

首都大学東京大学院・理工学研究科

分子物質化学専攻

年 次 報 告

2 0 1 7

はしがき

平成29年度の首都大学理工学研究科分子物質化学専攻(都市教養学部理工学系化学コース)の年次報告書をお届けします。この報告書は、当専攻における研究・教育活動やコースとしての運営活動をまとめたもので、化学事務室の皆様にとりまとめから製本までご助力をいただき完成させたものです。ご協力をいただきました皆様には、深く御礼申し上げます。平成29年度の化学教室全体および各研究室での、研究教育活動や社会貢献活動に関する記録としてご活用いただけますと幸いです。

化学は原子や分子といった物質の本質の理解や、化学結合の変換原理の理解にとどまらず、昨今では宇宙化学、大気化学、環境化学、生物化学など広範な研究対象をもつ、大きな学問分野に発展しています。化学コース・分子物質化学専攻では、理学的な視点での基礎化学の教育と研究を推進しています。学部での教育プログラムとして、専門領域の化学の主要分野である、無機化学、有機化学、物理化学、生物化学の4分野を基礎から万遍なく学べるよう、授業や演習、実習科目を提供しています。大学院教育では、各分野での最先端の研究に必要な知識や技術を学びながら高い専門性を持つとともに自分で判断しながら独立して研究を推進できる研究者の育成を目標に、研究教育活動に取り組んでおります。同時に、海外留学の動機づけ・支援を活発に実施することで、国際的に活躍できる次世代のリーダーとなる研究者の育成にも取り組んでおります。

平成29年度は第3期中期計画の最初の年であるとともに、平成30年度の学部再編に向けた理化学部設立準備の最終年でした。ご協力をいただきました教務・カリキュラム関係の先生方や理化学部準備会、研究推進室の先生方には深くお礼申し上げます。また、平成29年度は化学コースにとって、様々な変革を求められる年であったように思います。今後も無理のない形で、大学が進むべき方向に向かって、変革が進めばよいかと思います。

平成29年度には山添誠司先生が本専攻に着任され、末木俊輔先生が転出されました。山添先生の今後のご活躍によって、ご自身の研究のみならず、その波及効果によって化学教室全体の研究教育活動が大いに盛り上がることを心から期待しております。また、ご栄転された末木先生の今後のますますのご発展を祈念するとともに、化学教室として引き続き教育・研究の活動の向上に努力したいともいます。

最後になりましたが、本年次報告書は必要な情報が過不足なく掲載されているような、充実した報告書を目指しておりますが、必ずしも至らぬ点多いのではないかと思います。本冊子に目を通してくださる皆様の忌憚のないご意見をいただき、来年度以降の年次報告書に反映させることができれば幸いです。

平成29年度 専攻長 廣田 耕志

目次

はしがき

目次

化学教室 教室協議会規則	1
平成 29 年度化学教室研究室別名簿	2
化学教室委員会委員	3
全学・理工学研究科等委員会委員	4
人事異動	5
学部・大学院授業時間割	6
在学者数	8
進路状況	9
学位授与	10
文部科学省・日本学術振興会科学研究費補助金	17
その他の研究助成	22
各賞受賞	25
国際会議の開催、および組織委員としての活動	26m
海外研究(国際会議における学術講演・海外での講義等)	28
共同研究	31
海外からの訪問者	34
学会活動等	38
他大学非常勤講師	41
講演会・研究会等での講義・講演	42
非常勤講師(集中講義など)	46
教育改革推進事業(理工 GP)	48
教室の行事	50
各研究分野活動状況 平成 29 年度	55

第一部

化学教室活動状況

化学教室協議会規則

- 第1条 協議会は化学教室に属する教職員を持って構成する。
- 第2条 協議会は構成員の過半数の出席によって成立する。
- 第3条 協議会は毎月1回開くことを原則とする。
- 第4条 協議会は専攻長によって召集される。
その他運営委員または化学教室の教職員5名以上の要請があれば、専攻長は協議会を招集しなければならない。
日時及び議事内容は遅くとも1週間前に公示することを原則とする。
- 第5条 協議会の議長は運営委員がつとめ、書記は出席者の中から選出される。
- 第6条 専攻長、各種委員は関係事項の報告を行う。
- 第7条 協議会は専攻長、運営委員会、各種委員会その他からの提案事項を審議し決定する。
- 第8条 決議は出席者の過半数の同意を持って成立する。
- 第9条 協議会は議事録をそなえ、議事進行の過程および決議事項を記録する。
専攻長は、これを保管し、構成員の要求あるときは提示する。
- 第10条 本規則の改正は協議会の決議による。
- 付則 1965.4.20 発効
1982.11.30 改正
1987. 改正
2007.7.4 改正

平成29年度化学教室研究室別名簿(前期)

所属化学	環境・地球化学	宇宙化学	有機構造生物学	有機化学	生物化学	物性物理化学	分子系合系物理化学	反応物理化学	有機合成化学	理論・計算化学	向位体化学
教授	杉浦 健一(3574)			野村 亨広(3542)	藤田 耕三(3535)	菊池 新一(3453)	加藤 隆(3438)	清水 敏夫(3585)	波田 龍彦(3583)		
准教授		大浦 崇嗣(3576)	伊藤 隆(3538)	藤田 昭子(3541)	田岡 万穂(3536)	兒玉 直(3442)	好村 進行(3455)	中谷 直貴(3543)	中谷 直貴(3543)		久富水 忍朗(3522)
助教		白井 龍樹(3562)	志谷 鉄兵(3525)	西島 亨(3541)	佐藤 悠一(3584)						
		芝本 幸平(3445)		米本 俊輔(3528)	阿部 拓也(3545)		川原 康平(3454)	松本 淳(3451)	阿部 康隆(3582)	秋山 和彦(3587)	
D3(incoming)				Pingboel Srimanong(3532)					ウエロート アルシュ(3581)		
				Srisuwan Naitak(3532)							
D3				Yan Ong(3528)	浅田 寛大(3535)						
D2(incoming)				SUN Zehu(3532)							
D2				林原 耀(3528)					岩瀬 啓(3506)		
D1(incoming)									Jan Y(3096)		
D1					足立 尚	和田 智也(3452)	曹 勇(3432)		砂賀 彰弘(3571)		
					梅田 永未				菅野 翔平(3581)		
					大岡 正人						
M2					石川 大輔				高井 隆史(3582)	塚田 圭人(3921)	
					柳田 真澄(3528)	立花 慎(3452)	神楽 英道(3454)	高橋 航大(3451)	高井 隆史(3582)	塚田 圭人(3921)	
					大谷 拓也(3528)	三谷 祐示(3442)	尾崎 亮太(3454)	坂本 啓弥(3586)	坂本 啓弥(3586)	坂本 啓弥(3586)	
					坂間 隆		正岡 幸子(3454)	神巻 恵理(3572)	中村 謙二(3572)	田中 康介(3587)	
					永井 葵	小山 慎司	安田 啓人(3433)	中村 謙二(3572)	中村 謙二(3572)		
					山田 拓海	中里 亜利咲		村上 大河(3572)			
					Chienongkleunwan Sapana						
					Khang Chaldoun						
M1					柳川 仁志	中村 祐希子(3452)	三好 祐(3454)	深澤 隆二(3451)	市橋 梢也(3572)	村田 レオ(3581)	柴 幹次(3922)
					久保木 勝晴	小林 和博(3442)	柴木 健斗(3454)	横川 貴一(3451)	三井 遥真(3572)	伊藤 勇太(3587)	
					下里 匠司	西本 真也(3442)	梅村 啓生(3433)	保阪 悠人(3452)	解沼 遥也(3572)	石川 史樹(3922)	
					伊藤 啓之介		阪谷 智之(3454)				
B4					青木 大輔	川瀬 裕介(3452)	長谷川 行彦(3448)	長谷川 行彦(3448)	藤田 俊平(3572)	佐藤 晋太郎	湯島 啓(3587)
					伊藤 樹	藤竹 将之(3452)	和田 結(3433)	佐野 恵恵(3451)	中島 亮太(3572)	菅沼 祥助	片山 祐加(3922)
					井上 研介	高井 良也(3442)	黒田 海幸(3433)	松本 隆(3448)	中山 友介(3572)	橋本 拓磨	小林 祐太(3922)
					藤原 拓也	吉田 俊(3442)	山下 晃史(3433)	水村 アツホ(3451)	西井 裕亮(3572)	藤下 志之(3922)	
						平山 貴康(3442)		滝沢 健行(3451)		伊藤 樹太(3587)	
						高田 未来(3452)					
客員教授											
博士研究員											
客員研究員											
研究生 等											

【学術研究員】
 奥山 悠斗(3410)
 高橋 純子(3411)
 田中 純子(3411)
 【学生実験室】
 小林 真斗(3462)
 松岡 正明
 【元分析室】
 榎井 敬彦(3463)

【基礎研究員】(3921)
 (特任教授)
 藤澤 俊明
 (客員教授)
 橋本 祐之
 (特任研究員)
 坂 盛子(5623)
 佐藤(祐)木蓮(3536)
 八尋 悠佳(5623)
 中村 沙理(5623)
 (PA)
 山内芽生(5623)
 (客員研究員)
 新川高志(5623)
 長野光司(5623)
 斎藤宗雄(5623)
 後藤 杉山(5623)

化学教室委員会委員

平成29年度分子物質化学専攻内委員

専攻長	廣田 耕志	理工人事制度WG	川端 庸平
次期専攻長	竹川 暢之	理工男女共同WG	稲垣 昭子
会計委員	兒玉 健	大学院教育GPコアメンバー	伊藤 隆
将来構想委員	廣田 耕志	教育改革GP委員	中谷 直樹
	竹川 暢之	パンフレット委員	兒玉 健
	城丸 春夫		廣田 耕志
	波田 雅彦		兒玉 健
		化学メーリングリスト管理	稲垣 昭子
将来計画委員	竹川 暢之		阿部 拓也
	中谷 直樹	クラス担任 (1年)	佐藤 総一
	池谷 鉄兵		三島 正規
	阿部 拓也		竹川 暢之
			伊藤 隆
			稲垣 昭子
カリキュラム委員	大浦 泰嗣		中谷 直樹
	兒玉 健		波田 雅彦
	佐藤 総一	クラス担任 (2年)	
安全管理委員	加藤 直		野村 琴広
	清水 敏夫		西長 亨
	菊地 耕一		好村 滋行
	西長 亨		杉浦 健一
			菊地 耕一
			大浦 泰嗣
広報委員補佐	大浦 泰嗣	クラス担任 (3年)	
共同利用機器管理委員	平林 一徳		清水 敏夫
	三澤 健太郎		加藤 直
化学安全教育とりまとめ	兒玉 健		廣田 耕志
学生実験取りまとめ	白井 直樹		佐藤 総一
オープンクラス担当者	田岡 万悟		兒玉 健
劇物・毒物管理者	清水 敏夫		田岡 万悟
溶媒委員	末木 俊輔	准教授委員長	稲垣 昭子
リカレント	西長 亨	助教委員長	阿部 穰里

全学・理工学研究科等委員会委員

平成29年度全学理工学研究科委員

理工学研究科、理工学系

専攻長・コース長
専攻長代理

理工学系人間関係相談チーム
研究費評価・配分委員会部会
理工学研究科研究推進室
理工学研究科広報委員会
教務委員会部会
グローバル副専攻WG
基礎教育部会
理工学系インターンシップ委員会
教員養成カリキュラム委員会
理工学系入試委員会（多様な入試）
理工学系入試委員会（入試制度）
理工学研究科大学院入試委員
自己点検・評価委員会部会
FD委員会
就職担当教員

理工学研究科図書委員会
特別管理産業廃棄物管理責任者
保安管理部会
高圧ガス保安管理部会
放射線安全部会
毒物劇物関係
R I 施設委員会
国際規制物質管理委員会
理工学人事制度WG

廣田 耕志
竹川 暢之
城丸 春夫
伊藤 隆
廣田 耕志
伊藤 隆
清水 敏夫
好村 滋行
稲垣 昭子
田岡 万悟
杉浦 健一
兒玉 健
加藤 直
菊地 耕一
杉浦 健一
加藤 直
中谷 直樹
波田 雅彦
城丸 春夫
佐藤 総一
菊地 耕一
清水 敏夫
三島 正規
久富木 志郎
稲垣 昭子
大浦 泰嗣
大浦 泰嗣
菊地 耕一

南大沢キャンパス

高圧ガス保安管理部会
放射線安全部会
危険物保安監督者
R I 施設委員会
国際規制物質管理委員会
動物実験委員
危険物保安管理委員
放射線管理室委員

松本 淳
久富木 志郎
清水 敏夫
久富木 志郎
久富木 志郎
田岡 万悟
稲垣 昭子
大浦 泰嗣
秋山 和彦

人事異動 平成 29 年度

<採用>

教授 山添 誠司

平成 29 年 10 月 1 日

(東京大学 大学院 理学系研究科 化学専攻 助教から着任)

<退職>

助教 末木 俊輔

平成 30 年 3 月 31 日

(武蔵野大学 薬学部 薬学科 助教として異動)

平成29年度化学コース時間割

曜日	1時限 8:50~10:20	2時限 10:30~12:00	3時限 13:00~14:30	4時限 14:40~16:10	5時限 16:20~17:50
月	1 1-109 授業科目 三鷹(後)			11-110 無機化学実験 杉浦(前) 1-108 分析化学I 竹川(後)	6-303 基礎ゼミ 加藤(前) 6-305 基礎ゼミ 廣田(前)
2		11-206 構造物理化学 城丸(前)	1-205 有機化学III 榎垣(後)	11-103 分析化学II 岡林(前) 11-101 有機体遠征研 三鷹(後)	
3	11-103 物性化学I 菊池(前)	11-103 放射化学I 大浦(前) 11-103 放射化学II 大浦(後)	8-386, 387 化学専門実験I 各教員(前) 8-386, 387 化学専門実験II 各教員(後)		
4	化学セミナー(後) 8-301 竹川, 8-307 城丸, 8-304 加藤・好村, 8-302 菊池・坂玉, 11-202 廣田・田岡, 12-208 杉浦		化学セミナー(後) 8-302 清水		化学セミナー(後) 11-101 野村・西尾・佐藤・榎垣 6時 限まで
火	1 1-101 授業科目 伊藤(前)	11-103 授業科目 大浦(前) 1-101 授業科目 城丸(後)		1-310 一般化学 c 阿知波(前) 1-202 化学実験 la 清水(前) 1-101 化学実験 lb 西尾(前) 1-201 化学実験 lb 佐藤(前) 1-301 化学実験 lb 榎垣(前) 1-202 化学実験 lb 伊藤(後) 1-110 化学実験 lb 久喜木(後)	
2					
3	11-103 物理化学演習(前)	11-103 化学熱力学II 好村(前) 11-106 物性化学II 坂玉(後)	8-386, 387 化学専門実験I 各教員(前) 8-386, 387 化学専門実験II 各教員(後)		
水	1		8-385 化学実験 b / 自然科学実験 武蔵(前)		6-308 総合ゼミナール 大橋/竹川/海老原(後)
2	1-109 量子化学I 坂田(前) 1-203 生体物質化学II 廣田(後)	1-203 生体物質化学I 廣田(前) 1-203 化学熱力学I 加藤(後)		6-208 基礎ゼミ 竹川(前)	
3		11-103 地球環境化学I 竹川(前) 11-103 化学基礎測定I 岡林 潤(後)	12-101 有機化学II 西尾(前) 1-102 量子化学II 中谷(後)	11-202 化学安全教育 各教員(前) 8-302 化学英語 Julian Koe(後)	6-303 化学コロシアムI 菊池/好村/廣田/竹川(後)
1			8-386, 387 化学専門実験I 各教員(前) 8-386, 387 化学専門実験II 各教員(後)		
2		12-103 無機化学各論II 杉浦(後)	1-101 一般化学 lb 岡田(前) 1-209 一般化学 lb 菊池(後)		
3			8-385 化学実験 c / 自然科学実験 武蔵(前) 8-385 化学実験 a 各教員(後)		
1			1-204 有機化学I 野村(前) 11-110 有機化学IV 佐藤(後)	11-103 無機及分析化学演習 各教員(後)	
2					
3		11-103 生物化学I 田岡(前) 11-103 生物化学II 田岡(後)	8-386, 387 化学専門実験I 各教員(前) 8-386, 387 化学専門実験II 各教員(後)		
1			8-385 化学実験 d / 自然科学実験 武蔵(後)	1-102 一般化学 la 坂田(前) 1-201 一般化学 lb 菊池(後)	1-103 物理化学初等演習(前) 1-103 物理化学初等演習II(後)
2			11-201 有機及生物化学演習 各教員(後)		
3	11-103 化学基礎測定II 大浦(前)	6-300 理論化学概論 中谷(前) 11-103 合成有機化学 清水(後)	11-201 有機及生物化学演習 各教員(後)	宇宙化学 11-101 海老原(後)	11-108 化学熱力学III 好村(後) 12-101 化学コロシアムII 各教員(後)
4	化学セミナー(後) 8-305 久喜木				化学セミナー(後) 8-303 伊藤・三鷹, 8-305 大浦 6時 限まで

