

名前：山本 茂樹

生年：1980

所属：大阪大学大学院理学研究科，化学専攻分析化学研究室

〒560-0043 大阪府豊中市待兼山町 1-1, 理学部棟 G218

Tel: 06-6850-5412, E-mail: ysigeki@chem.sci.osaka-u.ac.jp, aporoa@gmail.com

研究内容

- キラル分光，特にラマン光学活性および円偏光発光
- キラル分光装置の開発
- 溶液中タンパク質のキラル高次構造解析
- 高分子振動スペクトルの量子力学計算
- 誘起円偏光発光によるキラル小分子の絶対配置測定

学歴

2009年3月：大阪大学大学院理学研究科，化学専攻博士後期課程修了，博士（理学）取得

論文題名：“Spectroscopic Analysis of Liquid-Liquid Interfacial Aggregates and Raman Optical Activity of Molecular Complex”，主査: 渡會 仁 教授

2005年3月 同上博士前期課程修了，指導教員: 渡會 仁 教授

2003年3月 大阪大学理学部化学科卒業

職歴

2013年-現在 大阪大学理学研究科，助教

2012 - 2013年 JSPS 特別研究員(PD)，関西学院大学，尾崎 幸洋 教授

2010 - 2011年 Postdoctoral fellow, チェコ, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prof. Petr Bouř

2005 - 2008年 JSPS 特別研究員(DC1)，大阪大学大学院理学研究科

短期滞在

- 1) チェコ，Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prof. Petr Bouř, 2009年5-7月および2009年10月-2010年1月，大阪大学 ITP プログラム
- 2) スイス，University of Fribourg, Prof. Werner Hug, 2008年7,8月，大阪大学 GCOE

受賞

- 1) 日本分光学会奨励賞（2014年5月26日・理化学研究所 和光キャンパス）「ラマン光学活性分光と量子力学計算による溶液中タンパク質構造の解明」
- 2) 日本分析化学会奨励賞（2012年9月20日・金沢大学）「ラマン光学活性による溶液中タンパク質の構造解析法の開発」
- 3) 日本分析化学会第57年会ポスター賞, Y1004, 福岡, 2008年9月
- 4) 第22回日本溶媒抽出討論会ポスター賞, C-10, 大分, 2003年10月

研究費取得状況

計 5081 万円（直接経費）

- 1) 科研費・基盤 C・2022-2024 年度・「誘起円偏光発光とニューラルネットワーク法によるキラル分子の構造解析」（課題番号：22K05152）・330 万円（直接経費）・研究代表者
- 2) 科研費・基盤 C・2019-2021 年度・「低波数ラマン光学活性による溶液中タンパク質の高次構造解析」（課題番号：19K05524）・340 万円（直接経費）・研究代表者
- 3) 島津科学技術振興財団・2018 年度研究開発助成・「低波数ラマン光学活性によるタンパク質キラル高次構造の高感度測定」・100 万円（直接経費）・研究代表者
- 4) 科研費・若手 B・2017-2018 年度・「分子断片化法による結晶性高分子の低波数振動モードの帰属と高次構造解析」（課題番号：17K17860）・350 万円（直接経費）・研究代表者
- 5) 山田科学振興財団研究援助・2014-2015 年度・「高感度ラマン光学活性装置の開発とそれによるアミロイド線維の立体配座解析」・210 万円（直接経費）・研究代表者
- 6) 科研費・若手 A・2014-2016 年度・「高感度ラマン光学活性装置の開発とそれによるアミロイド線維天然化過程の構造解析」（課題番号：26708017）・1970 万円（直接経費）・研究代表者
- 7) 科研費・基盤 A・2014-2017 年度・「テラヘルツ・ラマン円偏光二色性分光による高分子キラル高次構造の解明と対掌性の操作」（課題番号：26246037）・1010 万円（直接経費）・研究分担者（研究代表者：保科宏道（理研））
- 8) JST 産学共創基礎基盤研究プログラム・「テラヘルツ波新時代を切り拓く革新的基盤技術の創出」・2014-2016 年度・「テラヘルツイメージング分光による高分子材料の劣化の可視化と深さ方向分析」・332 万円（直接経費）・研究分担者（研究代表者：佐藤春実（神戸大学））
- 9) 科研費・研究活動スタート支援・2013 年度・「希土類錯体のラマン光学活性を用いた μM 濃度キラル分子の光学純度決定」（課題番号：25888015）・110 万円（直接経費）・研究代表者
- 10) JSPS 特別研究員奨励費・2012 年度・「ラマン光学活性と量子力学・分子動力学計算による溶液中タンパク質の柔軟構造の解析」・120 万円
- 11) 日本分析化学会近畿支部近畿分析技術研究国際交流助成・2012 年度・海外渡航費 (ICORS 2012)・10 万円
- 12) 関西エネルギー・リサイクル科学研究振興財団・2012 年度・海外渡航費 (SCIX 2012)・19 万円
- 13) JSPS 特別研究員奨励費・2005-2007 年度・「表面増強ラマン散乱法の液液界面ナノマッピングとキラル計測への展開」・180 万円

