

B3-01 領域紹介「重水素が示す特性の理解と活用」

中 寛史(京都大学 大学院薬学研究科)

本研究領域は、重水素化された物質(重水素化物質)の特性を理解し、活用するための学理を築くことを目的としている。

重水素(Deuterium, ^2H , D)は軽水素(Protium, ^1H)の放射性のない安定同位体として、1931年にH. C. Ureyによって発見された。自然界に存在する大半の重水素は、約137億年前のビッグバンにより誕生したとされ、地球上では水中に重水として安定的に蓄積されている。他元素の同位体の場合とは異なり、重水素化された物質は、もとの軽水素置換体と大きく異なる物性を示す。例えば、C-D結合は生体内代謝においてC-H結合よりも10倍以上切断速度が遅い。この特性を利用して、分子骨格の一部に重水素を導入した医薬分子が2017年に米国食品医薬品局(FDA)で初めて新薬として承認されるなど、国際的にも重水素化物質の設計と活用が活発化している。本領域の目的は、重水素が示す特性を深く理解し、医薬分子や分子触媒などの物質の機能を精密な重水素化により最大限に引き出す新たな研究領域「重水素学」の創成である。具体的には、重水素化物質を合成するための新手法を開発し、重水素が示す特性を理論と実験の両面から理解するための方法論を開拓し、さらに重水素化を鍵とした新たな医薬分子の設計指針を提案することを目指している。

そのために、次の4項目を連動させながら研究を推進し、これまでの分野の枠組みを超えた「重水素学」の学術コミュニティを形成している(Figure 1)。

- ① A01 つくる 重水素化された生体関連物質の合成法を開拓する。
- ② A02 わかる 重水素化された物質を量子論的に理解するための理論を構築する。
- ③ A03 はかる 重水素化による医薬分子と分子触媒の機能を開拓する。
- ④ A04 つかう 重水素化医薬設計に向けて薬物代謝酵素P450分子種の特徴を解明する。

本領域では、重水素化物質の合成法ならびにその性質に関わる知見を提供する。これによって、持続作用の長い医薬分子や環境耐久性材料など様々な産業における材料開発の指針と基盤を与えることが期待される。また、代謝酵素の種類に応じた重水素化医薬品の合理的な設計指針を提供することで、効能を最大化した医薬品開発の推進に寄与する。

重水素化物質は医薬や触媒に限らず、あらゆる素材分野で利用される。その応用分野は、中性子分光における構造解析ツール、有機ELや太陽電池などの先端デバイス、NanoSIMSイメージング、脱税防止用の石油識別剤、核融合発電、光ファイバー通信など、多岐にわたる。本領域研究で得られた学術的知見によって、これらの関連領域への広がりをもった学術領域の展開を期待している。

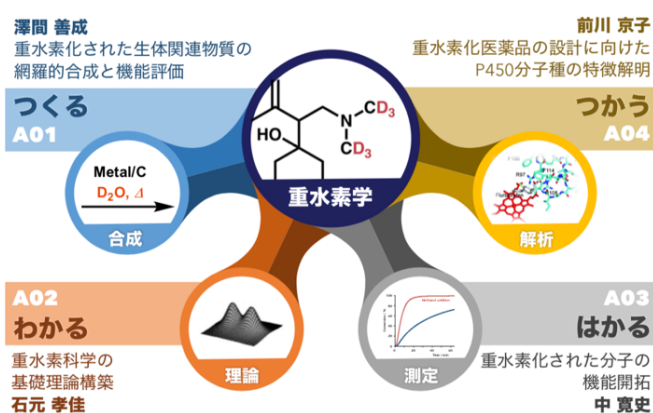


Figure 1. 四つのアプローチで「重水素学」を拓く。

PROFILE

中 寛史(京都大学 大学院薬学研究科)

2005年東京大学大学院薬学系研究科修士課程修了。博士(理学)。東北大学大学院薬学研究科・助手、名古屋大学物質科学国際研究センター・助教を経て、2020年より京都大学大学院薬学研究科・准教授(現職)。専門は水や光を用いた有機合成のための触媒開発や重水素を利用した分子機能の開拓。最近の研究内容は水と・脱水反応触媒の開発や半導体光触媒の特徴を利用した触媒反応開発。2015年 Asian Core Program/Advanced Research Network Lectureship Award (Singapore)、2020年令和元年度有機合成化学奨励賞受賞。 h_naka@pharm.kyoto-u.ac.jp Twitter: [@hirosh_naka](https://twitter.com/hirosh_naka)