在学者数 平成29年度

平成29年4月1日現在

学部	一年生	二年生	三年生	四年生	計
首都大学東京	46名	47名	48名	58名	199名
総計					199名

博士前期課程	一年生	二年生	計
首都大学東京	37名	38名	75名
総計			75名

博士後期課程	一年生	二年生	三年生	計
首都大学東京	9名	8名	6名	23名
総計				23名

進路状況 平成29年度

平成30年3月15日現在

1. 学部卒業生数： 44名

進路		
進学： 32名	首都大学東京	28名
	他大学	4名
就職その他： 12名	民間企業	11名
	公務員等	0名
	教員	0名
	その他	1名

2. 大学院博士前期課程修了者数： 38名

進路		
進学： 3名	首都大学東京	3名
	他大学	0名
就職その他： 35名	民間企業	30名
	公務員等	1名
	教員	1名
	その他	3名

3. 大学院博士後期課程修了者数： 6名

進路		
就職その他： 6名	民間企業	0名
	公務員等	0名
	教員	0名
	PD・その他	6名

学位授与 平成 29 年度

<学士>

無機化学

- 中谷 文 ビピレノールを用いたクラウンエーテルの合成
森脇 透 銅 (II) 塩を用いた酸化的カップリングによる選択的ピレンダイマーの合成

環境・地球化学

- 池田 春輝 ナノ粒子化学組成分析計による有機物の検出
井手 佑 熱脱離型エアロゾル質量分析計のイオン化効率に関する研究
鶴飼 葉月 大気硫酸濃度測定のための化学イオン化反応管の改良及び評価

宇宙化学

- 原 司 加速器質量分析法による石質隕石中の宇宙線生成各種 ^{41}Ca の定量
南野 琴星 地球化学標準物質中の微量白金族元素の定量

有機構造生物化学

- 菊池 由佳 In-cell NMR によるヒト培養細胞中の GTP 結合型 HRas の動態解析
栗原 将平 lncRNA 結合タンパク質 SHARP の NMR 解析
清水 涼香 In-cell NMR と in-organelle NMR による GRB2 および GB1 蛋白質の立体構造解析
高田 夢人 リン酸化ユビキチンの NMR 解析

有機化学

- 青木 大峻 ハーフチタノセン錯体触媒によるエチレンと芳香族ビニルモノマーとの共重合
伊澤 樹 ニオブ-アルキリデン錯体を用いたオレフィンメタセシス重合
井上 健介 キレート多座配位スカンジウム錯体の合成と小分子の活性化
藤原 知也 フェナンソロリン骨格を有する Cu-Pd 二核錯体の合成と反応性の検討

生物化学

- 坂場 翔太 リボソーム RNA のシェードウリジン化修飾と酵母の増殖
宮田 啓史 9myc タグを用いたユビキチン化 PCNA の検出
吉本 侑依 複製チェックポイント因子 ATR と合成致死になる遺伝子の探索
市村 和貴 高配位スチビニウムジカチオン $[\text{12-Sb-6}]^{2+}$ の新規合成法

物性物理化学

- 川端 朔弥 β -(BDA-TTP)₂I₃における電気伝導性の一軸圧印加
高井 良也 Lu₂C₇₈とLu₂C₈₀の分離とキャラクタリゼーション
高田 未央 分子配向に disorder を有する(DTDA-TTP)₅(PF₆)₂の一軸圧における伝導度測定
森竹 将之 縮小π電子系ドナーを用いた新規有機超伝導体の探索
吉田 俊 Sc 二核金属内包フラーレンの分離とキャラクタリゼーション

分子集合系物理化学

- 石井 佑果 リン脂質ベシクルに対する長鎖アルキル非イオン界面活性剤の添加効果
太田 結 二次元流体膜中のマイクロスイマー
黒田 瑞季 二つの三つ玉スイマーの協同運動
山下 晃史 基板上の生体組織の広がりダイナミクス

反応物理化学

- 滝沢 信行 エチレン, アセチレンガス流中の, レーザー誘起ブレイクダウンによる水素終端ポリインの生成
長谷川 円香 SIMION により MCP 検出効率シミュレーション
牧野 恵里香 卓上型静電イオン蓄積リング (μE-ring) に用いる負イオン源の特性
松本 陸 ガス温度 300°C 付近におけるレーザーアブレーションにより生成した C60 収率の測定
水村 アンナ 2電子捕獲衝突で生成したエチレン 2 価イオンの解離ダイナミクス

有機合成化学

- 鶴田 俊平 複数のスルホニウム部位を有する芳香族化合物の合成研究
中島 亮太 1,1'-ジピレニルジスルフィドの合成と不斉結晶化の検討
西井 裕亮 複数のスルホニウム部位を有するかご状化合物の合成

理論・計算化学

- 菅沼 麻莉奈 非フラーレン系有機薄膜太陽電池における界面構造の検討と新規材料の探索
中山 友介 星間空間における炭素原子の化学進化に関する理論的研究
佐藤 有汰留 バクテリアにおけるウランの同位体分別の理論的研究
橋本 拓磨 Geminal 波動関数を参照系とする強相関系密度汎関数理論の開発

同位体化学

- | | |
|--------|---|
| 雨倉 啓 | 金属内包フラーレン合成実験のための無担体 ^{139}Ce トレーサーの調整 |
| 伊藤 健太 | 有価金属回収を目指した光量子放射化分析による焼却灰溶融スラグの組成分析 |
| 片山 祐加 | 酸化鉄添加家庭ごみ焼却スラグガラスの化学状態と可視光応答型光触媒効果の相関 |
| 小林 祐太 | リン酸スズを含むバナジン酸塩ガラスの構造解析と電気伝導度 |
| 森下 さくら | ゾル-ゲル法により非晶質シリカマトリクス中に分散した酸化鉄ナノ粒子の構造解析と磁氣的性質の調査 |

<修士>

無機化学

- 澤田石 愛実 新規ビピレノール誘導体の合成とその性質
藤井 亮太郎 新規アリールジフェノキノンの合成と反応挙動

環境・地球化学

- 櫻井 萌 マトリクス支援レーザー脱離イオン化法における新規マトリクスの探索
藤井 洋佑 MALDI 法における定量分析および分子構造選択的イオン化法の実現
村上 功一 ナノ粒子化学組成分析法の改良とその性能評価

宇宙化学

- 前田 凌雅 希土類元素及びトリウム、ウランの分布に基づく R コンドライト母天体での変成作用の考察

有機構造生物化学

- 貴堂 晃弘 ライゲーション反応を用いたマルチドメインタンパク質 Protein Kinase C の構造解析の試み
永井 敢 RNA 結合ドメイン (RRM) を持つマルチドメインタンパク質の NMR による構造解析
名取 文彦 In-cell NMR を目指した常磁性ランタノイド錯体の開発

有機化学

- 大宮 拓也 キレート多座配位ニオブ錯体の合成と反応性に関する研究
城間 駿 ジオエノチオフェンが縮環した平面[4N]アヌレンの合成と性質
永井 豪 ポレート含有 N-ヘテロ環状カルベン (WCA-NHC) 配位子を有するイミド配位バナジウム及びハーフメタロセン型チタン錯体の合成と反応性
山田 拓海 キラル側鎖を有する π 共役ポリマーの集積化によるらせん階層構造の形成と特異な光機能の発現
國澤 実希子 オレフィンメタセシスを利用した末端官能基化共役ポリマーの効率合成と機能集積化
平野 真俊 ハーフメタロセン型チタン錯体触媒による新規オレフィン系ポリマーの合成と特性解析

Klangjian Chatdarun

Synthesis of Cu complex containing chiral bis(oxazoline) ligands, and their application for catalytic C-C bond formation

Chaimongkolkunasin Sapanna

Design of (arylimido)vanadium(V) alkylidene complex catalysts containing phenoxy ligands for ring-opening metathesis polymerization of cyclic olefins

生物化学

- 鍛治田 絹美 オーキシンドェグロンシステムを用いた必須遺伝子 *MMS22L* の機能解析
小林 宏次 ポリメラーゼ ε 校正活性がもつカンプトテシン耐性化機構の解明
小山 慎司 スクリーニングによる、効率が高い酵母型ターゲット組換え因子の特定
中里 亜利咲 DT40 免疫遺伝子多様化における SPARTAN の複製停止解除機能の解明
石川 大輔 質量分析法を基盤とした真核生物の構造的な非コード RNA の転写後修飾の解析

物性物理化学

- 三谷 拓示 Gd を含む二核金属内包フラーレンにおける磁氣的性質の解明

分子集合系物理化学

- 稲葉 堯通 シード法による金ナノロッド合成と界面活性剤 2 分子膜ラメラゲル相
尾崎 亮太 非イオン界面活性剤系のクラフト転移に対するアルカン添加効果
正岡 幸子 ジエステル型カチオン界面活性剤水溶液に対するノニオン界面活性剤添加効果
安田 健人 Micromachines swimming in viscoelastic fluids

反応物理化学

- 高橋 航大 電子捕獲衝突における散乱イオンの電子状態を区別した分子の解離ダイナミクス

有機合成化学

- 安藤 遼太郎 オルト置換ベンゼン環を有するキラルチアクラウンエーテルの合成、構造および性質
海老根 健樹 長鎖アルキル基を有するチアントレン誘導体の合成と自己組織化
神巻 恵理 *p*-置換ベンゼン環を有する不飽和チアクラウンエーテル及びその金属錯体の合成、構造
中静 誠仁 スルホニウム部位を有する不飽和チアクラウンエーテルの合成
村上 大河 1,2-ジチエットと共役ジエンとの熱および光反応

理論・計算化学

- 筒井 隆史 分子で観測されるパリティ・時間反転対称性破れ:相対論的量子化学法に基づく
プログラム開発と応用
- 宮本 優弥 NMR 化学シフトの特異値分解による解析

同位体化学

- 襲田 圭人 放射化学的手法を用いた導電性バナジン酸塩ガラスの構造解析と電気特性評価
- 田中 康介 還元反応を用いた放射性金属内包フラーレン分離法の開発
- 砂川 晃佑 ゼル-ゲル法により合成した鉄リン酸ガラスの磁氣的性質と局所構造の相関

<博士>

有機構造生物化学

嶋志田 一 Heteronuclear multidimensional NMR studies of proteins in cultured human cells.
(異種核多次元 NMR を用いたヒト培養細胞内蛋白質の解析)

有機化学

Qing Yan オレフィンの精密重合のためのフェノキシ配位ハーフトタノセン触媒の創製 (英文)

生物化学

浅田 隆大 Analysis of hierarchical genome structure of regulatory networks in fission yeast *fbp1* transcription

理論化学

Archana Velloth Quantum-Chemical Studies on the Electronic Structure and Magnetic Properties of 3d and 4f Metal Complexes

清水 俊彦 基底および励起状態における1-ナフトールおよびフェノール溶媒和クラスターに関するプロトン移動の理論的研究

文部科学省・日本学術振興会科学研究費補助金 平成 29 年度

<新学術領域研究>

- 杉浦 健一 新学術領域研究「配位アシンメトリ」 新規
多環芳香族化合物を用いた新しい軸不斉配位子の合成とキレトロピー特性の評価
- 山添 誠司 新学術領域公募研究 新規
担持金属クラスターの 3D 構造制御と触媒作用の解明
- 伊藤 隆 新学術領域研究・公募 継続
常磁性 in-cell NMR によるヒト培養細胞内の蛋白質動態解析
- 新学術領域研究・公募 新規
NMR を用いた細胞内蛋白質の立体構造, 安定性および動的平衡状態の解析
- 野村 琴広 新学術領域研究 (研究領域提案型、計画研究) 継続
3D 活性サイト制御による高性能ナノ分子触媒の創製
- 新学術領域研究 (研究領域提案型、計画研究) 継続・分担
3D 活性サイト科学のプラットフォーム構築による総括と研究支援
- 新学術領域研究 (国際活動支援班) 継続・分担
3D 活性サイト科学の海外拠点・国際ネットワーク構築
- 廣田 耕志 新学術領域研究 代表者 継続
非コード RNA によるクロマチン・高次ゲノム構造制御機構の解明
- 三島 正規 新学術領域研究 (公募) 新規
マルチドメインタンパク質がもつ動的な構造の解析
- 好村 滋行 新学術領域研究 継続
生体膜におけるメソ構造の非平衡ダイナミクス
- 池谷 鉄兵 新学術領域研究 継続
生細胞内の秩序と蛋白質構造安定性の解明に向けた基盤技術

新学術領域研究 分担 継続

スパースモデリングによる NMR 計測・解析の高速高精度化

<基盤研究等>

竹川 暢之 基盤研究 B (一般) 代表 新規 熱脱離型エアロゾル質量分析計における大気微粒子の気化・イオン化過程の解明

基盤研究 B (海外学術調査) 代表 継続 エアロゾル複合分析と個別粒子解析に基づくアジア低緯度域の粒子混合状態の解明

野村 琴広 基盤研究 B 継続 高性能分子触媒による精密重合・多量化を基盤とした高機能新材料・革新的合成法の開発

廣田 耕志 基盤研究 B 代表者 継続 複製停止解除におけるポリメラーゼネットワーク制御機構の解明

基盤研究 S 分担者 継続 ヒトゲノム編集細胞を使った、化学物質の薬理作用・有毒性を解析するシステムの構築

加藤 直 基盤研究 B 代表 新規 ずり流動場下で形成されるラメラ-オニオン中間構造と長距離配向秩序の解明

波田 雅彦 科研費基盤研究 B 新規、代表
高次相対論項と QED 補正を含んだ電子相関理論に基づく電磁気分子物性の高精度計算

三島 正規 基盤研究 B 継続
長鎖ノンコーディング RNA、SRA による転写制御の構造的基礎

稲垣 (高尾) 昭子 基盤研究 B 代表 継続 光増感性パラジウム錯体による重合反応制御

西長 亨 基盤研究 C 代表 新規
オリゴチオフェン-金微粒子系でのレドックス電気伝導スイッチング

- 田岡 万悟 基盤研究 B 代表者 新規
微量 RNA の動的な転写後修飾の解析法
- 基盤研究 B 分担者 継続
長鎖ノンコーディング RNA、SRA による転写制御の構造的基礎
- 基盤研究 C 分担者 継続 組織損傷時に放出される細胞内タンパク質群の“細胞外機能”と単球表面への結合機序
- 兒玉 健 基盤研究 C 継続 多周波数 ESR を用いた複核金属内包フラーレンアニオンの特異なスピン状態の解明
- 好村 滋行 基盤研究 C 継続 細胞のレオロジーが示す普遍性の理論的探索
- 中谷 直輝 基盤研究 B 継続、分担
遷移金属複合系の電子状態制御と構造、物性、反応の理論的研究
- 久富木 志郎 基盤研究 B 継続 金属並みの導電性を持つバナジン酸塩ガラスの開発とその二次電池正極材としての応用
- 三澤 健太郎 基盤研究 B (一般) (分担) 新規
熱脱離型エアロゾル質量分析計における大気微粒子の気化・イオン化過程の解明
- 基盤研究 B (海外学術調査) 分担 継続
エアロゾル複合分析と個別粒子解析に基づくアジア低緯度域の粒子混合状態の解明
- 池谷 鉄兵 基盤研究 C 継続 ベイズ推定を用いた NMR 立体構造解析手法の開発
- 基盤研究 C 分担 新規
高分子量蛋白質の NMR 構造解析を目指したスパーズ選択標識と NMR 自動解析法の開発
- 松本 淳 基盤研究 C 継続 多価イオン-分子衝突における電子捕獲サイト識別観測