招待講演

- 1) Shigeki Yamamoto, “Relation Between Solvated States of α -Helical Peptides and Extended Amide III Bands in Raman Optical Activity”, 10th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS10), Auckland, New Zealand, 9th July 2019, *Invited*
- 2) Shigeki Yamamoto, “Raman Optical Activity for Structural Analysis of Proteins”, 26th International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS2018), FrAM-03-K-1, Jeju, Korea, 31th Aug. 2018, *Keynote*
- 3) 山本茂樹, “量子力学計算による結晶性ポリエステル低周波振動と高次構造相関”, 日本分光学会年次講演会, 東京, 2017 年 5 月 23 日, *招待*
- 4) Shigeki Yamamoto, “Peptide Conformations and Solvent Environments Obtained from Raman Optical Activity”, 8th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS8), WEPL1, Vienna,

Austria, 15th Jul. 2015, **Plenary**

- 5) Shigeki Yamamoto, “Low-Frequency Vibrational Spectra of Polymers Deciphered by Quantum Mechanical Simulation”, Frontier of Terahertz Science, Okinawa, Japan, 6th Aug. 2014, **Invited**
- 6) 山本茂樹, “Raman Optical Activity Spectroscopy and Quantum Mechanical Calculation on Protein Structures in Solutions”, 日本分光学会年次講演会, 和光, 2014年5月26日, 奨励賞受賞講演
- 7) Shigeki Yamamoto, “Solution Structure of Peptide and Protein Explored by Raman Optical Activity”, 7th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS7), B-009, Kobe, Japan, 26th Aug. 2013, **Invited**
- 8) Shigeki Yamamoto, “Structures of Native Insulin and its Amyloid Fibril Explored by Raman Optical Activity”, The Great Scientific Exchange (SCIX2012), 486, Kansas City, USA, 3rd Sept. 2012, **Invited**
- 9) 山本茂樹, “ラマン光学活性による溶液中タンパク質の構造解析法の開発”, 日本分析化学会第61年会, 金沢, 2012年9月20日, 奨励賞受賞講演
- 10) Shigeki Yamamoto, “Solution Structures of Peptide and Protein Explored by Raman Optical Activity”, 23rd International conference on Raman spectroscopy (ICORS2012), ThP-OC4, Bangalore, India, 16th Aug. 2012, **Invited**

