

【研究課題名】

多元素が関わる酵素反応機構の計算化学的解明

【各研究項目の連携状況】

領域内の他の研究グループとの連携状況（予定を含む）について、①簡略化した共同研究内容②連携研究代表者姓（研究項目班）③共著論文の有無（件数）を研究内容毎に記載して下さい。

① Rh(I)-BINAP 触媒による不斉水素転移反応，②諸熊奎治(A01)，③有、1件

① 金属オキソコロール錯体の電荷移動，②榊 茂好(A04)，③無

【研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用）】

計算機サーバー(999,000円)を購入した。主に、プロスタグランジン合成酵素反応機構およびピリン還元酵素のQM/MM計算に利用している。一部は、Rh(I)-BINAP触媒の反応機構解明に利用し、A01班との共同研究に使用した。

【原著論文】

©1. T. Yoshimura, *S. Maeda, T. Taketsugu, M. Sawamura, *K. Morokuma, * S. Mori, “Exploring Full Catalytic Cycle of Rhodium(I)-BINAP Catalyzed Isomerisation of Allylic Amines: A Graph Theoretical Approach for Path Optimisation”, *Chem. Sci.* in press. DOI: 10.1039/C7SC00401J

【新学術に関連したシンポジウムや研究会などの開催状況】

2016年1月18日「理論・計算化学に関する日本-タイ-ベトナム合同シンポジウム」（茨城大学理学部）