阿部 穰里 基盤研究 B 新規、分担
高次相対論項と Q E D 補正を含んだ電子相関理論に基づく電磁気分子物性の
高精度計算

基盤研究 B 新規、分担
電子 E D M 探索のための冷却分子の研究

<その他>

竹川 暢之 挑戦的萌芽研究 (代表) 継続
粒子飛行時間検出に基づくミクロン粒子分級技術の新規開発

山添 誠司 若手研究 A 継続
高密度担持金属クラスター触媒開発の研究

伊藤 隆 挑戦的萌芽研究 継続
In-organelle NMR によるミトコンドリア内蛋白質の動態解析

野村 琴広 挑戦的萌芽研究 継続
特異な協奏機能反応場を形成する集積型固定化分子触媒の設計・創製

廣田 耕志 挑戦的萌芽研究 代表者 継続
新規損傷乗り越えアッセイによる損傷乗り越えの鎖特異性の解明

田岡 万悟 挑戦的萌芽研究 代表者 継続
シュードウリジン：新しいガンマーカーの探索

挑戦的萌芽研究 分担者 新規
細胞内異常蛋白質凝集体を効率よく分析できるプロテオミクス新手法の開発

三澤 健太郎 挑戦的萌芽研究 分担 継続
粒子飛行時間検出に基づくミクロン粒子分級技術の新規開発

阿部 拓也 若手研究 B 新規
遺伝学とプロテオミクス解析の融合によるコヒーレン制御ネットワークの解明

浅田 隆大

J S P S 特別研究員奨励費 継続

分裂酵母 f b p 1 におけるゲノム三次元構造を利用した遺伝子発現精密制御機構の解明

岩瀬 響

J S P S 特別研究員奨励費、代表、継続

多極小ポテンシャル面とトンネル問題を扱える精密振動回転解析理論の開発と応用

砂賀 彩光

J S P S 特別研究員奨励費、代表、新規

QED 効果を考慮した高精度電子状態理論の開発—新規素粒子理論構築を目指して—

その他の研究助成 平成 29 年度

<首都大学東京>

- 野村 琴広 学長裁量枠国際共同研究 継続 高性能分子触媒による効率炭素-炭素結合形成を基盤とした有機高機能材料の創製
- 廣田 耕志 学長裁量枠国際共同研究 新規 ゲノム編集・1分子イメージング・クライオ電顕の利用による蛋白質機能解析の国際共同研究ネットワーク
- 中谷 直輝 首都大学東京 傾斜的研究費（若手奨励経費）
Ab-initio 量子化学計算による遷移金属錯体の XANES スペクトル精密解析
- 首都大学東京 傾斜的研究費（部局競争的経費）
表面バルク系の有限次元波動関数理論の開発と固体触媒の構造・反応解析、精密設計
- 久富木 志郎 傾斜的研究費(全学分)学長裁量国際共同研究支援枠 継続
家庭ゴミ焼却スラグを原料とする環境浄化光触媒ガラスの開発とその国際的応用展開
- 末木 俊輔 平成 29 年度理工学研究科若手奨励研究費 代表 新規
新規Z型配位子を有する遷移金属錯体の合成と触媒的有機合成反応への応用
- 平成29年度傾斜的研究費 部局競争的経費 代表 新規
新規不斉Z型配位子遷移金属錯体の合成と不斉アジリジン合成法への応用
- 阿部 穰里 首都大学東京 傾斜的研究費（若手推奨経費）
バクテリアによるウラン還元反応に見られる同位体の核体積効果：
相対論的量子化学を用いた反応機構の解明
- 首都大学東京 傾斜的研究費（部局競争的経費）
同位体分別を評価するための高精度相対論的電子状態理論開発および地球化学への応用

<学外>

- 杉浦 健一 東京都・高度研究（分担者）新規
家庭ごみ焼却スラグからの有価金属回収技術
- 物質・デバイス領域研究・展開研究A 新規
実用可能な円二色発光材料の開発を目指した π 電子拡張型軸不斉化合物の合成と絶対構造の決定
- 竹川 暢之 環境省環境研究総合推進費（代表）新規
高感度分析技術に基づく空港周辺における超微小粒子状物質の動態解明
- 公益財団法人 住友財団 2017 年度 環境研究助成（代表） 継続
PM0.1 エアロゾル化学組成・数濃度のオンライン統合分析システムの開発
- 学術相談料： 富士電機株式会社 新規 ブラックカーボン粒子計測技術の研究
- 学術相談料： 新日鐵住金株式会社 新規及び継続
エアロゾルモニタリング装置を用いた大気浮遊物質の評価方法について
- 山添 誠司 戦略的創造研究推進事業 CREST 継続
電子顕微鏡で分子世界と実社会を繋ぐ分子技術の創出
- 東京理科大学「光触媒研究推進拠点」 新規
担持金属クラスターのサイズ・組成の精密制御による水分解に高活性な光触媒の開発
- 伊藤 隆 科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業(CREST) 継続
NMR と計算科学の融合による *in situ* 構造生物学の確立と真核細胞内蛋白質の動態研究への応用
- 野村 琴広 東京都高度研究ネットワーク強化プログラム 新規
高性能分子触媒が先導する高分子機能材料の合成と効率合成手法開発

科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 先導的物質変換領域(ACT-C) 継続
定量的な炭素-炭素結合形成・集積化を基盤とする新規な星型巨大 π 共役有機
分子の精密合成と光機能材料への展開

特定研究寄附金：日本ポリケム（株） 新規 研究助成

学術相談：三井化学（株） 新規 研究助成

廣田 耕志

山田科学振興財団 研究助成金 代表者 新規
非コードRNAによる転写因子結合制御機構の解明

波田 雅彦

JST クレスト 継続 分担
相対論的電子論が拓く革新的機能材料設計

東芝 新規 学術相談

ペロブスカイト太陽電池材料に於ける I/Br 混合効果が結晶体の電子構造や特性
に及ぼす効果

稲垣(高尾)昭子

物質・デバイス領域共同研究拠点 展開共同研究 A 新規
光増感性金属触媒を用いた配位重合制御による新規材料の開発

田岡 万悟

CREST戦略的創造研究推進事業 分担者 継続 RNA代謝異常症の
リボヌクレオプロテオミクス解析と構造生命科学への展開（磯辺俊明）

佐藤 総一

小笠原科学技術振興財団研究助成金 継続
高密度に硫黄原子を内在する分子を礎にした超高屈折ポリマーの開発

久富木 志郎

平成 29 年度 物質・デバイス領域共同研究拠点 一般研究課題 新規
ナトリウムイオン電池への応用を指向した高い電子伝導性を持つバナジン酸
ナトリウムガラス正極材の開発

東京都高度研究 新規

家庭ごみ焼却スラグからの有価金属回収技術および可視光応答型光触媒ガラス作成
技術の開発とその国際的応用展開

ミニ研究環 新規

理論計算に基づいた半導体ナノガラスの開発

各賞受賞 平成 29 年度

- 野村 琴広 中国科学院 2017/8/15
Organometallic Chemistry for Design of Efficient Molecular Catalysts for
Synthesis of Advanced Functional Materials
2017 年度 中国科学院外国專家特聘研究員（化学研究所客員教授）
- Université Libre de Bruxelles (ULB) 2017/5/16
Chaire Internationale, Université Libre de Bruxelles (ULB) 客員教授
- Sun Zelin Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) (Tianjin, China, 10 月, 2017).
2017/10/26
Precise synthesis of star-shaped polymers by living ring-opening metathesis
polymerization
Best Poster Presentation Award
- 原川 仁志 Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) (Tianjin, China, 10 月, 2017).
2017/10/26
Copolymerization of ethylene with methylcyclohexenes, 1-methylcyclopentene
using half-titanocene catalysts
Best Poster Presentation Award
- 永井 豪 鳥取大会(第47回石油・石油化学討論会) 2017/11/16
ボレート含有N-ヘテロ環状カルベン (WCA-NHC) 配位子を有するバナジウム及
びチタン錯体の合成とエチレン重合
優秀講演による特集号への寄稿
- 菅野 翔平 優秀ポスター発表賞、第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017、2017 年 10 月 17 日
色素増感型及びペロブスカイト型太陽電池に関する量子化学的研究
- 菅野 翔平 優秀ポスター賞、第 2 回フロンティア太陽電池セミナー、2017 年 12 月 1 日
ハイブリッドペロブスカイトの計算化学的研究: 有機カチオンの回転運動障壁
とインフォマティクスによる新規材料探索

国際会議の開催、および組織委員としての活動 平成 29 年度

野村 琴広

- International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2018 (C&FC2018)
Bangkok, Thailand 2018 年 12 月 International Coordinator
- Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) Tianjin, China
2017 年 10 月 International Advisory Board
- The 8th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT8)
横浜 2018年8月 国内組織委員
- The 14th International Kyoto Conference on. New Aspects of Organic Chemistry.
(IKCOC-14) 京都
2018年11月 国内組織委員
- 7th CAS·TWAS Symposium on Green Technology (GT2018) Beijing, China
2018 年 7 月 International Board Member
- The 12th SPSJ International Polymer Conference (IPC2018) Hiroshima, Japan
2018年12月 Program Committee
- 鳥取大会 (第47回石油・石油化学討論会) 鳥取
2017 年 11 月 ポリマー・オリゴマーセッション企画担当

加藤 直

- Association in Solution IV (An ECI Conference Series)
2017 年 7 月 31 日～8 月 4 日 ニューファンドランド, カナダ
Scientific Committee

清水 敏夫

- 28th International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur 国内組織委員
- 15th International Symposium on Inorganic Ring Systems 国内組織委員

波田 雅彦

International Symposium "Theoretical Design of Materials with Innovative Functions
Based on Element Strategy and Relativistic Electronic Theory"
首都大学東京 実行委員長 2017 年 12 月

佐藤 総一

- ・ 第 15 回無機環状化合物国際会議シンポジウム (IRIS-15) 京都大学化学研究所
2018 年 1 月～ 国内組織委員
- ・ 第 22 回有機硫黄国際会議 (ISOCS-22) 東京工業大学
2017 年 6 月～ 国内組織委員

海外研究[国際会議における学術講演・海外での講義等] 平成 29 年度

杉浦 健一

International Conference on Recent Advances in Mathematical and Physical Sciences

平成 30 年 1 月 27 日 (土) ~29 日 (月)

バングラデシュ人民共和国、ダッカ市

pai-Expanded biaryls and their photophysical properties (招待講演)

野村 琴広

Inner Mongolia University 9月12日 Hohhot, China

Olefin metathesis: Design of efficient catalysts for synthesis of advanced materials

Institute of Process Engineering, CAS 9月19日 Beijing, China

Design of efficient molecular catalysts for development of advanced polymeric materials

Beijing Institute of Technology 9月20日 Beijing, China

Design of efficient molecular catalysts for development of advanced polymeric materials

Beijing Institute of Fashion Technology 9月29日 Beijing, China

Development of Advanced Polymeric Materials by Precise Polymerization,
End-Functionalization, Grafting

Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) Keynote 10月27日 Tianjin, China

XAS Analysis for exploring the oxidation state of the catalytically active species in reaction with ethylene by (imido)vanadium complex catalysts

Universite libre de Bruxelles (Solvay Colloquium) 11月8日 Brussel, Belgium

Design of Efficient Molecular Catalysts for Development of Polymeric Functional Materials

University of Ghent 11月10日 Ghent, Belgium

Olefin metathesis: Efficient method for precise synthesis of end-functionalized liner/star conjugated polymersting

University of Mons 11月13日 Mons, Belgium

Olefin metathesis: Design of efficient catalysts and synthesis of advanced conjugated materials

University of Liege 11月21日 Liege, Belgium

Olefin metathesis: efficient methods for synthesis of advanced materials

University of Lille 12月1日 Lille, France

(Imido)vanadium complex catalysts for olefin polymerization/dimerization

Beijing University of Chemical Technology 12月18日 Beijing, China

Precise synthesis of cyclic olefin polymers by olefin insertion/metathesis polymerization

Hefei Institute of Technology 12月19日 Hefei, China

Olefin metathesis: Efficient method for precise synthesis of end-functionalized conjugated polymers/oligomers as advanced functional materials

University of Science and Technology of China 12月19日 Hefei, China

(Imido)vanadium complex catalysts for olefin polymerization/oligomerization

波田 雅彦

The Collaborative Conference on Materials Research (CCMR2017),

Jun. 26-30, 2017, International Convention Center Jeju, Jeju island, South Korea

Quantum-Chemical Calculations on NMR chemical shifts of Molecules Containing Lead

The EMN Meeting on Computation and Theory

2017, Nov. 6-10, 2017, Hotel ibis One Central, Dubai, The United Arab Emirates

Relativistic Quantum-Chemical Calculations of NMR Chemical Shifts in Molecules Containing Heavy Metals

Trinity College Dublin, The University of Dublin, 2018年3月7日、Dublin, Ireland

Quantum-Chemical Calculations for Molecules containing Heavy Elements

三島 正規

2017 Taiwan-Japan biomedical symposium on magnetic resonance

15th – 18th Oct. 2017 台南市、台湾

Structural analysis of flexible multi-domain proteins

佐藤 総一

第12回ヘテロ原子化学国際会議 (ICHAC-12) 2017年6月11日~16日 バンクーバー・カナダ
Synthesis of Novel Dicationic Antimony Compounds

久富木 志郎

2nd International Conference on Phosphate Materials, Oxford (U. K.)
Jul. 26-28, 2017 Oxford (U. K.)

Local structure and magnetic properties of iron phosphate glass prepared by sol-gel method

松本 淳

7th International Workshop on Electrostatic Storage Device(ESD2017) 6/19-22 Lyon, France
First ion storage in a table-top electrostatic storage ring (μE -ring)

阿部 穰里

スイス連邦工科大学ローザンヌ校での講演

2017年11月20-21日 ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE, Swiss
Ab initio calculation for U isotope fractionation

秋山 和彦

5th International Nuclear Chemistry Congress

Aug. 27- Sep. 1st, 2017

Göteborg (Sweden)

Production and Properties of Promethium Metallofullerenes

Chaimongkolkunasin Sapanna

Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) 10月26日 Tianjin, China

Design of (arylimido)vanadium(V) alkylidene complex catalysts for ring-opening metathesis polymerization of cyclic olefins

共同研究 平成29年度

- 竹川 暢之
- ・ 2009年～現在 産業技術総合研究所
 - ・ 2007年～現在 富士電機株式会社
 - ・ 2014年～現在 新日鐵住金株式会社
 - ・ 2015年～現在 光州科学技術院（韓国）
 - ・ 2016年～現在 中央研究院(台湾)
 - ・ 2017年～現在 国立環境研究所
- 野村 琴広
- ・ 通年 中国科学院化学研究所（北京）・中国
 - ・ 通年 ブリュッセル自由大学（ブリュッセル）・ベルギー
 - ・ 通年 ブラウンシュバイク工科大学・ドイツ
 - ・ 通年 チュラロンコン大学（バンコク）・タイ
 - ・ 通年 タマサート大学（バンコク）・タイ
 - ・ 通年 奈良先端科学技術大学院大学
 - ・ 通年 群馬大学大学院理工学府分子科学部門
 - ・ 通年 東京農工大学工学部
 - ・ 通年 大阪大学基礎工学研究科
 - ・ 通年 東京工業大学物質理工学院
 - ・ 通年 東京大学理学部化学科
 - ・ 通年 京都大学化学研究所
 - ・ 通年（公財）高輝度光科学研究センター
- 廣田 耕志
- ・ 8月3日～8月7日
ボストン大学・アメリカ
 - ・ 8月8日～8月14日
スローンケタリング研究所・アメリカ
- 加藤 直・川端庸平
- ・ 国立研究開発法人海洋研究開発機構
ナノ空間に閉じ込められた炭化水素が示す異方性結晶成長に関する研究

- 城丸 春夫
- ・ 通年 イェテボリ大学・スウェーデン
 - ・ 通年 天津大学・中国
 - ・ 通年 ウォータールー大学・カナダ
 - ・ 通年 理化学研究所
 - ・ 通年 東洋大学、J-PARK
- 西長 亨
- ・ 平成26年1月～ 北里大学理学部化学科
 - ・ 平成27年5月～ 大阪市立大学理学部化学科
 - ・ 平成29年4月～ 京都大学工学部
 - ・ 平成29年4月～ 愛媛大学理学部化学科
 - ・ 平成29年9月～ 大阪大学基礎工学部
- 稲垣 昭子
- ・ 2017. 4. 1～2018. 3. 31
物質・デバイス領域共同研究拠点展開共同研究 A
首都大学東京、東京工業大学資源化学研究所
- 中谷 直輝
- ・ 通年 フランス・ストラスブール大学
 - ・ 通年 京都大学・化学研究所
 - ・ 通年 北海道大学・触媒科学研究所
 - ・ 通年 東北大学
 - ・ 通年 九州大学・先導物質化学研究所
- 久富木 志郎
- ・ 平成 29 年 3 月 21 日～4 月 6 日
ルジェルボスコヴィッチ研究所・クロアチア
 - ・ 平成 29 年 5 月 13 日～5 月 20 日
テキサス A&M 大学・米国
 - ・ 平成 29 年 7 月 19 日～7 月 24 日
シェフィールド ハラム大学・英国
 - ・ 平成 29 年 9 月 8 日～10 月 1 日
エトボシュローランド大学・ハンガリー
 - ・ 平成 29 年度
物質・材料研究機構
 - ・ 平成 29 年度
九州大学先導物質科学研究所
 - ・ 平成 29 年度
大阪大学接合科学研究所

- 三澤 健太郎 ・平成 28 年 4 月～現在 国立環境研究所
- 白井 直樹 国立極地研究所 平成 29 年～
誘導結合プラズマ質量分析法を用いた南極隕石分類法の確立
- 池谷 鉄兵 ・2017 年 8 月 16 日～30 日
University of Leicester, UK
- 末木 俊輔 ・平成28年4月～ 九州大学先導物質化学研究所
・平成28年4月～ 星薬科大学
- 阿部 拓也 ・7 月 1 日～7 月 3 1 日 IFOM研究所・イタリア
- 川端 庸平 ・国立研究開発法人産業技術総合研究所
金ナノロッドの新規合成法の開発及び物性評価技術の開発
- 松本 淳 ・通年 ウォータールー大学・カナダ
・通年 リヨン大学・フランス
・通年 理化学研究所
- 阿部 穰里 ・通年 スイス連邦工科大学ローザンヌ校
・通年 パリ地球物理学研究所
・通年 トロント大学
・通年 東京工業大学
- 秋山 和彦 ・東北大学電子光理学研究センター 平成29年度
・量子科学研究開発機構 平成29年度