原著論文

- 1) Shigeki Yamamoto, Fumiya Kimura, “Probing the solvation of the α -helix with extended amide III bands in Raman optical activity”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, 3191-3199, 2022, DOI: 10.1039/d1cp04480j
- 2) Shigeki Yamamoto, Shota Ishiro, Jiří Kessler, Petr Bouř, “Intense chiral signal from α -helical poly-L-alanine observed in low-frequency Raman optical activity”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23, 26501-26509, 2021, DOI: 10.1039/d1cp04401j
- 3) Shigeki Yamamoto, Erika Ohnishi, Harumi Sato, Hiromichi Hoshina, Daitaro Ishikawa, Yukihiro Ozaki, “Low-Frequency Vibrational Modes of Nylon 6 Studied by Using Infrared and Raman Spectroscopies and Density Functional Theory Calculations”, *J. Phys. Chem. B*, 123, 5368-5376, 2019, DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b04347, **Supplementary Cover**
- 4) Chihiro Funaki, Shigeki Yamamoto, Hiromichi Hoshina, Yukihiro Ozaki, Harumi Sato, “Three different kinds of weak C-H \cdots O=C inter- and intramolecular interactions in poly(ϵ -caprolactone) studied by using terahertz spectroscopy, infrared spectroscopy and quantum chemical calculations”, *Polymer*, 137, 245-254, 2018, DOI: 10.1016/j.polymer.2018.01.025
- 5) Jiří Kessler, Shigeki Yamamoto, Petr Bouř, “Establishing the Link between Fibril Formation and Raman Optical Activity Spectra of Insulin”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19, 13614-13621, 2017, DOI: 10.1039/c7cp01556a
- 6) Shigeki Yamamoto, Mai Miyada, Harumi Sato, Hiromichi Hoshina, Yukihiro Ozaki, “Low-Frequency Vibrational Modes of Poly(glycolic acid) and Thermal Expansion of Crystal Lattice Assigned On the Basis of DFT-Spectral Simulation Aided with a Fragment Method”, *J. Phys. Chem. B*, 121, 1128-1138, 2017, DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b11304
- 7) Harumi Sato, Mai Miyada, Shigeki Yamamoto, Kummetha Raghunatha Reddy, Yukihiro Ozaki, “CH \cdots O (ether) Hydrogen Bonding along the (110) Direction in Polyglycolic Acid Studied by Infrared Spectroscopy, Wide-Angle X-Ray Diffraction, Quantum Chemical Calculations and Natural Bond Orbital Calculations”,

RSC Adv., 6, 16817-16823, 2016, DOI: 10.1039/c5ra19900j

- 8) Bui Linh Chi Huynh, Thuc Huy Duong, Thi My Lien Do, Travis George Pinnock, Lawrence Michael Pratt, Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, Takao Tanahashi, Kim Phi Phung Nguyen, “New γ -Lactone Carboxylic Acids from the Lichen *Parmotrema praesorediosum* (Nyl.) Hale, Parmeliaceae”, *Rec. Nat. Prod.*, 10, 332-340, 2016
- 9) Valery Andrushchenko, Daniele Padula, Elena Zhivotova, Shigeki Yamamoto, Petr Bouř, “Magnetic Circular Dichroism of Porphyrin Lanthanide M^{3+} Complexes”, *Chirality*, 26, 655-662, 2014, DOI: 10.1002/chir.22365
- 10) Shigeki Yamamoto, Tatsuya Furukawa, Petr Bouř, Yukihiro Ozaki, “Solvated States of Poly-L-alanine α -Helix Explored by Raman Optical Activity”, *J. Phys. Chem. A*, 118, 3655-3662, 2014, DOI: 10.1021/jp500794s
- 11) Shigeki Yamamoto, Petr Bouř, “Transition Polarizability Model of Induced Resonance Raman Optical Activity”, *J. Comput. Chem.*, 34, 2152-2158, 2013, DOI: 10.1002/jcc.23370
- 12) Hal Suzuki, Shinya Ishii, Harumi Sato, Shigeki Yamamoto, Yusuke Morisawa, Yukihiro Ozaki, Tetsuji Uchiyama, Chiko Otani, Hiromichi Hoshina, “Brill Transition of Nylon-6 Characterized by Low-Frequency Vibration Through Terahertz Absorption Spectroscopy”, *Chem. Phys. Lett.*, 575, 36-39, 2013, DOI: 10.1016/j.cplett.2013.05.002
- 13) Thi My Lien Do, Anh Vu Truong, Travis George Pinnock, Lawrence Michael Pratt, Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, Dominique Guillaume, Kim Phi Phung Nguyen, “New Rotenoids and Coumaronochromonoids From the Aerial Part of *Boerhaavia Erecta*”, *Chem. Pharm. Bull.*, 61, 624-630, 2013, DOI:10.1248/cpb.c12-01081, **Front Cover**
- 14) Shigeki Yamamoto, Yusuke Morisawa, Harumi Sato, Hiromichi Hoshina, Yukihiro Ozaki, “Quantum Mechanical Interpretation of Intermolecular Vibrational Modes of Crystalline Poly-(*R*)-3-Hydroxybutyrate Observed in Low-Frequency Raman and Terahertz Spectra”, *J. Phys. Chem. B*, 117, 2180-2187, 2013, DOI: 10.1021/jp309704k
- 15) Hiromichi Hoshina, Shinya Ishii, Hal Suzuki, Chiko Otani, Yusuke Morisawa, Harumi Sato, Shigeki Yamamoto, Yukihiro Ozaki, Isao Noda, “Terahertz vibrational spectroscopy of poly(3-hydroxybutyrate) and nylon: Potential of terahertz spectroscopy for polymer science” *Solid Dielectrics (ICSD)*, 497-500, 2013, 2013 IEEE International Conference Proceeding
- 16) Shigeki Yamamoto, Petr Bouř, “Detection of Molecular Chirality by Induced Resonance Raman Optical Activity in Europium Complexes”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 124, 11220-11223, 2012, DOI: 10.1002/anie.201204765
- 17) Shigeki Yamamoto, Jakub Kaminský, Petr Bouř, “Structure and Vibrational Motion of Insulin from Raman Optical Activity Spectra”, *Anal. Chem.*, 84, 2440-2451, 2012, DOI: 10.1021/ac2032436
- 18) Shigeki Yamamoto, Xiaojun Li, Kenneth Ruud, Petr Bouř, “Transferability of Various Molecular Property Tensors in Vibrational Spectroscopy”, *J. Chem. Theory Comput.*, 8, 977-985, 2012, DOI: 10.1021/ct200714h
- 19) Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, “Raman Optical Activity Study on Insulin Amyloid- and Prefibril Intermediate”, *Chirality*, 24, 97-103, 2012, DOI: 10.1002/chir.21029
- 20) Shigeki Yamamoto, Petr Bouř, “On the limited precision of the transfer of molecular optical activity

