物理·化学系



分子創成化学講座 教授

熊谷 直哉

博士(薬学) Professor Division of Molecular Design

KUMAGAI Naoya Ph.D. in Pharmacy 有機合成/分子デザ**イン**/ 触媒/材料化学

organic synthesis/molecular design/ catalysis/materials science

## 研究概要

分子の特性は3次元的な原子配列により一義的に 規定されます。化学は、自然界にない原子配列を 持つ分子を自らデザインし、その性格や表情を調 べていくことができる自由度の高い学問領域です。 似たような構造特性を持つ分子はやはり似たよう な性質を帯びますが, 敢えてフツーじゃない分子 構造を持つ分子を生み出すと、予想もしていな かった素顔を顕すことがあります。現代社会では 様々な分子構造の化合物が生活を豊かにする機能 性分子として活躍していますが、似たような分子 をつくっても似たような性質しか引き出すことが できません。同系統の機能で飛躍的な性能上昇を させる、あるいは全く異なる分子機能を発現させ るといった game changing な分子機能開拓を進め るには、既存の分子構造から脱却した分子デザイ ンを進める必要があります。 分子創成化学講座では,分子デザイン・分子構

分子創成化学講座では、分子デザイン・分子構 築を通して、分子世界の声を聞く研究を日夜進め ています。今までに生み出した分子達はいろいろ な表情を見せてくれていて、医薬品合成に重要な 化学反応の強力な触媒となったり、抗腫瘍活性を 示すものもあります。まだ気付いていない性格も 持っているかもしれません。生み出した分子を育 てていくのと同時に、新たにデザインした分子の 構築も続けています。これらの愛着のある分子達 が、広い意味での薬学研究として社会を豊かにす る働き者の分子として日の目を見るよう、現代の 精密有機合成化学の技術を駆使して育てています。

Molecular properties are dictated by the threedimensional arrangements of atoms in the molecules. Chemistry is a privileged discipline to design and construct virtually any types of molecular architectures, dissecting hitherto molecular properties. Designing unknown unconventional molecular structure is a goldstandard to access intriguing molecules eliciting unexpected physicochemical properties. Functional molecules are globally used and indispensable in human society, and we need to devise better performing molecules to tackle the social, medical, and environmental problems in the world. Exotic new molecules are capable to exhibit game changing properties. The new molecules from our group have proved their unparalleled molecular functions e.g. high catalytic activity to contribute the synthesis of therapeutics and anti-proliferative effect on certain cancer cells. We believe that the aesthetic molecules from our group will contribute to the world in a global sense.

## 主な論文

- 1. "TriQuinoline" Nat. Commun. 2019, 10, 3820.
- 2. "A C4N4 diaminopyrimidinr fluorophore" *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 4299.
- "Unique physicochemical and catalytic properties dictated by the B<sub>3</sub>NO<sub>2</sub> ring system" *Nat. Chem.* 2017, 9, 571.

知的財産

- 特許番号6507172「光学活性 α トリフルオ ロメチル-β-アミノ酸誘導体製造方法」
- 特許番号5514942「化合物、及びその製造方法、並びに光学活性α-アミノホスホン酸誘導体の製造方法