海外からの訪問者 平成29年度

有機構造生物化学研究室

Dr. Daniel Nietlispach, Department of Biochemistry

University of Cambridge, UK

2017年3月23日—24日 共同研究

Prof. Peter Güntert, Institute of Biophysical Chemistry

J. W. Goethe-University Frankfurt, Germany

2017年4月27日—30日 講演

田仲加代子博士, Department of Molecular and Cell Biology, University of Leicester, UK

2017年6月14日—22日 首都大学東京教員交換支援制度実施

Dr. Iva Pritišanac, Institute of Biophysical Chemistry

J. W. Goethe-University Frankfurt, Germany

2017年9月14日—30日 講演

Dr. Dean Strotz, Laboratorium f. Physikalische Chemie,

ETH Zürich Hönggerberg, Switzerland

2017年10月7日—30日 共同研究

Adam Lightfoot, Leicester Institute of Structural and Chemical Biology,

University of Leicester, UK

2017年10月3日—12月8日 共同研究

有機化学研究室

Le Duy • Thammasat University, Thailand

5月16日～8月23日 共同プログラム 客員研究員 (博士後期課程学生)

Yanjun Chen • Ningbo Polytechnic, China

6月1日～8月28日 共同研究 客員研究員

Mohammed Mehawed Abdellatif • エジプト国立研究所 (National Research Center), Egypt

7月1日～9月27日 共同研究 (帰国留学生短期研究支援制度) 客員研究員

Konstantin Preradovic · University of Belgrade, Serbia

7月24日～9月29日 Internship IAESTE 学生

Hou Xiaohua · 合肥工業大学

8月6日～8月22日 共同研究 客員研究員

Suwadee Kongkarakul · Thammasat University, Thailand

7月21日 共同研究打ち合わせ

Dongzhi Zhu · Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, China

12月10日～1月21日 共同研究（高度研究ネットワーク強化）客員研究員（博士前期課程学生）

Chantsllyam Bariashir · Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, China

12月10日～1月21日 共同研究（高度研究ネットワーク強化）客員研究員（博士後期課程学生）

Xiao Ma · Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, China

1月15日～2月23日 共同研究（高度研究ネットワーク強化）博士前期課程学生

Zhao Weizhen · Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, China

1月22日～1月29日 共同研究（高度研究ネットワーク強化）准教授

Pramoch Rangsunvigit · PETROMAT; The Petroleum and Petrochemical College,
Chulalongkorn University, Thailand

1月30日～1月31日 研究打ち合わせ

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

Boonyarach Kitiyanan · The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn
University, Thailand

1月30日～1月31日 研究打ち合わせ

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

Wenhong Yang · Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, China

1月31日 研究打ち合わせ

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

生物化学研究室

田仲加代子・レスター大学 (イギリス)

6月14日～6月22日

研究打ち合わせ、共同研究、セミナー

川澄遼太郎・IFOM研究所 (イタリア)

6月3日～6月15日

研究打ち合わせ、共同研究、セミナー

反応物理化学研究室

Sahr Al-Tuairqi (ウォータールー大学)

Vitali Zhaunerchyk (イエテボリ大学)

Piero Antonio Ferrari Ramirez (ルーヴァン・カトリック大学)

Klavs Hansen (天津大学)

Chen Fuqiang (天津大学)

Urszula Szczepaniak (ポーランド科学アカデミー)

Giorgi Veshapidze (イリヤ国立大学)

理論・計算化学研究室

Ms. Renu Bala, Indian Institute of Technology Rookee

2017年6月29日～7月28日 研究討議

Dr. Nataraj S. Hulyar, Indian Institute of Technology Rookee

2017年6月29日～7月12日 研究討議

Prof. Zeena S. Pillai (Amrita University, India)

2017年8月21日～8月22日 研究討議、及び首都大学東京における公聴会に出席

Dr. Nattapong Paiboonvorachat (Chulalongkon University, Thailand)

2017年12月6日～12月10日 研究討議

Dr. Nawee Kungwan, Chian Mai University, Thailand,

2017年12月6日～12月10日 研究討議

Prof. Marek Wojcik, Jagiellonian University, Poland

2017年12月7日～12月10日 研究討議

Ms. Renu Bala, Indian Institute of Technology Rookee

2017年12月3日～12月15日 研究討議、国際会議発表

Prof. Marek Wojcik, Jagiellonian University, Poland

2018年2月5日 研究討議とセミナー発表

同位体化学研究室

ホモナイ ゴルタン教授・エトボシュ ローランド大学

平成29年8月2日～8月14日 共同研究打合せ、セミナーでの講演

シンコー カタリン准教授・エトボシュ ローランド大学

平成29年8月2日～8月14日 共同研究打合せ、セミナーでの講演

シュヴェグ カーロイ准教授・エトボシュ ローランド大学

平成29年8月2日～8月14日 共同研究打合せ、セミナーでの講演

ランチョック アドリアナ 博士・チェコ科学アカデミー

平成30年3月15日～3月25日 共同研究打合せ、セミナーでの講演

ヴォルフォヴァ レンカ 博士・チェコ科学アカデミー

平成30年3月15日～3月25日 共同研究打合せ、セミナーでの講演

マハラ リボル 博士・パラツキー大学

平成30年3月17日～3月25日 共同研究打合せ、セミナーでの講演

ビンガム ポール 博士・シェフィールド ハラム大学

平成30年3月18日～3月23日 共同研究打合せ、セミナーでの講演

学会活動等（学協会等での委員等） 平成 29 年度

- 竹川 暢之
- ・ International Commission on Atmospheric Chemistry and Global Pollution (iCACGP) Scientific Steering Committee 2015-2018
 - ・ 日本学術会議 International Global Atmospheric Chemistry (IGAC) 小委員会委員 2015～2020 年
 - ・ 日本気象学会 山本賞候補者推薦委員会委員 2014 年～
 - ・ 日本エアロゾル学会 エアロゾル先端計測技術開発研究会 代表 2017 年～
- 山添 誠司
- ・ 触媒学会 代議員 H29-H31
 - ・ 触媒学会 討論会委員 H30-H31
 - ・ 触媒学会 第 2 回東日本キャタリシスセミナー実行委員 H29
 - ・ SPRUC X 線スペクトロスコープ研究会 副代表 H28-H29
- 伊藤 隆
- ・ 日本核磁気共鳴学会 評議員 2017 年度～2018 年度
 - ・ 日本核磁気共鳴学会 理事 2017 年度～2018 年度
 - ・ 日本核磁気共鳴学会 第 56 回 NMR 討論会 世話人 2017 年度
 - ・ 日本生物物理学会 分野別専門委員 2017 年度
 - ・ 科学技術振興機構
戦略的創造研究推進事業 (CREST), 研究領域「計測技術と高度情報処理の融合によるインテリジェント計測・解析手法の開発と応用」, 領域アドバイザー 2016 年度～
- 野村 琴広
- ・ 石油学会 石油化学部会委員
 - ・ 石油学会 第 9 期正会員
 - ・ 近畿化学協会 代議員
 - ・ 触媒学会 ファインケミカルズ合成触媒研究会 世話人
 - ・ 触媒学会 重合触媒設計研究会 世話人
 - ・ 日本ポリオレフィン総合研究会 運営委員
 - ・ Elsevier B.V. (Amsterdam, Netherlands)
Molecular Catalysis, Editorial Board
 - ・ Vietnam Academy of Science and Technology
Vietnam Journal of Chemistry, International Editorial Board

- Bentham Science Publishers, Ltd. (New York, USA)
Letters in Organic Chemistry, Editorial Board
- MDPI (Multidisciplinary Digital Publishing Institute) Publishing (Basel, Switzerland) *Catalysts*, Editorial Board
- Scientific Research Publishing, Inc. (Irvine, CA, USA)
Green Sustainable Chemistry, Editorial Board
- International Scholarly Research Network (New York, NY, USA)
ISRNCHEMICAL ENGINEERING, Editorial Board
- iMed Pub LLC. (USA)
Trends in Green Chemistry, Editorial Board

- 加藤 直
- 日本化学会コロイドおよび界面化学部会 監査 3/1 - 2/28
 - 日本化学会コロイドおよび界面化学部会 役員 3/1 - 2/28
 - 日本化学会コロイドおよび界面化学部会 将来構想委員 3/1 - 2/28
 - 日本油化学会 代議員 4/1 - 3/31
 - 日本油化学会 関東支部幹事 4/1 - 3/31
 - 日本化学会編 「化学便覧 基礎編 改訂6版」(丸善) 編集委員

- 清水 敏夫
- *Journal of Sulfur Chemistry* 編集委員 2006年1月～

- 波田 雅彦
- 日本コンピュータ化学会 理事 ～2014年～
 - 量子化学研究協会 副理事長 ～2014年～
 - 計算科学研究センター運営委員会 委員 ～2014年～
 - 分子化学会 会計監査委員 2017～2018年

- 大浦 泰嗣
- 放射化分析研究会 幹事 2000年～
 - 東北大学電子光理学研究センター 運営協議会課題採択委員会委員 2010年～
 - 東北大学電子光理学研究センター 運営協議会委員 2015年～
 - 京都大学原子炉実験所 共同利用研究委員会委員 2017年～

- 三島 正規
- 日本核磁気共鳴学会 評議委員 H30-H31
 - 第56回 NMR 討論会 プログラム委員 H30

- 稲垣(高尾)昭子
- 複合系の光機能研究会 世話人
 - 有機合成化学協会 編集委員

- 西長 亨
- ・日本化学会 代議員
 - ・日本化学会 第98春季年会プログラム小委員
 - ・有機合成化学協会 代議員
- 佐藤 総一
- 日本化学会
第98回日本化学会春季年会プログラム編成委員（ヘテロ原子化学分野）
2018年3月20日～23日
- 久富木 志郎
- ・大学等放射線施設協議会 常議員 平成28年度～
 - ・日本アイソトープ協会 企画運営委員 平成28年度～
 - ・メスバウアー分光研究会 運営委員 平成26年度～
- 三澤 健太郎
- ・日本エアロゾル学会 理事（若手担当）2016年9月～現在
 - ・日本エアロゾル学会若手会 代表 2016年9月～現在
- 池谷 鉄兵
- ・第56回NMR討論会 プログラム委員
- 阿部 穰里
- ・同位体科学会 執行役員 2017年～

他大学非常勤講師（講演・集中講義など）

平成 29 年度

- 伊藤 隆 大阪大学, 蛋白質研究所 2017/1/27
京都大学, 桂キャンパス 2017/2/22
RRR worshop 2017 京都大学, 桂キャンパス 2017/2/22
- 野村 琴広 中国科学院大学 平成 29 年度 集中講義
- 大浦 泰嗣 北里大学理学部 後期 放射化学
- 三島 正規 放送大学 通年 化学結合論 (分担)
- 兒玉 健 東京工芸大学 2017 年 7 月 27 日
特別講義「ナノ炭素物質の化学 ～金属内包フラーレンの物理化学～」
- 芝本 幸平 中央大学 理工学部 応用化学科
化学情報処理 (前期火曜 2 限 各 15 回)
- 白井 直樹 電気通信大学 後期 基礎科学実験 B
- 阿部 拓也 山梨県 (帝京科学大学) 後期 (9月)
最近の遺伝子生命工学
- 阿部 穰里 東京農工大学 前期 化学基礎
- 秋山 和彦 日本アイソトープ協会 前期 ラジオアイソトープ安全取扱講習会 化学
法政大学 後期 分析化学

講演会・研究会等での講義・講演 平成 29 年度

- 竹川 暢之 カノマックス・エアロゾル・ワークショップ（芝浦工業大学，東京）
質量分析計を用いたエアロゾル化学組成分析（招待講演）
2017 年 8 月 4 日
- 山添 誠司 相界面プロジェクトの年度末シンポジウム
金属クラスターの精密合成とその触媒応用
龍谷大学理工学部瀬田キャンパス（2018/2/27）
- 日本化学会第 98 春年会
多価アニオン金属酸化物クラスターの塩基触媒応用
日本大学理工学部船橋キャンパス（2018/3/20）
- 伊藤 隆 蛋白研セミナー"Molecular Crowding and Macromolecular Association"（大阪大学）
Investigating protein behaviours in cells by NMR
2017 年 1 月 27 日
- RRR workshop 2017（京都大学）
Applications of nonlinear sampling and maximum entropy reconstruction to
problematic protein samples
2017 年 2 月 22 日
- RRR workshop 2017（京都大学）
Investigating protein behaviours in cells by NMR (Protein NMR structure
refinement based on Bayesian Inference)
2017 年 2 月 22 日
- 日本薬学会第 137 年会（仙台国際センター）
NMR による生細胞内蛋白質の立体構造・ダイナミクスの解析
2017 年 3 月 25 日
- 分子研研究会「生体金属動態」（分子科学研究所，岡崎）
in situ structural biology by NMR
2017 年 8 月 27 日

日本生物物理学会第 55 回年会 (熊本大学)

NMR approaches to investigate protein folding and dynamics in the crowded intracellular environment

2017 年 9 月 20 日

野村 琴広

第12回次世代ポリオレフィン総合研究会 (東京, 8月, 2017)

バナジウム・チタン錯体触媒によるオレフィン重合における触媒活性種解析
8月3日

2017 年度高分子学会 Webinar 講演

ポリオレフィンの精密合成のための触媒設計

10月25日

日本化学会第 98 春季年会 ATP プログラム

高性能分子触媒が先導する新しいオレフィン系高分子機能材料の研究開発
3月21日

廣田 耕志

Molecular Biology Meeting (ボストン大学)

Metabolic stress-induced lncRNA (mlonRNA) transcription induces chromatin remodeling effectively within 290bp

8月7日

Molecular Oncology Meeting (スローンケタリング研究所)

ALC1 and XRCC1 distinctly contribute to genome maintenance under PARP pathway : Power of genetic study in human cells

8月11日

加藤 直

日本油化学会 界面実践講座 2017

基礎からの静的・動的散乱と X 線小角散乱 2017 年 7 月 13 日

都立科学技術高等学校短期集中講座

ソフトマターの魅力 2018 年 3 月 16 日

波田 雅彦

第29期CAMMフォーラム/企業研究会、2017年1月12日

相対論を用いた量子化学計算

- 三島 正規 文部科学省 先端研究基盤共用促進事業 NMR 共用プラットフォーム
平成 28 年度 活動報告会 (理化学研究所 横浜キャンパス 交流棟ホール)
長距離情報の取得によるマルチドメインタンパク質の構造解析のための NMR 技術の高度化 2017 年 3 月 21 日 (火)
- 稲垣 昭子 International CLS Forum on Photo and Catalytic Science for Sustainable Society
Syntheses and Reactivities of Multinuclear Rhodium and Iridium Complexes
Surrounded by Light-Absorbing Ligands 3 月 3 日
- 佐藤 総一 第 5 2 回典型元素化学セミナー (岐阜)
ヘキサチアアダマンタン (HTA) 誘導体の合成とその応用
2017 年 8 月 31 日 ~ 9 月 2 日
- 久富木 志郎 2017 年度ダイナミックアライアンス G2 分科会 (北海道大学)
Na イオン二次電池正極材としてのバナジン酸塩ガラスの開発
2017 年 7 月 3 日 ~ 7 月 4 日
- 首都大学東京・新技術説明会
レアメタル不要で高性能な可視光応答型光触媒ガラス
2017 年 7 月 11 日
- Sheffield Hallam University Seminar 2017
⁵⁷Fe-Mössbauer study of iron-containing materials for environmental
Purification
2017 年 7 月 20 日
- 池谷 鉄兵 よこはま NMR 研究会 (横浜)
NMR データの自動解析および蛋白質立体構造計算の現状と創薬研究への応用の可能性
2017 年 9 月 26 日
- 第 55 回日本生物物理学会年会 (熊本)
データ駆動科学が拓く新しい生命計測データ解析
2017 年 9 月 20 日

阿部 穰里 エネルギー・環境・資源問題の解決に繋がる革新的材料創出に向けた
光・量子ビーム応用技術調査専門委員会第1回研究会、
2017年7月24日、東京理科大学
相対論的量子化学の理論開発と応用