tensors”, *Collect. Czech. Chem. Commun.*, **76**, 567-583, **2011**, DOI: 10.1135/cccc2011018

- 21) Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, Petr Bouř, “Monitoring the Backbone Conformation of Valinomycin by Raman Optical Activity”, *ChemPhysChem*, **12**, 1509-1518, **2011**, DOI: 10.1002/cphc.201000917
- 22) Shigeki Yamamoto, Michal Straka, Hitoshi Watarai, Petr Bouř, “Formation and Structure of the Potassium Complex of Valinomycin in Solution Studied by the Raman Optical Activity Spectroscopy”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**, 11021-11032, **2010**, DOI: 10.1039/c003277h
- 23) Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, “Incident circularly polarized Raman optical activity spectrometer based on circularity conversion method”, *J. Raman Spectrosc.*, **41**, 1664-1669, **2010**, DOI: 10.1002/jrs.2616
- 24) Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, “Counterion-Dependent Morphology of Porphyrin Aggregates Formed at Liquid/Liquid Interface Studied by Total Internal Reflection Resonant Rayleigh and Raman Scattering Microscopy”, *J. Phys. Chem. C*, **112**(32), 12417-12424, **2008**, DOI: 10.1021/jp803328f
- 25) Takeyoshi Goto, Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, “Effects of Magnetic Force on Surface-Enhanced Raman Spectra of Cysteamine Linking Magnetic Particle and Silver Colloid Plate”, *Anal. Sci.*, **23**(7), 891-893, **2007**, DOI: 10.2116/analsci.23.891
- 26) Shigeki Yamamoto, Hitoshi Watarai, “Surface-Enhanced Raman Spectroscopy of Dodecanethiol-Bound Silver Nanoparticles at the Liquid/Liquid Interface”, *Langmuir*, **22**(15), 6562-6569, **2006**, DOI: 10.1021/la0603119
- 27) Shigeki Yamamoto, Kazuhiko Fujiwara, Hitoshi Watarai, “Surface-Enhanced Raman Scattering from Oleate-Stabilized Silver Colloids at a Liquid/Liquid Interface”, *Anal. Sci.*, **20**(9), 1347-1352, **2004**, DOI: 10.2116/analsci.20.1347

