifunctional non-heme iron dependent oxygenases in fungal meroterpenoid biosynthesis

著者：Yu Nakashima, Takahiro Mori, Hitomi Nakamura, Takayoshi Awakawa, Shotaro

Hoshino, Miki Senda, Toshiya Senda*, and Ikuro Abe* DOI : 10.1038/s41467-017-02371-w

URL : <http://www.nature.com/ncomms>

ミラー対称性による新型トポロジカル絶縁体を発見 - 高効率電子デバイスの開発に光 -

平成 30 年 1 月 11 日

東北大学大学院理学研究科

東北大学材料科学高等研究所

名古屋大学大学院理学研究科

名古屋大学大学院工学研究科

高エネルギー加速器研究機構

■概要

東北大学大学院理学研究科の佐藤宇史教授、同大学材料科学高等研究所の高橋隆教授、名古屋大学大学院理学研究科の山影相助教、同大学大学院工学研究科の岡本佳比古准教授、高エネルギー加速器研究機構（KEK）の組頭広志教授らの研究グループは、放射光を用いた光電子分光実験により、これまで見つかったトポロジカル（注1）絶縁体とは異なり、結晶自身の持つミラー（鏡映）対称性で特徴づけられる新しいタイプのトポロジカル絶縁体を発見しました。この発見は、現在、精力的に研究が進められている物質のトポロジー（幾何学）に基づく物質科学をさらに発展させるのみならず、新型トポロジカル絶縁体を用いた高効率の次世代電子・スピントロニクス（注2）デバイス開発へ道を開くものです。

本成果は、平成 30 年 1 月 9 日（英国時間）に英国科学誌 Nature 系列の専門誌 npj Quantum Materials のオンライン速報版で公開されました。

（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/pressrelease20180111.pdf> をご覧ください）。

貴金属を使わない高性能アンモニア合成触媒を開発～新しい窒素分子の活性化機構を示唆～

平成 30 年 1 月 22 日

科学技術振興機構（JST）

東京工業大学

高エネルギー加速器研究機構

■成果のポイント

- 金属間化合物 LaCoSi が高い触媒活性を実現した。
- ルテニウムなどの貴金属微粒子の担持を必要としない。
- 活性化エネルギーが極めて低く新しい反応機構が示唆された。

■概要

JST 戦略的創造研究推進事業において、東京工業大学 細野秀雄教授、多田朋史准教授、北野 政明 准教授らは、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) の阿部仁准教授らと共同で、貴金属を使わない高性能のアンモニア合成触媒を開発しました。

温和な条件下でアンモニア合成を可能とする触媒は、オンサイトでの合成プロセスを実現するための鍵となります。高温・高圧を必要とするハーバー・ボッシュ法には鉄系触媒が工業的に使われ、より温和な条件下での合成にはルテニウム触媒が研究されています。

今回、ルテニウムなどの貴金属の担持を必要としない高活性触媒を開発しました。電子が陰イオン（アニオン）として働く“電子化物（エレクトライド）”のコンセプトを拡張することで新触媒を検討し、ランタン La とコバルト Co の金属間化合物 LaCoSi が貴金属を用いずに高い活性を示すことを見いだしました。

コバルトはルテニウムに次ぐ活性を持つことが知られていましたが、LaCoSi はこれまで報告されてきたコバルト系触媒でアンモニア合成において最高の活性を示します。LaCoSi 内での La から Co への電子供与が明らかにされ、それが高活性発現の鍵と考えられます。

また、この触媒を用いた反応の活性化エネルギーは同グループが 2012 年に開発したルテニウム担持 C12A7 エレクトライド触媒よりもさらに低いものでした。つまり、LaCoSi は従来の触媒に比べ窒素分子の切断（開裂）をより速やかに行うことができ、より低温でのプロセスに有利です。この低い活性化エネルギーは、第一原理分子動力学計算などの解析結果から、窒素分子が触媒表面に吸着した際に窒素分子の振動が励起状態にあり、そこから原子への開裂が生じる、窒素分子の新しい活性化機構が示唆されました。

本研究成果は、平成 30 年 1 月 22 日 16 時（英国時間）に科学誌「Nature Catalysis」のオンライン速報版で公開されます。（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/pressrelease20180123.pdf> をご覧ください）。

●実験時間の短縮と実験コストの削減により、物質・材料研究の加速化に貢献

■概要

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 物質構造科学研究所の小野寛太准教授と国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構 (QST) 量子ビーム科学研究部門の上野 哲朗 主任研究員を中心とする研究チームは、人工知能 (AI) 技術の一種である機械学習を用いて物質・材料研究に不可欠な X 線スペクトル測定を高効率化する手法を開発しました。

X 線スペクトル測定は物質・材料の機能や性質を支配する電子状態を調べるための実験手法であり、物質・材料研究において頻繁に用いられています。X 線スペクトル測定の高効率化は、物質設計・物質合成・測定からなる研究サイクルを迅速に回して新たな物質・材料を開発していく上で不可欠です。

本研究では機械学習の一種であるガウス過程回帰を X 線スペクトル測定に応用することで、計測データの学習によってスペクトルを予測し、さらに次の計測データ点を自動的に決定する手法を開発しました。これにより、従来の 5 分の 1 程度の測定時間で、これまでと同等の精度で、物理量を決定することが可能になりました。本手法は X 線スペクトル測定のみならず様々なスペクトル測定に応用することが可能であり、実験時間の短縮と実験コストの削減により物質・材料研究の加速化に貢献します。

この研究成果は、英国の学術誌「npj Computational Materials」に 1 月 25 日オンライン掲載予定です。（この記事の続きは <https://www.kek.jp/ja/newsroom/attic/pressrelease20180125.pdf> をご覧ください）。

機械学習により実験計画の自動決定が可能に～「学習」と「予測」で X 線スペクトル測定の高効率化に成功～

平成 30 年 1 月 22 日
高エネルギー加速器研究機構
量子科学技術研究開発機構

■成果のポイント

- 機械学習によって X 線スペクトル測定の効率が飛躍的に向上、測定時間を 1/5 に短縮
- 計測データを学習し、スペクトルを予測することで実験計画を自動的に決定