秋山 和彦 第61回放射化学討論会（筑波大学）
化学的還元反応を用いた金属内包フラーレン分離の条件検討-2
2017年9月6日～9月8日

第61回放射化学討論会（筑波大学）
核反跳による $Y@C_{60}$ の合成
2017年9月6日～9月8日

第61回放射化学討論会（筑波大学）
光核反応を用いた ^{143}Pm 製造と ^{143}Pm 内包フラーレンの合成及びその性質
2017年9月6日～9月8日

非常勤講師（集中講義など） 平成 29 年度

有機化学

本倉 健・物質理工学院応用化学系

6 月 30 日

第 280 回化学コロキウム

Pramoch Rangsunvigit・PETROMAT; The Petroleum and Petrochemical College,
Chulalongkorn University, Thailand

1 月 31 日

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

Boonyarach Kitiyanan・The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn
University, Thailand

1 月 31 日

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

Wenhong Yang・Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, China

1 月 31 日

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

平野雅文・東京農工大学

1 月 31 日

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

竹歳絢子・首都大学東京

1 月 31 日

TMU and PetroMat Joint Mini Symposium on Catalysis and Advanced Materials 2018

分子集合系物理化学

近藤 行成 (東京理科大学工学部・教授) 後期 物理化学特別講義 I

基礎からのコロイド・界面化学

反応物理化学

物理化学特別講義 I 電磁場を用いた荷電粒子の閉じ込めとその応用
広島大学先端物質科学研究科 檜垣浩之准教授
6月29, 30日

理論・計算化学

立花明知・京都大学工学研究科・教授
大学院集中講義 物理化学特別講義 I 「量子電磁力学の基礎」
第284回化学コースコロキウム
量子電磁力学 (QED) による二重スリット現象および EPR 観測の新しい完全な予言

平成 29 年度首都大学東京理工学研究科 教育改革推進事業（理工 GP） 物質科学における大学院教育のグローバル化 実施報告

首都大学東京 理工学研究科 物理学専攻・分子物質化学専攻

事業推進メンバー

実施責任者： 青木 勇二

取組実施代表者： 青木 勇二，伊藤 隆

実施コアメンバー：

（物理） 首藤 啓（専攻長），セルゲイ・ケトフ

（化学） 廣田 耕志（専攻長），兒玉 健，中谷 直輝

事務局

（物理） 阿部 知子

（化学） 青山 恭江

物理学専攻と分子物質化学専攻は，平成 23 年度以降，理工学研究科の教育改革推進事業（理工 GP）として，物理学専攻・分子物質化学専攻の共同大学院教育プログラム「物質科学における大学院教育のグローバル化」を実施し，広い視野を持ったグローバル社会に通用する大学院生を育てることを目標に，協力体制を維持・強化しつつ，様々な事業を行ってきた。

平成 29 年度は，①大学院生国際研究集会派遣と，②著名研究者の講演会・交流の，2 つの事業を計画・実施した。

①大学院生国際研究集会派遣

H29 年度の募集は，5 月～9 月と 10 月～3 月の 2 期に分けて行った。それぞれの募集について対し，合計 4 名の審査委員（申請者と利害関係のない物理 2 名，化学 2 名の教員）による書類審査を経て，審査委員会（第 1 期：5 月 17 日，第 2 期：10 月 3 日に開催）にて採択を決定した。

化学からは第 1 期に 17 名（国際会議），第 2 期に 2 名（国外研修）の申請があり，そのうち第 1 期に 3 名，第 2 期に 1 名が採択された。しかし，第 1 期，第 2 期とも採択後に 1 件の辞退者が出たことにより，実施件数は 2 件に留まった。

②著名研究者の講演会・交流

2015 年度ノーベル物理学賞受賞者の梶田隆章先生にご来学頂き，「ニュートリノと重力波で探る宇宙の謎」と題してご講演頂いた。

教育改革 GP（教育改革推進事業；学長指定課題）に係る事業

分子物質化学専攻担当者 兒玉 健

H26 年度から H28 年度まで続いた教育改革推進事業（「主体的学習促進のための新たな授業デザイン及び自学自習のサポート」）に引き続き、「主体的学修の促進と俯瞰的視野を持つ人材の育成」というテーマで新たな事業が H29 年度から 3 年の予定でスタートした。分子物質化学専攻を含む理工学系では、主体的学習促進のために自学自習をサポートする仕組みを作る目的で、本 GP の活動が行われた。前事業に引き続き、理工学系の共通の取り組みとして、理工なんでも相談室を開催し、また、化学コース独自の取り組みも行った。以下にその内容を記す。

【理工なんでも相談室】

主体的学習を補助する仕組みとして、「理工なんでも相談室」を開催した。学部学生が専門教育を学ぶ上で生じた疑問を自由に質問できるようにして、授業時間外における主体的学習をサポートした。授業中にチラシ配布による宣伝などを行った。実施時間・場所は次の通り。

理工なんでも相談室 実施時間・場所
毎週木曜日の昼休み、12:10~12:55 の 45 分間
場所：11 号館 103 室

前・後期ともに、博士後期課程の学生 1 名が回答にあたった。化学コースのみならず、他コースの学生からも質問があり、質問者の学習にとって一定の成果があったと思われる。引き続き、もっと質問者が増えるような取り組みが今後の課題であると考えている。

【分子物質化学専攻独自の取り組み】

分子物質化学専攻（化学コース）教員が担当する理工系共通基礎科目と物理化学初等演習に、昨年度同様、本 GP で TA を配置した。各授業では、課題、小テストを行い、TA は授業の準備の手伝い、時間内におけるチューター、小テストの採点等を担当した。課題や小テストの円滑な実施により、学生の学習意欲や家庭での学習時間等の向上を達成目標とした。教員からは TA の配置により、小テストや課題の実施を実際に円滑に行うことができたという意見があった。

教室の行事

平成 29 年度 首都大学東京 1 日体験化学教室「化学への招待」

主催：分子物質化学専攻および分子応用化学専攻

共催：日本化学会・関東支部

実施日：8 月 18 日（金）

会場：首都大学東京 8 号棟学生実験室他

全体世話人：田岡万悟

分子物質化学専攻は、全 12 課題のうち、以下の 6 課題を担当した。

1. 合成色素を作ってみよう！！アゾ色素・オレンジ-II の合成
2. 高出力レーザー照射による直線型炭素分子の生成
3. 放射能・放射線を調べよう
4. 柔らかい物質 ” ソフトマター ” と高分子 ナイロンの合成を通じてー
5. 分子生物学実験の基礎、プラスミド DNA の精製と切断、分離を学ぼう
6. 茶葉からのカフェインの抽出と精製

例年にならい、協賛学会誌での会告、web サイトでの周知、ポスター等によって参加希望者を募ったところ、155 名の応募があった。実施に先立ち、応募者全員に案内封書を送付し、メールまたは FAX による実験テーマの希望調査を行って、テーマの振り分けを行った。テーマ希望調査に返信がなかったもの、事前連絡があった欠席、当日無断欠席等、あわせて 35 名のキャンセルがあり、参加者は 120 名となった。参加者の男女比はほぼ 5 : 5 であり、学年は高校 1 年生が最多（全体の約 2/3 強）であった。

当日のプログラムは以下の通りである。

9:30～10:00 集合・受付（11 号館 204 教室）

10:00～10:30 開会式・内容説明（同上）

10:30～13:00 記念写真・キャンパス見学・実験・昼食

13:00～15:30 体験実験（学生実験室）

15:45～16:00 閉会のセレモニー

16:00 解散

各テーマとも事故等がなく、無事に終了した。アンケートを実施したところ、各テーマともほぼ満足という良好な結果であった。

第13回 高校教員のためのリカレント化学講座

主催：首都大学東京 理工学系 化学コース

実施日：2017年8月26日（土曜日）午前10:30～午後15:40

会場：首都大学東京・南大沢キャンパス 国際交流会館中会議室

世話人：西長 亨

プログラム

- | | |
|-------------|--------------------------------|
| 10:30-10:40 | はじめに（講座担当者の挨拶）西長 亨（本学・准教授） |
| 10:40-11:40 | 『分子生物学を化学の言葉で読み解く』三島正規（本学・准教授） |
| 11:40-13:00 | 昼食時間 |
| 13:00-14:00 | 『有機機能材料の歴史と今』西長 亨（本学・准教授） |
| 14:00-15:00 | 『有機物と磁石』藤田 渉（成蹊大学・教授） |
| 15:00-15:40 | 質疑応答など |

内容

第13回高校教員のためのリカレント化学講座を8月26日（土）に首都大学東京、南大沢キャンパスの国際交流会館で実施した。外部講師として藤田 渉先生（成蹊大学・教授）を迎え、本学から2名（三島、西長）の講師と合わせて計3件の講義が行われた。三島准教授は、高校化学でも重要であるタンパク質の構造の解説に加え、新薬の開発に関する最新のトピックスまで講演した。西長はアニリンから始まった色素の研究から最新の有機半導体への展開まで、高校の授業でも興味を持ってもらえるような話題も交えて講演した。藤田教授は、磁性の原理について易しく解説していただいた上で、有機分子や金属錯体を使った磁性研究の最新の話題までの講演を行っていただいた。開催日が例年より遅めであったことが影響したためか、高校教員の参加者は6名にとどまったが、講座の内容については概ね好評を頂けた。

平成29年度科学技術週間における東京都特別行事
「Tokyo ふしぎ祭エンス 2017」への体験化学実験の出展

1、開催概要

- (1) 行事名 平成29年度東京都科学技術週間特別行事
「Tokyo ふしぎ祭エンス 2017」
- (2) 日時 平成29年4月22日（土曜日）10:00～17:00
平成29年4月23日（日曜日）10:00～17:00
- (3) 会場 日本科学未来館（江東区青海2-3-6）
- (4) 目的 主に小・中学生をターゲットに、参加・体験型のイベントを通じて化学実験に関する理解と関心を深め、見て・触って・体験しながら、化学を楽しんで学んでいただくことを目的とする。
- (5) 内容 体験実験 ①風船スライムを作ろう
②入浴剤を作ろう
演示実験 マローブルーでpHを測ろう
- (6) 参加者 TMU-SFC（代表：古屋智博・化学コース3年）
- (7) 監督者 佐藤総一、松本淳

体験化学参加人数 4月22日 120人
4月23日 120人

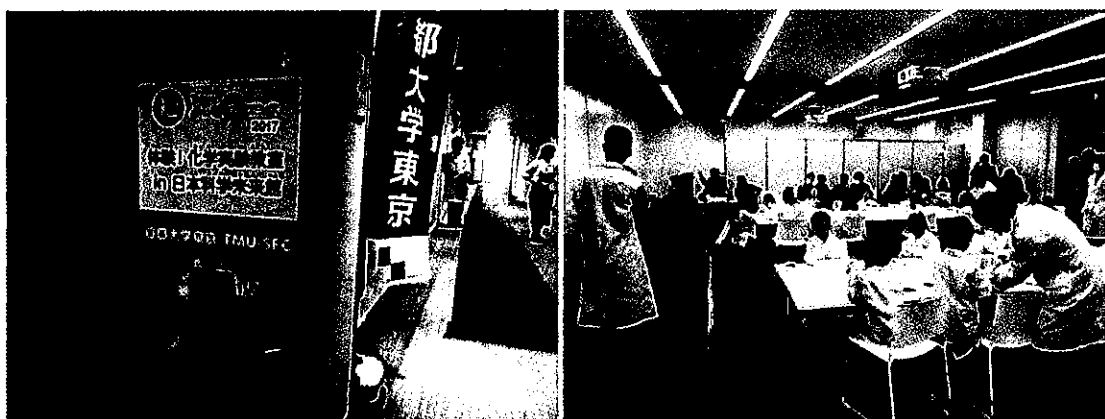
2、内容

2016年12月に本学の産学公連携センターから依頼を受け、上記の日程、場所にて、「Tokyo ふしぎ祭エンス 2017」に体験化学実験を出展することになった。科学技術週間における東京都特別行事への出展は、今回で10回目となる。

2017年4月22日、23日の両日、10:00～17:00の時間帯で子供向けの体験化学実験を行った。2日間で本イベントに携わったTMU-SFCメンバーは、総勢26名（OB、OG含む）で、2つの体験型メニュー「風船スライムを作ろう」と「入浴剤を作ろう」を実施した。体験型実験は1日に6回、各20名の参加者を受け入れた。年齢の低いところでは3歳の子供、上は高校生、社会人といったところまで幅広い年齢層の方が、化学実験を体験されていた。各回の参加者集めは、それぞれ整理券を発行することによって行ったが、昼過ぎにはすべての回の整理券が配布済みになる盛況ぶりであった。また演示実験も用意し、マローブルーに含まれるアントシアニンのpHによる構造変化による色の変化を利用した「マローブルーでpHを測ろう」について実際のpH変化による変色

具合の演示を行い、さらにそのメカニズムなどについて予め用意したスライド資料を用いて、モニターを見ていただきながら説明を行った。

初日の体験化学実験の様子は、4月22日（土）東京MXテレビの東京MX NEWS（18:00〜）で放映された。



文責：佐藤 総一

第二部

各研究分野活動状況

- I. 研究活動の概要
- II. 研究業績
 - 1. 原著論文
 - 2. 著書、総説等
 - 3. 学会発表、講演等

無機化学研究室

金属錯体は、多様な電子状態・スピン状態を有する金属イオンと、設計性に富んだ有機配位子とから構成されている。これらを組み合わせることにより、無機物や有機物のみでは現れない新たな性質・機能を発現する。私達の研究室では、生態関連物質であるポルフィリン金属錯体に注目し、これを利用した機能性物質の開拓を目指して研究を行っている。

- 1、多量化された金属ポルフィリン錯体の合成と機能評価
- 2、金属ポルフィリンの新しい官能基化反応の開発

I. 原著論文

1. "Synthesis, Optical Resolution, and Circularly Polarized Luminescence of an Axially Chiral Porphyrin Dimer", Risa Watanabe, Nobuyuki Hara, Yoshitane Imai, Masashi Hasegawa, Sumire Ishioka, Yasuhiro Mazaki, and Ken-ichi Sugiura, *Chemistry Select*, 3, 3576-3581, 2018.
(掲載紙の表紙に採択)
2. "Syntheses, structural characterization, and basic properties of unsymmetrically substituted biphenquinones", Ryotaro Fujii and Ken-ichi Sugiura, *Journal of Molecular Structure*, 1156, 559-563, 2018.
3. "Synthesis of Tetra(3-thienyl)biphenquinone and Its Charge Transfer Complex with Perylene", Ryotaro Fujii, Md. Awlad Hossain, Hisato Akimoto, Kazunori Hirabayashi, Toshio Shimizu, Kazuhiko Akiyama, Kenta Goto, Hiroyuki Nishikawa, Ken-ichi Yamashita, and Ken-ichi Sugiura, *Asian Journal of Organic Chemistry*, 7(1), 171-178, 2018.
4. "An Alternative Synthesis of Bipyrenol: High-Yield Oxidative Coupling Reaction of Pyrene Derivative with $\text{Cu}(\text{BF}_4)_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ", Subas Rajbangshi and Ken-ichi Sugiura, *Synthesis*, 49(14), 3145-3148, 2017.
5. "Thiophene-Fused Dinaphthopentaphenes: Versatile Applications of 1,2-Bis(pyren-2-yl)aromatics in the Synthesis of π -Expanded Molecules", Md. Awlad Hossain, Ken-ichi Yamashita, Kazunori Hirabayashi, Toshio Shimizu, Kenta Goto, and Ken-ichi Sugiura, *Chemistry Select*, 2(16), 4342-4347, 2017.
(DOI: 10.1002/slct.201700152)
6. "meso-Bis(pyren-2-yl)porphyrin: An Isomer of Pyrene-Substituted Porphyrins and its Basic Photophysical Properties", Shohei Tomita, Kazunori Hirabayashi,

Toshio Shimizu, Kenta Goto, and Ken-ichi Sugiura,* *Synthesis*, 49(10), 2182-2186, 2017.