総説

- 1) Yukihiro Ozaki, Krzysztof B. Beć, Yusuke Morisawa, Shigeki Yamamoto, Ichiro Tanabe, Christian W. Huck, Thomas S. Hofer, “Advances, challenges and perspectives of quantum chemical approaches in molecular spectroscopy of the condensed phase”, *Chem. Soc. Rev.*, **50**, 10917-10954, **2021**, DOI: 10.1039/D0CS01602K
- 2) 保科宏道, 鈴木晴, 山本茂樹, 矢嶋摂子, “テラヘルツ振動分光から見えるソフトマテリアルの構造と水素結合” *応用物理*, **84**(6), 525-529, **2015**
- 3) 山本茂樹, “ラマン光学活性の基礎と溶液中タンパク質の二次構造解析” *分光研究*, **62**(4), 159-173, **2013**
- 4) 山本茂樹, “ラマン光学活性測定装置の開発とタンパク質の溶液中構造の解析” *分析化学*, **62**(5), 409-422, **2013**
- 5) Hiromichi Hoshina, Shinya Ishii, Shigeki Yamamoto, Yusuke Morisawa, Harumi Sato, Tetsuji Uchiyama, Yukihiro Ozaki, Chiko Otani, “Terahertz Spectroscopy in Polymer Research: Assignment of Intermolecular Vibrational Modes and Structural Characterization of Poly(3-Hydroxybutyrate)”, *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, **3**(3), 248-258, **2013**, DOI: 10.1109/TTHZ.2013.2253154
- 6) Shigeki Yamamoto, “Conformational analyses of peptide and protein by vibrational Raman optical activity”, *Anal. Bioanal. Chem.*, **403**, 2203-2212, **2012**, DOI: 10.1007/s00216-012-5891-0

著書 (分担執筆)

- 1) Shigeki Yamamoto, Petr Bouř, “Calculation of Vibrational Spectra of Large Molecules from Their Fragments” in *Frontiers of Quantum Chemistry*, Eds. M. J. Wójcik, H. Nakatsuji, B. Kartman, Y. Ozaki, Springer, Singapore, p181-197, **2017**
- 2) 尾崎幸洋, 佐藤春実, 勝本之晶, 森田成昭, 森澤勇介, 山本茂樹, “エッセンシャル化学”, 培風館, **2015**
- 3) 山本茂樹, 飯国良規, 渡會仁, “局所構造; 液液ナノ界面, 固体界面, ナノ粒子” ナノテクのための化学・材料入門, 共立出版, p65-90, **2007**

学会活動, シンポジウム講演

- 1) 日本分析化学会近畿支部, 「ぶんせき講習会: 分析における統計手法」講師, 2018-2020年
- 2) 日本分析化学会, 「ぶんせき」誌寄稿, 山本茂樹, “単一の巻き構造を持つ単層カーボンナノチューブの分離”, 9, 423, 2017
- 3) Shigeki Yamamoto, “Chiral and Achiral Vibrational Spectroscopies of Polymers”, 2nd International Symposium on Quantum Chemistry, Kwansai Gakuin University, Hyogo, Nov.2017
- 4) 日本分析化学会近畿支部, 「ぶんせき講習会」実行委員, 2015年3月-2016年3月
- 5) 日本分析化学会近畿支部常任幹事, 2015年3月-2016年3月
- 6) 日本分析化学会近畿支部幹事, 2014年3月-2021年3月
- 7) 日本蛋白質科学会, 「蛋白質科学会アーカイブ」寄稿, 山本茂樹, 尾崎幸洋, “ラマン光学活性スペクトルの測定方法” 6, e071, 2013
- 8) Shigeki Yamamoto, “Induced resonance Raman optical activity as a tool to detect molecular chirality”, The 17th Osaka City University International Symposium, Osaka City University, Osaka, Feb.2013
- 9) 日本分光学会, 夏期セミナー「量子化学計算によるスペクトル解析」講師, “タンパク質およびポリマーの振動スペクトルの量子化学計算”, 2012年9月, 千葉
- 10) 7th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS-7) Local Committee Member, 2011年11月-2013年8月
- 11) 日本分光学会, 「分光研究」寄稿, 山本茂樹, “ラマン光学活性による溶液中分子の構造解析” 59(3), 143-144, 2010

所属学会

日本分析化学会, 日本分光学会, 高分子学会