(DOI: 10.1055/s-0036-1588715)

II. 著書、総説等

なし

III. 学会発表、講演等

1. An Alternate Synthesis of Bipyrenol: A High-Yielded Oxidative Coupling Reaction of A Pyrene Derivative with $\text{Cu}(\text{BF}_4)_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
Subas Rajbangshi and Ken-ichi Sugiura
有機合成化学協会、第73回有機合成化学協会関東支部シンポジウム・目白シンポジウム
平成29年5月20日 (土)
東京都・学習院大学 目白キャンパス
2. 軸不斉ビペリレン類の合成と光学的性質
杉浦健一、藤巻圭介、今井喜胤、五島健太
第111回有機合成シンポジウム
平成29年6月8日(木)～9日(金)
岡山県・岡山大学 (津島キャンパス) 創立五十周年記念館
3. π -Expanded Biaryls and Their Photophysical Properties
Sugiura, K -i and Imai, Y
18th Tetrahedron Symposium - Asia Edition
平成29年7月24日 (月)～26日 (水)
オーストラリア、メルボルン市
4. 立体化学が制御されたピレンオリゴマーの合成研究
杉浦健一、シューバス・ラズボングシー
第28回基礎有機化学討論会 (第47回構造有機化学討論会・第67回有機反応化学討論会)
平成29年9月7日(木)～9日(土)
福岡市・九州大学・伊都キャンパス
5. [5]ヘリセン骨格を有するベンゾジナフトペンタフェンの化学修飾と分光学的性質
高希蓮・五島健太・杉浦健一
第44回有機典型元素化学討論会
平成29年12月7日 (木)～9日 (土)

東京都・東京工業大学 デジタル多目的ホール・くらまえホール

6. 軸不斉を有するポルフィリン二量体の合成と分光学的性質
渡辺理紗・長谷川真士・石岡すみれ・真崎康 博・原伸行・今井喜胤・杉浦 健一
第44回有機典型元素化学討論会
平成29年12月7日（木）～9日（土）
東京都・東京工業大学 デジタル多目的ホール・くらまえホール
7. ピレン四量体の合成と分光学的性質
ラズボングシー シューバス・奥田晃史・今井喜胤・杉浦 健一
第44回有機典型元素化学討論会
平成29年12月7日（木）～9日（土）
東京都・東京工業大学 デジタル多目的ホール・くらまえホール
8. メントール炭酸エステルを有したピレンの 立体選択的多量化反応
杉浦健一、シューバス・ラズボングシー
第112回有機合成シンポジウム
平成29年12月6日（水）～7日（木）
東京都・早稲田大学・国際会議場
9. pai-Expanded biaryls and their photophysical properties
Ken-ichi Sugiura
International Conference on Recent Advances in Mathematical and Physical Sciences
平成30年1月27日（土）～29日（月）
バングラデシュ人民共和国、ダッカ市
10. 光学活性ビアリアルに関する最近の成果
杉浦健一
第二回キララルミネセンスセミナー
平成30年3月14日（水）
大阪府・近畿大学
11. ビアントラセノールの簡便な光学分割法、及びその誘導体のキロプティカル特性
秋元宣人、今井喜胤、杉浦健一
日本化学会・第98回春季年会
平成30年3月20日（火）～23日（金）
千葉県・日本大学船橋キャンパス
12. 軸不斉ポルフィリン二量体の合成と二座配位子を用いた分光学的性質の制御

渡辺理紗、原伸行、今井喜胤、長 谷川真士、杉浦健一

日本化学会・第98回春季年会

平成30年3月20日（火）～23日（金） 千葉県・日本大学船橋キャンパス

13. 光学活性ビピレン発光体による円偏光発光
高村健也・楫 大輝・Rajbangshi Subas・味村 優輝・杉浦健一・今井喜胤
日本化学会・第98回春季年会
平成30年3月20日（火）～23日（金）
千葉県・日本大学船橋キャンパス

14. Syntheses of Structurally Well-defined Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by One Pot Cascade Reaction of the Suzuki-Miyaura and the MizorokiHeck Coupling Reactions
HOSSAIN, Md. Awlad; HASEGAWA, Masashi; SUGIURA, Ken-ichi
日本化学会・第98回春季年会
平成30年3月20日（火）～23日（金）
千葉県・日本大学船橋キャンパス

15. BINOL coordinated Tin(IV) Porphyrins RAHMAN, Md Moshir; SUGIURA, Ken-ichi
日本化学会・第98回春季年会
平成30年3月20日（火）～23日（金）
千葉県・日本大学船橋キャンパス

環境・地球化学研究室

<大気化学に関する研究>

大気中に微粒子が浮遊している系をエアロゾルという。エアロゾル粒子の大きさは数 nm から 100 μm 程度まで広範囲に及び、その化学組成は多種多様である。近年社会的な関心を集めている PM_{2.5} もその一部である。エアロゾルは大気汚染物質であると同時に、太陽光を遮ることで大気の放射収支すなわち気候変動にも大きな影響を及ぼす。しかしながら、その効果は複雑であり不確実性が非常に大きい。

エアロゾルの粒径や組成は、新粒子生成、凝集、凝縮などのプロセスによって時々刻々変化しており、その動態解明のためにはエアロゾルをリアルタイムで計測することが必要となる。本研究室では、レーザーや質量分析計を用いた実時間エアロゾル計測装置の開発、およびフィールド観測に基づくエアロゾル生成過程の解明を主な研究目的としている。現在は、主に以下の課題に取り組んでいる。

(1) 二次エアロゾル生成過程に関する研究

大気中に粒子として直接排出される一次エアロゾルだけでなく、気体成分の光化学反応によって生成される二次エアロゾルが重要である。東京などの大都市であっても、アジア広域の二次生成の影響を強く受けることがある。研究室において独自に開発してきたエアロゾル複合分析装置を用いて大気観測を実施し、広域における二次生成の寄与率を明らかにすることを目指している。これまでに韓国および台湾における大気観測を実施しており、エアロゾルの濃度や混合状態の変動メカニズムについて解析を行っている。

(2) ナノ粒子組成分析計の新規開発

エアロゾル数濃度を決める要因として、化石燃料の燃焼などの一次粒子排出と硫酸クラスターを核とした新粒子生成が重要と考えられているが、その相対的な寄与率は分かっていない。ナノ粒子を効率的に捕集し、その化学組成を実時間計測するための新しい分析技術の開発を行っている。特に、高感度化において鍵となるナノ粒子用エアロダイナミックレンズの開発を重点的に行っている。また、ナノ粒子分析計の校正に用いるための粒子発生技術の開発にも取り組んでいる。

(3) 硫酸濃度測定装置の新規開発

硫酸クラスターを核とした新粒子生成には大気中の硫酸濃度が大きく関わっている。現在、大気中の硫酸濃度を測定可能な唯一の装置は化学イオン化質量分析計 (CIMS) である。北米やヨーロッパではこの装置を用いて硫酸濃度の測定が行われているものの、アジアでは硫酸濃度の測定が行われた例が非常に少ない。アジアでは硫酸の前駆物質である二酸化硫黄の排出量が多く、硫酸を中心とした新粒子生成の重要性がより高いと考えられる。この仮説の検証を目的として、硫酸濃度測定用 CIMS の開発を行っている。

I. 原著論文

Yuemeng Ji, Jun Zhao, Hajime Terazono, Kentaro Misawa, Nicholas Levitt, Yixin Li, Yun Lin, Jianfei Peng, Yuan Wang, Lian Duan, Bowen Pan, Fang Zhang, Xidan Feng, Taicheng An, Wilmarie Marrero-Ortiz, Jeremiah Secrest, Annie Zhang, Kazuhiko Shibuya,

Mario Molina, and Renyi Zhang, Reassessing the atmospheric oxidation mechanism of toluene, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America (PNAS), 114, 8169–8174, (2017).

II. 著書、総説等

竹川 暢之, 高見 昭憲, エアロゾル学基礎講座 - 計測 - 4. エアロゾル成分分析の概要, エアロゾル研究, 32, 118–124, 2017.

III. 学会発表、講演等

01. A. Yoshino, A. Takami, K. Miwawa, M. Hayashi, K. Hara, C. Nishita, N. Kaneyasu, T. Seto and S. Hatakeyama, Analysis of Aerosol Chemical Composition Measured at Urban and Rural Sites in Japan, ICNAA 2017 (2017年6月, Helsinki, Finland)

02. 内田 健斗, 竹川 暢之, 熱脱離型エアロゾル質量分析計における粒子成分の熱分解とイオン化に関する研究, 第34回エアロゾル科学・技術研究討論会 (2017年8月, 芝浦工業大学, 東京)

03. 吉野彩子, 高見昭憲, 三澤健太郎, 小島知子, 原圭一郎, 西田千春, 林政彦, 兼保直樹, 島山史郎, 山本重一, 鶴野伊津志, 福岡および熊本における大気中微小粒子状物質の化学成分の観測, 第58回大気環境学会年会 (2017年9月, 兵庫医科大学, 神戸)

04. 櫻井 萌, 藤野 竜也, 有機構造体をマトリクスに使用した MALDI-MS 測定, 日本分析化学会第66年会 (2017年9月, 東京理科大学, 東京)

05. 藤井 洋佑, 梅沢 太一, 秋元 隆文, 藤野 竜也, 酸化鉄ナノ粒子を用いた MALDI 法における清涼飲料水中発がん性物質の検出, 日本分析化学会第66年会 (2017年9月, 東京理科大学, 東京)

06. T. Fujita, K. Shibamoto, and M. Haruta, Effects of calcination temperature and atmosphere on Au/ZnO catalyst for CO oxidation, DICP-TMU Joint Symposium on Gold Catalysis Research (2017年9月, 中国)

07. 内田 健斗, 井手 佑, 竹川 暢之, 熱脱離型エアロゾル質量分析計におけるイオン化効率の分子量依存性, 第23回大気化学討論会 (2017年10月, 高松)

08. 村上 功一, 中澤 優太, 大竹 啓記, 竹川 暢之, ナノ粒子組成分析計の開発と初期性能評価, 第23回大気化学討論会 (2017年10, 高松)

09. Cuizhi Sun, and Nobuyuki Takegawa, Calibration of the Laser Induced Incandescence-Mass Spectrometric Analyzer (LII-MS) Using Polydisperse Aerosol Particles, AAAR 36th Annual Conference (2017年10月, Raleigh, North Carolina, USA)

IV. その他

宇宙化学研究室

当研究室は、100 原子程度以下の原子で構成された金属・金属酸化物クラスターを新規に合成し、デバイス材料や環境調和型触媒の開発を行っている。また、放射光や放射化分析法を用いて機能性材料だけでなく宇宙・地球物質の分析に関する研究も行っている。以下に主な研究内容について具体的に記す。

<高分子保護金クラスターへの一原子ドーピングと水素化触媒性能の発現>

ポリビニルピロリドン (PVP) で保護された平均粒径 1.2 nm の金クラスター (Au:PVP) は、酸素分子を酸化剤とする酸化反応に対して高い活性を示すが、水素化に対してはほとんど活性を示さない。本研究では水素に対して親和性の高い金属元素 M (Pd, Rh) を 1 原子だけドーピングした合金クラスター (AuM:PVP) を合成し、水素化反応に対する触媒性能を調べた。Au:PVP, AuM:PVP 共に紫外可視光吸収スペクトルに表面局在プラズモン共鳴 (LSPR) に由来するピークが現れなかったことから、粒径 2 nm 以上のクラスターが含まれていないことがわかった。TEM 観察によって Au:PVP、AuPd:PVP、AuRh:PVP の平均粒径をそれぞれ 1.2 ± 0.2 , 1.1 ± 0.3 , 1.3 ± 0.3 nm と決定した。これらの結果は異種金属を添加しても金属クラスターの平均粒径は保たれていることを示している。Au:PVP と AuM:PVP の MALDI 質量スペクトルから、Au:PVP では Au_n^+ が観測されたのに対し AuM:PVP では M が 1 原子ドーピングされた $Au_nM_1^+$ のみが観測された。脱離イオン化用のレーザー強度を抑えて質量スペクトルを測定したところ、 $Au_3Pd_1^+$ 及び $Au_3Rh_1^+$ が魔法数クラスターとして検出された。また、Pd-K 殻及び Rh-K 殻吸収端微細構造解析によってドーピング原子 M が共にクラスター表面に露出していることを明らかにした。1-ドデセン、スチレン、シクロオクテンの不飽和炭素結合の水素化に対して、Au:PVP が触媒活性を示さなかったのに対して AuM:PVP は触媒活性を示した (Table 2)。この結果は、金クラスターに対して Pd あるいは Rh を 1 原子ドーピングするだけで水素化触媒活性を付与できることを示している。さらに AuRh:PVP と AuPd:PVP を比較したところ、後者が顕著に高い活性を示した。この結果は、金クラスター上で Rh 原子が Pd に比べてより配位不飽和な環境にあることと矛盾しない。

<金属酸化物クラスターによる二酸化炭素固定化反応>

5 族の多価アニオン金属酸化物クラスターの酸素原子が高い電子密度を反映して塩基触媒として機能するという仮説に基づいて、ニオブおよびタンタルを構成元素とする金属酸化物クラスターの塩基触媒性能を調べた。エポキシドを基質とする二酸化炭素固定化反応をモデル反応とし、共通した Lindqvist 構造のポリ酸 $[M_6O_{19}]^{n-}$ ($n = 8, M = Nb, Ta; n = 2, M = Mo, W$) のルイス塩基触媒作用を比較した。また、 $[Ta_6O_{19}]^{8-}$ について、種々の基質に対する CO₂ 固定化反応に対する触媒性能を評価した。ポリ酸の表面酸素原子は局所的な負電荷量が多いほどより優れた塩基触媒となると考えられる。そこで、NBO 解析により、5 族元素 (Nb, Ta) および 6 族元素 (Mo, W) からなる Lindqvist 型ポリ酸 $[M_6O_{19}]^{n-}$ の表面酸素原子の局所負電荷量を調べた。表面酸素原子の平均的な負電荷量は $Ta > Nb > W > Mo$ の順に多くなった。この結果は、5 族ポリ酸が塩基触媒として有望であり、特にヘキサタンタル酸 $[M_6O_{19}]^{8-}$ が優れた塩基触媒として機能する可能性を示唆している。合成した 4 種類の $[M_6O_{19}]^{n-}$ の TBA 塩の組成は元素分析から決定し、**TBATa₆** および **TBANb₆** については部分的にプロトン化されていることがわかった。4 種類の $[M_6O_{19}]^{n-}$ を触媒として、SO を基質とする CO₂ 固定化反応を行った。反応の経時変化に基づき、反応が SO の濃度に対して 1 次で進行するとして見積もった反応速度定数を表面酸素原子の局所負電荷量の平均値に対してプロットしたところ、6 族ポリ酸は活性を示さず、活性の序列はいずれの反応でも

Ta>Nb>>Mo, W となった。この反応性の違いは、表面酸素原子の局所負電荷量の序列によって説明できる。本実験で用いたポリ酸は共通した構造を有するため、5 族ポリ酸の高い塩基触媒活性の起源は、表面酸素原子の高い局所負電荷量に由来すると考えるのが妥当である。この反応の律速段階は吸着した CO₂ によるエポキシドへの求核攻撃であり、表面酸素原子の高い負電荷量が吸着した CO₂ の求核性の向上につながると考えられる。

<XAFS 解析ソフト“xTunes”の開発>

現在、Atena や Rex といった X 線吸収分光スペクトル (XAFS スペクトル) を解析するソフトが存在するが、新しい OS への対応が不十分であることから、これらに代わる新しい解析ソフトが必要である。そこで、測定した XAFS スペクトルから XANES や EXAFS の抽出だけでなく、XANES のピーク分離や FT-EXAFS のカーブフィッティングが可能なソフトの開発を行った。単に解析ソフトを開発するだけでなく、元素戦略で進めている in-situ 測定で定期的に測定されるデータをその場で解析できるようにするために、特定のフォルダーを監視し、新しく保存されたデータを自動で解析する“ウォッチ機能”の開発も行った。開発した X 線吸収分光スペクトル解析用のソフト“xTunes”はスペクトルを同時に表示できるインターフェイスがあり、その中の任意の XAFS スペクトルに対して、バックグラウンド除去、吸収端エネルギー (E₀) の決定、規格化、EXAFS の抽出、FT-EXAFS への変換、カーブフィッティング機能が実装されている。バックグラウンド除去では Victoreen の式、McMaster の式、一次式を選択可能である。E₀ の決定では吸収端の変曲点が自動で選択されるようになっているが、任意の場所に決定することも可能である。EXAFS の抽出では Cook&Sayers の式、Cubic spline、一次式を選択可能である。抽出した EXAFS 振動は任意の範囲でフーリエ変換が可能である。カーブフィッティングではフィッティングするための後方散乱関数や位相シフトの関数が必要である。本ソフトはこうしたフィッティングに必要なパラメータを FEFF8.5L を使って計算できるようになっている。XANES スペクトルの解析については、標準サンプルの XANES スペクトルを使ったパターンフィッティングや関数を使ったピークフィッティング (ガウス関数、ローレンツ関数、フォークト関数、Arctangent 関数) が可能になっている。EXAFS の解析については種々のサンプルのスペクトル (クイックスキャンモードで測定した Au フォイル、ステップスキャンモードで測定した Au フォイル、SSD 検出器を用いて測定したカーボン担持金粒子等) で解析を行い、動作を確認した。さらに、本プログラムに“ウォッチ機能”を実装した。これは特定のフォルダーを監視し、オペランド測定中に測定されたデータがそのフォルダー内に保存されると自動でデータを読み込むだけでなく、解析済みのデータのパラメータを使ってスペクトルの自動解析を行う。さらに自動解析された XANES スペクトルの任意のエネルギーにおけるピーク強度をプロットする機能も搭載しており、オペランド測定中に試料の状態変化 (配位対称性、電子状態) を知ることが可能である。

<隕石中の宇宙線生成放射性核種に関する研究>

隕石中には宇宙線との核反応により生成した長寿命放射性核種が含まれており、これらは、加速器質量分析 (AMS) 法で測定されることが多い。2016 年に筑波大学のタンデム加速器が東日本大震災被害から復旧し、日本で初めて ⁴¹Ca (半減期 10.4 万年) が AMS 法により測定可能となった。そこで、昨年度に鉄隕石からの Ca の化学分離法を検討するとともに、⁴¹Ca の AMS 法による定量を試みた。本年度は石質隕石中の ⁴¹Ca の定量を試みた。放射性トレーサを用いて、石質隕石から Ca を化学収率よく分離する条件を調べた。特に、AMS 測定で妨害となるカリウム (⁴¹K) との分離に注意を払った。Gao 隕石と Dhajala 隕石に適用し、筑波大学の AMS 装置にて ⁴¹Ca を検出できた。⁴¹K も検出されたが、⁴¹Ca の測定を妨害しない程度に

化学分離されていたことがわかった。

<福島原発事故により環境中に放出された放射性核種に関する研究>

福島原発事故により大量の放射性核種が環境中に放出された。多くの自治体、研究者により様々の環境試料中のこれら放射性核種濃度が報告されているが、事故当時の特に福島県内の大気中放射性核種濃度は測定されなかった。我々は、自治体が運用している自動大気浮遊粒子(SPM)測定装置に着目し、事故当時のSPMが捕集されたる紙の分析を続けている。 ^{134}Cs と ^{137}Cs をガンマ線スペクトロメトリーで、また、 ^{129}I をAMS法で、ルーチンの定量を行なった。 ^{129}I の定量は福島県で捕集されたSPMを中心に行ったが、原発事故当時の短半減期放射性ヨウ素同位体 ^{131}I の濃度推定のための基礎的なデータを取得することができた。

<宇宙・地球化学的試料中の微量元素の存在度に関する研究>

隕石は今から45~46億年前に、他の太陽系物質と同時に作られたものであり、その後の変成作用をほとんど、あるいは全く経験していないために、太陽系初期の形成や変遷の環境を知る上で、研究対象となりうる唯一の物質である。本年度は、Rコンドライト隕石について、化学的特徴を詳細に調べた。Rコンドライト隕石は、鉱物学的・化学的組成は他のコンドライトグループである普通コンドライト隕石と類似しているが、Rコンドライト隕石の酸化還元状態は普通コンドライト隕石と異なる。そこで、Rコンドライト隕石中の希土類元素及びTh, Uの鉱物相間の分布を明らかにし、その結果をもとにRコンドライト隕石と普通コンドライトの酸化還元状態の違いを調べ、Rコンドライト母天体での変成作用について考察した。

Rコンドライト隕石のCa-リン酸塩鉱物は、LaやCeのような軽希土類元素に富んでおり、Euの負の異常が見られた。普通コンドライト隕石のCa-リン酸塩鉱物でも同じような特徴は報告されているが、Rコンドライト隕石でのCa-リン酸塩鉱物の希土類元素濃度は高く、Euの負の異常は小さかった。これらの結果より、Rコンドライト隕石中の希土類元素は、複数の段階を経てCa-リン酸塩鉱物に分布された、あるいは希土類元素の分配係数が異なるような環境で分配されたと考えられ、Rコンドライト隕石と普通コンドライト隕石のCa-リン酸塩鉱物での程度の異なるEuの負の異常は、Ca-リン酸塩鉱物が形成される変成過程での酸素 fugacity の違いによるものと考えられる。よって、Rコンドライト隕石母天体での変成過程は、普通コンドライト隕石母天体より酸化的環境下で起こったと結論付けた。

<誘導結合プラズマ質量分析法による地球化学的試料中の白金族元素の定量>

白金族元素(Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt)濃度を求めることにより、微惑星から惑星に至る形成過程を明らかにすることが可能である。これまでのマントル由来の岩石の分析により、火成活動では、Os, Ir, Ruは適合元素として、Rh, Pd, Ptは不適合元素として振舞うことがわかり、クロム鉄鉱が白金族元素の挙動に重要な役割を果たしていると考えられている。溶液化が必須である誘導結合プラズマ質量分析法を用いて、高確度な定量値を得るためには、クロム鉄鉱を完全に溶かす必要がある。そこで、同位体希釈法、NiS-fire assay法と誘導結合プラズマ質量分析装置を組み合わせた方法で、カナダとアメリカの研究機関が発行している地球化学的標準岩石試料の分析を行い、クロム鉄鉱が完全に溶解されているのか検証した。

得られた白金族元素濃度は、これまでに報告された値とよい一致を示したが、Ruの値は、一部の報告値を除き高かった。これまでの報告値は、主に逆王水を用いた分解方法が行われているが、なかには逆王水にフッ酸を組み合わせた分解方法も用いられていた。フッ酸を用いた分解方法で得られたRu濃度は、逆王水だけ用いた分解方法より高く、より岩石試

料を溶解できていると考えられている。本研究で得られた Ru 濃度は、逆王水にフッ酸を組み合わせた分解方法で得られた値と一致しており、本研究で用いた方法でもクロム鉄鉱を含む岩石を完全に溶解することが可能であることを示した。

I. 原著論文

01. K. Nomura, M. Oshima, T. Mitsudome, H. Harakawa, P. Hao, K. Tsutsumi, G. Nagai, T. Ina, H. Takaya, W-H. Sun, S. Yamazoe
"Synthesis, Structural Analysis of (Imido)vanadium Dichloride Complexes Containing 2-(2'-Benz-imidazolyl)pyridine Ligands: Effect of Al Cocatalyst for Efficient Ethylene (Co)polymerization"
ACS Omega, 2 8660-8673 (2017)
02. K. Hirata, K. Yamashita, S. Muramatsu, S. Takano, K. Ohshimo, T. Azuma, R. Nakanishi, T. Nagata, S. Yamazoe, K. Koyasu, and T. Tsukuda
"Anion Photoelectron Spectroscopy of Free $[\text{Au}_{25}(\text{SC}_{12}\text{H}_{25})_{18}]^{-}$ "
Nanoscale, 9 13409-13412 (2017).
03. S. Yamazoe, S. Matsuo, S. Muramatsu, S. Takano, K. Nitta, and T. Tsukuda
"Suppressing Isomerization of Phosphine-Protected Au_9 Cluster by Bond Stiffening Induced by Single Pd Atom Substitution"
Inorg. Chem., 56, 8319-8325 (2017).
04. S. Hayashi, S. Yamazoe, K. Koyasu, and T. Tsukuda
"Lewis Base Catalytic Properties of $[\text{Nb}_{10}\text{O}_{28}]^{6-}$ for CO_2 Fixation to Epoxide: Kinetic and Theoretical Studies"
Chem. Asian J., 12, 1635-1640 (2017).
05. R. Ishida, S. Hayashi, S. Yamazoe, K. Kato, and T. Tsukuda
"Hydrogen-Mediated Electron Doping of Gold Clusters as Revealed by In Situ X-ray and UV-Vis Absorption Spectroscopy"
J. Phys. Chem. Lett., 8, 2368-2372 (2017)
06. R. Takahata, S. Yamazoe, K. Koyasu, and T. Tsukuda
"Structural model of ultrathin gold nanorods based on high-resolution transmission electron microscopy: Twinned 1D oligomers of cuboctahedrons"
J. Phys. Chem. C, 121, 10942-10947 (2017).
07. H. Yamamoto, P. Maity, R. Takahata, S. Yamazoe, K. Koyasu, W. Kurashige, Y. Negishi and T. Tsukuda
"Monodisperse Iridium Clusters Protected by Phenylacetylene: Implication for Size-Dependent Evolution of Binding Sites"
J. Phys. Chem. C, 121, 10936-10941 (2017).

08. S. Takano, S. Yamazoe, and T. Tsukuda
"A gold superatom with 10 electrons in $\text{Au}_{13}(\text{PPh}_3)_8(\text{p-SC}_6\text{H}_4\text{CO}_2\text{H})_3$ "
APL Mater., 5, 053402 (2017)
09. K. Nomura, T. Mitsudome, A. Igarashi, G. Nagai, K. Tsutsumi, T. Ina, T. Omiya, H. Takaya, and S. Yamazoe
"Synthesis of (adamantylimido)vanadium(V) dimethyl complex containing (2-amididomethyl)pyridine ligand and selected reactions: Exploring the oxidation state of the catalytically active species in ethylene dimerization"
Organometallics, 36, 530-542 (2017).
10. T. Nakajima, S. Misawa, Y. Morino, H. Tsuruta, D. Goto, J. Uchida, T. Takemura, T. Ohara, Y. Oura, M. Ebihara, M. Satoh.
"Model depiction of the atmospheric flows of radioactive cesium emitted from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station accident."
Progress in Earth and Planetary Science, 4, 2 (2017).
11. 鶴田 治雄, 大浦 泰嗣, 海老原 充, 森口 祐一, 大原 利眞, 中島 映至
「東電福島第一原子力発電所事故直後の東日本における放射性セシウムの時空間分布—大気環境常時測定局のSPM計の使用済みテープろ紙分析データの解析—」
エアロゾル研究 32, 224-254 (2017)
12. V. D. Cao, R. Sucgang, T. Q. Tran, D. V. Ho, N. Shirai, M. Ebihara.
"Measurements of rare earth element and other element mass fractions in environmental reference materials (NIST SRM 1646a, NIST SRM 1400, IAEA-395 and IAEA-450) by INAA, ICP-AES and ICP-MS."
Geostandards and Geoanalytical Research, 41, 303-315 (2017).
13. G. Komatsu, J. Ormo, T. Bayaraa, T. Arai, K. Nagao, Y. Hidaka, N. Shirai, M. Ebihara, C. Alwark, L. Gereltsetseg, S. Tserendug, K. Goto, T. Matsui, S. Demberel.
"Further evidence for an impact origin of the Tsenkher structure in the Gobi-Altai, Mongolia: geology of a 3.7 km crater with a well-preserved ejecta blanket."
Geological Magazine, doi:10.1017/s0016756817000620 (2017).
14. A. Yamaguchi, N. Shirai, C. Okamoto, M. Ebihara.
"Petrogenesis of the EET 92023 achondrite and implications for early impact events."
Meteoritics & Planetary Science, 52, 709-721 (2017).

II. 著書、総説等

01. S. Yamazoe, T. Tsukuda
"Structural Stability Originating from Hierarchy of Bond Stiffness in

Thiolate-protected Gold Clusters”

SPRING-8/SACLA Research Frontiers 2016, 74-75 (2017).

02. 山添誠司, 石田瞭, 佃達哉

「水素の脱吸着による金クラスターの電子状態の可逆的変化」

C&I Commun, 42, 8-9 (2017).

03. 鶴田治雄, 大浦泰嗣, 海老原充, 森口祐一, 大原利眞, 中島映至

「東電福島第一原子力発電所近傍の2地点における事故直後の大気中放射性セシウムの経時変化」

Proceedings of the 18th Workshop on Environmental Radioactivity, 56-63 (2017)

III. 学会発表、講演等

01. H. Tsuruta, Y. Oura, M. Ebihara, T. Ohara, Y. Moriguchi, and T. Nakajima

“Comprehensive Analysis of Atmospheric Radionuclides just after the Fukushima Accident”

European Geosciences Union General Assembly 2017 (2017.4, ウイーン)

02. T. Nakajima, D. Goto, Yu Morino, S. Misawa, H. Tsuruta, J. Uchida, T. Takemura, T. Ohara, Y. Oura, M. Ebihara, and M. Satoh

“Model simulations of the radioactive material plumes in the Fukushima nuclear power station accident”

European Geosciences Union General Assembly 2017 (2017.4, ウイーン)

03. 高畑遼, 山添誠司, 小安喜一郎, 佃達哉

「透過型電子顕微鏡を用いた極細金ナノロッドの結晶構造の統計的な解析」
ナノ学会第15回大会 (2017.5, 北海道)

04. 石田瞭, 山添誠司, 林峻, 佃達哉

「水素吸脱着によるPVP保護金クラスターの電子構造の可逆的変調」
ナノ学会第15回大会 (2017.5, 北海道)

05. 山添誠司

「サイズ・組成を精密制御した金属クラスター触媒の合成とその触媒作用」
触媒学会若手会「第28回フレッシュマンゼミナール」 (2017.5, 東京)

06. 鶴田 治雄, 大浦 泰嗣, 海老原 充, 大原 利眞, 森口 祐一, 中島 映至

「福島第一原発近傍の2地点におけるSPM計使用済みテープろ紙の分析による放射性核種の動態」

日本地球惑星科学連合大会 (2017.5, 幕張)

07. 小野崎 晴佳、小野 貴大、飯澤 勇信、阿部 善也、中井 泉、足立 光司、五十嵐 康人、大浦 泰 嗣、海老原 充、宮坂 貴文、中村 尚、鶴田 治雄、森口 祐一
「SPM テープ濾紙より分離された放射性エアロゾルの放射光 X 線複合分析による化学・物理的性状解明」
日本地球惑星科学連合大会 (2017.5, 幕張)
08. 北山 響、森野 悠、滝川 雅之、中島 映至、速水 洋、永井 晴康、寺田 宏明、斉藤 和雄、新堀 敏基、梶野 瑞王、関山 剛、Didier Damien、Mathieu Anne、大原 利眞、鶴田 治雄、大浦 泰 嗣、海老原 充、柴田 徳思
「大気モデル相互比較に基づく福島第一原発事故起源の ^{137}Cs の動態解析」
日本地球惑星科学連合大会 (2017.5, 幕張)
09. Akira Yamaguchi, Naoki Shirai
“Petrogic evidence for early impact events inferred from differentiated achondrites”
日本地球惑星科学連合大会 (2017.5, 幕張)
10. 森野悠, 北山響, 滝川雅之, 中島映至, 速水洋, 永井晴康, 寺田宏明, 斉藤和雄, 新堀敏基, 梶野瑞王, 関山剛, Damien Didier, Anne Mathieu, 大原利眞, 鶴田治雄, 海老原充, 大浦泰嗣, 柴田徳思
「大気モデル相互比較に基づく福島原発事故起源の ^{137}Cs の動態解析」
気象学会 2017 年度春季大会 (2017.5, 東京)
11. 山添誠司
「金属クラスター触媒の精密合成とその触媒作用」
平成 29 年度触媒学会ファインケミカルズ合成触媒セミナー (2017.6, 大阪) .
12. 海老原充、大浦泰嗣、白井直樹、鶴田治雄、森口祐一、永川栄泰、櫻井昇、羽場宏光、松崎浩之
「福島第一原発事故直後に採取された大気浮遊粒子中の放射性核種の測定方法の開発と総合解析(その2):放射性ヨウ素(I- 129)の定量」
第54回アイソトープ・放射線研究発表会 (2017.7, 東京)
13. 鶴田治雄、大浦泰嗣、海老原充、白井直樹、松崎浩之、大原利眞、森口祐一、中島映至
「福島第一原発事故直後に採取された大気浮遊粒子中の放射性核種の測定方法の開発と総合解析(その3):放射性セシウム と放射性ヨウ素の大気中での動態」
第 54 回アイソトープ・放射線研究発表会 (2017.7, 東京)
14. 森口祐一、鶴田治雄、海老原充、大浦泰嗣、白井直樹、五藤大輔、高木麻衣、中山祥嗣、森野悠、大原利眞、中島映至
「I-129 測定による事故後初期の大気中 I-131 濃度の再現と吸入被ばくの推計」
日本放射線影響学会第 60 回大会 (2017.7, 千葉)
15. Ryo Ishida, Shun Hayashi, Seiji Yamazoe, Kazuo Kato and Tatsuya Tsukuda

“Hydrogen-Mediated Electron Doping of Gold Clusters As Revealed by In Situ X-ray and UV-vis Absorption Spectroscopy”

第15回触媒化学ワークショップ (2017.7, 富山県)

16. Shun Hayashi, Seiji Yamazoe, Kiichiro Koyasu and Tatsuya Tsukuda
“Base Catalytic Activity of Decaniobate Cluster $[\text{Nb}_{10}\text{O}_{28}]^{6-}$ ”
第15回触媒化学ワークショップ (2017.7, 富山県)
17. Naoto Sasaki, Shun Hayashi, Seiji Yamazoe and Tatsuya Tsukuda
“Base Catalytic Activity of Hexatantalate”
第15回触媒化学ワークショップ (2017.7, 富山県)
18. M. Ebihara, Y. Oura, N. Shirai, Y. Nagakawa, N. Sakurai, H. Haba, H. Matsuzaki, H. Tsuruta, Y. Moriguchi
“A new approach for reconstructing the ^{131}I -spreading triggered by the FDNPS accident in 2011”
Goldschmidt2017 (2017.8, パリ)
19. Y. Oura, M. Ebihara, N. Shirai, H. Tsuruta, T. Nakajima, Y. Moriguchi, T. Ohara, Y. Nagakawa, N. Sakurai, H. Haba and H. Matsuzaki
“ $^{129}\text{I}/^{137}\text{Cs}$ ratios for atmospheric particular matters collected just after TEPCO FDNPP accident”
Goldschmidt2017 (2017.8, パリ)
20. 白井直樹, 海老原充
「ナクライトの化学組成の特徴：ナクライトの形成場への知見」
2017年度日本地球化学会 (2017.9, 東京)
21. 白井直樹, 日高義浩, 山口亮, 海老原充
「レーザーアブレーションと溶液による ICP-MS 法を用いた NIST SRM 610 と 612 の親鉄性元素と親銅性元素の定量」
2017年度日本地球化学会 (2017.9, 東京)
22. 前田凌雅, 白井直樹, 山口亮, 海老原充
「希土類元素及び Th, U の分布に基づく R コンドライト母天体での形成過程・変成作用」
2017年度日本地球化学会 (2017.9, 東京)
23. 山口亮, 白井直樹, J.-A. Barrat
「ユークライトに類似したエコンドライトの形成過程」
2017年度日本地球化学会 (2017.9, 東京)
24. Genevieve Hublet, Akira Yamaguchi, Naoki Shirai, Makoto Kimura
“Geochemical study of type 3 ordinary chondrites”
2017年度日本地球化学会 (2017.9, 東京)

25. 大浦泰嗣, 寺岬仁志, 山口優貴, 池田瞳, 黒岩憲明, 遠藤勇, 三浦義隆, 田中義久
「光量子放射化分析のための光核反応収率の測定」
2017日本放射化学会年会・第61回放射化学討論会 (2017.9, つくば)
26. 林峻, 石田瞭, 山添誠司, 佃達哉
「パラジウム1原子ドーブによるPVP保護金クラスターの水素化触媒作用の向上」
第120回触媒討論会 (2017.9, 愛媛)
27. 中島悠人, 高畑遼, 山添誠司, 佃達哉
「ゾルゲル法を用いた金属酸化物保護金クラスターのサイズ選択的合成」
第120回触媒討論会 (2017.9, 愛媛)
28. 山添誠司, 石田瞭, 長谷川慎吾, 林峻, 佃達哉
「金クラスター上の吸着水素: 電子的相互作用と化学的性質」
第11回分子科学討論会 (2017.9, 宮城)
29. 高畑遼, 山添誠司, 小安喜一郎, 佃達哉
「極細金ナノロッド: 原子構造, 安定性, および光特性」
第11回分子科学討論会 (2017.9, 宮城)
30. 冨原良平, 高野慎二郎, 山添誠司, 小安喜一郎, 佃達哉
「配位子保護金クラスターの衝突誘起解離」
第11回分子科学討論会 (2017.9, 宮城)
31. 平田圭祐, 山下恵史朗, 村松悟, 高野慎二郎, 大下慶次郎, 中西隆造, 永田敬, 山添誠司, 小安喜一郎, 佃達哉
「負イオン光電子分光による配位子保護金属クラスターの超原子軌道の直接観測」
第11回分子科学討論会 (2017.9, 宮城)
32. 江守宗次郎, 高畑遼, 高野慎二郎, 山添誠司, 小安喜一郎, 佃達哉
「プラズマ商照射による配位子保護金クラスターの異方的凝集体の生成」
第11回分子科学討論会 (2017.9, 宮城)
33. 重田翼, 高野慎二郎, 山添誠司, 小安喜一郎, 佃達哉
「チオラート保護金クラスターの構造異性体の合成と評価」
第11回分子科学討論会 (2017.9, 宮城)
34. 小野崎晴佳, 小野貴大, 飯澤勇信, 阿部善也, 中井泉, 足立光司, 五十嵐康人, 大浦泰嗣, 海老原充, 宮坂貴文, 中村尚, 鶴田治雄, 森口祐一
「放射光X線分析により明らかになった福島第一原発事故由来の放射性粒子の性状および飛散状況」
第53回X線分析討論会 (2017.10, 徳島)
35. Tsubasa Omoda, Shinjiro Takano, Seiji Yamazoe, Kiichirou Koyasu, Tatsuya Tsukuda
"Ligand-induced transformation of gold core of $[\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}]^{-}$ "

The 5th International Research Conference, Forefront of Molecular Dynamics at Surfaces and Interfaces: From a single molecule to catalytic reaction (2017. 11, Tokyo)

36. Genevieve Hublet, Akira Yamaguchi, Naoki Shirai, Makoto Kimura
“Geochemical and petrochemical study of type 3 ordinary chondrites”
The Eighth Symposium on Polar Science (2017.12, Tokyo)
37. Naoki Shirai, Mitsuru Ebihara
“Applicability of prompt gamma-ray analysis to initial classification of meteorites”
The Eighth Symposium on Polar Science (2017.12, Tokyo)
38. Ryoga Maeda, Naoki Shirai, Akira Yamaguchi, Mitsuru Ebihara
“Formation process and metamorphism on R chondrite parent body based on distribution of rare earth elements, Th and U”
The Eighth Symposium on Polar Science (2017.12, Tokyo)
39. Yoshihiro Hidaka, Naoki Shirai, Akira Yamaguchi, Mitsuru Ebihara
“Two-step metallic partial melting on the acapulcoite-lodranite parent body”
The Eighth Symposium on Polar Science (2017.12, Tokyo)
40. Masayuki Uesugi, Motoo Ito, Naotaka Tomioka, Kentaro Uesugi, Akira Yamaguchi, Naoya Imae, Takuji Ohigashi, Yuzuru Karouji, Naoki Shirai, Toru Yada, Masanao Abe
“Current status of developments by the collaboration team of ESCuC/JAXA for curation works and analysis of Hayabusa2 returned samples”
The Eighth Symposium on Polar Science (2017.12, Tokyo)
41. 山添誠司
「金属クラスターの精密合成とその触媒応用」
相界面プロジェクトの年度末シンポジウム (2017.12, 京都)
42. 森口祐一, 鶴田治雄, 海老原充, 大浦泰嗣, 白井直樹, 大原利眞, 高木麻衣, 森野悠, 五藤大輔, 中山祥嗣, 中島映至
「初期内部被ばく線量評価のための実測値・推計値の総合解析」
第19回環境放射能研究 (2018.3, つくば)
43. 海老原充, 大浦泰嗣, 白井直樹, 永川栄泰, 桜井昇, 羽場宏光, 松崎裕之, 鶴田治雄, 森口祐一
「大気浮遊粒子試料中の I-129/I-131 比」
第19回環境放射能研究 (2018.3, つくば)
44. 大浦泰嗣, 海老原充, 白井直樹, 松崎裕之, 鶴田治雄, 森口祐一
「自動 SPM 計でのテープろ紙の分析による大気中の福島原発事故由来 ^{129}I 濃度」

第19回環境放射能研究 (2018.3, つくば)

45. 鶴田治雄, 海老原充, 大浦泰嗣, 白井直樹, 松崎浩之, 森口祐一, 大原利眞, 中島映至
「福島第一原子力発電所事故初期の大気汚染監視網 SPM 測定地点における大気中 I-131 濃度の推定」
第19回環境放射能研究 (2018.3, つくば)
46. Tsubasa Omoda, Shinjiro Takano, Seiji Yamazoe, Kiichirou Koyasu, Tatsuya Tsukuda
“Isolation and Characterization of Au₂₅(SR)₁₈ Cluster with Face-Centered-Cubic Gold Core”
日本化学会 第98回春季年会 (2018.3, 千葉)
47. Ryo Takahata, Seiji Yamazoe, Kiichirou Koyasu and Tatsuya Tsukuda
“Optical Properties of Gold Ultrathin Nanorods: Effect of Aspect Ratio and Surface Modification”
日本化学会 第98回春季年会 (2018.3, 千葉)
48. Atsushi Matsuo, Ryo Takahata, Shinjiro Takano, Seiji Yamazoe and Tatsuya Tsukuda
“ Synthesis and Characterization of Cu Nanoclusters Protected by Polyvinylpyridine”
日本化学会 第98回春季年会 (2018.3, 千葉)
49. Shun Hayashi, Seiji Yamazoe, Kiichirou Koyasu and Tatsuya Tsukuda
“CO₂ Fixation to Epoxide Catalyzed by Decaniobate Cluster [Nb₁₀O₂₈]₆: A Kinetic and Theoretical Study”
日本化学会 第98回春季年会 (2018.3, 千葉)
50. Shingo Hasegawa, Shun Hayashi, Shinjiro Takano, Seiji Yamazoe and Tatsuya Tsukuda
“Introduction of a Single Heterometal Atom into Polymer-Stabilized Gold Superatoms and Characterization of Hydrogenation Catalysis”
日本化学会 第98回春季年会 (2018.3, 千葉)
51. 山添誠司
「多価アニオン金属酸化物クラスターの塩基触媒応用」
日本化学会第98春季年会 (2018.3, 千葉)
52. 林峻、佐々木直人、山添誠司、佃達哉
「多価アニオン金属酸化物クラスターの塩基触媒作用」
第121回触媒討論会 (2018.3, 東京)
53. 長谷川慎吾、林峻、高野慎二郎、山添誠司、佃達哉
「PVP保護金クラスターへの異種金属単原子の導入による水素化触媒活性の発現」
第121回触媒討論会 (2018.3, 東京)

有機構造生物化学研究室

生体高分子（蛋白質や核酸など）が生物機能を発現する分子機構は、これらの分子の高次構造と密接な関連がある。生体高分子の立体構造を高分解能で得る手段としては X 線結晶解析、核磁気共鳴（NMR）、電子顕微鏡による単粒子解析が知られているが、NMR によって得られる溶液中の構造情報、特に運動性や構造多形性などの性質は、詳細な分子機能の理解のために非常に重要である。また、複数のドメインから構築されている蛋白質の高次構造は（ドメイン間の弱い相互作用が高次構造形成に重要なため）X 線結晶解析や電顕単粒子解析では決定することができず、NMR によってのみ解析可能であると考えられる。一方で方法論的な制約から、NMR を用いた詳細な解析が可能な生体高分子の分子量には上限があり、例えば分子量 50K を超えるような高分子量蛋白質や蛋白質複合体の解析を行うためには、さらなる方法論的な研究を行っていく必要がある。多くの蛋白質が他の蛋白質や核酸などと相互作用し、言わば「超分子複合体」を形成して機能を発揮していることを考えると、高分子量蛋白質や蛋白質複合体に適用可能な NMR 測定法を確立することは非常に重要であるといえる。また、重要な生物活性を持っていても、常温で不安定であったり、溶解度が低かったりして、従来は高次構造・機能解析が困難であった試料に対しても、NMR 法はいっそうの手法的改良が希求されている。当研究室では、これらの溶液 NMR 法のフロンティア領域に挑戦し、21 世紀の生命科学研究、環境研究、あるいは高分子化合物の物性研究に貢献できる研究を進めていく。

当研究室ではまた、生きた細胞や生物個体の中での蛋白質や核酸などの分子動態を直接観測するための研究も行っている。NMR 法は、生体に対する非侵襲性が高く、不透明な試料の内部についても観測可能であることから、このような「生体高分子試料のその場解析」に適している。従来は単離・精製した試料に用いられてきた NMR を生きている細胞に適用する方法（in-cell NMR 法）に注目し、生細胞中の蛋白質の立体構造とその変化、翻訳後修飾、相互作用などの直接観測法の確立を目指し研究を行っている。

以下に主な研究テーマを記す。

（1）NMR を用いた高分子量蛋白質、蛋白質複合体の解析法の研究

高分子量蛋白質の NMR 解析の際には、回転相関時間の増大に伴うシグナル強度の低下と、シグナルのオーバーラップの問題を解決する必要がある。近年の方法論的な進歩によって 10 年前は 20kDa 程度であった NMR の「分子量の壁」が、現在では大きく引き上げられつつある。当研究室では、さらに高分子量の蛋白質、蛋白質複合体の NMR による詳細な解析を目指して、①蛋白質の選択的安定同位体標識法の研究、②NMR 測定法の研究、③データ解析法や高次構造計算法の研究の 2 つの視点から、高分子量蛋白質の NMR が抱えている問題を総合的に解決することに取り組んでいる。

（2）in-cell NMR を用いた蛋白質の細胞内動態の解析

In-cell NMR 法には、①生細胞におけるターゲット蛋白質の特異的発現誘導と安定同位

体標識, ②NMR 測定 of 感度増大の 2 つの要素技術の確立が必須である. 当研究室では, 既に生きた大腸菌中の蛋白質の詳細な NMR 解析に成功しているが, 今後はさらにこの手法を高度化することで, 様々な蛋白質に普遍的に適用可能な「*in vivo* 構造生物学」とでも言うべき新しい学問分野の開拓を目指す.

(3) 動的な生体高分子複合体の構造解析

生体反応を担う多くの因子は分子認識が曖昧で, かつその相互作用は弱く, 結合と解離を繰り返す. これらの因子が複数集積することによって高い反応特異性を発揮し, また複数の因子の集積であるがゆえに, 複雑な調節が可能となっている. このように動的で複雑な生体高分子複合体の溶液状態での構造解析を, NMR を用いて行う. またそのために必要な試料調製法, 測定法の開発を行う.

(4) 蛋白質立体構造決定の自動化手法と構造最適化手法の開発

In-cell NMR 法や高分子量蛋白質に適用可能な堅牢な NMR 自動構造解析システムの開発を進めている. 従来の手動解析では, スペクトルの複雑化に伴う帰属候補数の増大によりすべての可能性の検討が難しい一方で, 計算機による自動解析では, あらゆる可能性を総当り的に判定でき, 解析者の技量差も最小限に抑えられるため, 高速, 客観的な解析が可能となる. また, 幅広い構造空間を探索可能なアルゴリズムも開発し, NMR シグナルが十分に得られない試料についても, 高精度に構造決定可能な手法を目指している.

I. 原著論文

01. Tepei Ikeya, David Ban, Donghan Lee, Yutaka Ito, Koichi Kato and Christian Griesinger, "Solution NMR views of dynamical ordering of biomacromolecules." *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-General Subjects*, 1862 (2), 287-306 (2017)
02. Kohsuke Inomata, Hajime Kamoshida, Masaomi Ikari, Yutaka Ito and Takanori Kigawa, "Impact of cellular health condition on protein folding state in mammalian cells." *Chemical Communications*, 53 (81), 11245-11248 (2017)
03. Noriyuki Matsuda, Mayumi Kimura, Bruno Barros Queliconi, Waka Kojima, Masaki Mishima, Kenji Takagi, Fumika Koyano, Koji Yamano, Tsunehiro Mizushima, Yutaka Ito and Keiji Tanaka, "Parkinson's disease-related DJ-1 functions in thiol quality control against aldehyde attack in vitro", *Scientific Reports*, 7 (1), 12816 (2017)
04. Ayaho Kobayashi, Tepei Kanaba, Ryosuke Satoh, Yutaka Ito, Reiko Sugiura and Masaki Mishima, "Chemical shift assignments of the first and second RRM of Nrd1, a fission yeast MAPK-target RNA binding protein." *Biomolecular NMR assignments*, 11 (2), 123-126 (2017)
05. Yasodha Manandhar, Wei Wang, Jin Inoue, Nobuhiro Hayashi, Takanori Uzawa, Yutaka Ito, Toshiro Aigaki and Yoshihiro Ito, "Interactions of in vitro selected fluorogenic peptide aptamers with calmodulin." *Biotechnology letters*, 39 (3), 375-382 (2017)

II. 著書, 総説等

01. Tepei Ikeya and Yutaka Ito, "Chapter 3, Advances in NMR data acquisition and processing for protein structure determination" *Experimental approaches of NMR spectroscopy -Methodology and application to life science and materials science-*, Springer (2017)
02. 伊藤 隆, "In-cell NMR による細胞内のタンパク質の動態解析 (第5土曜特集 生命現象を観る : 革新的な構造生命科学が観せてくれる世界) -- (NMR(核磁気共鳴))", *医学のあゆみ* 262 (5), 455-460 (2017)

III. 学会発表, 講演等

01. 名取文彦, 彦根佑哉, 平井剛, 三島正規, 伊藤隆, 袖岡幹子, "Click 反応によって連結可能な In-cell NMR 用常磁性金属イオンタグの開発", 日本化学会第97春季年会, 慶應義塾大学, 2017年3月16-19日
02. 三島正規 "長距離情報の取得によるマルチドメインタンパク質の構造解析のための NMR 技術の高度化" 先端究基盤共用促進事業 NMR 共用プラットフォーム 平成28年度 活動報告会、理化学研究所 横浜キャンパス 2017年3月21日
03. 会津貴大, 永井敢, 伊藤隆, 三島正規, "細胞接着に関わるマルチドメインタンパク質 vinculin の溶液 NMR による構造解析", 第12回日本ケミカルバイオロジー学会, 北海道大学, 2017年6月7-9日
04. 工藤工, 貴堂晃弘, 金場哲平, 前崎綾子, 伊藤隆, 三島正規, "マルチドメインからなるキナーゼの構造解析に供するための試料調整", 第12回日本ケミカルバイオロジー学会, 北海道大学, 2017年6月7-9日
05. 末元雄介, 井上仁, 新井崇一郎, 鴨志田一, 三島正規, 猪股晃介, 葛西卓磨, 木川隆則, 池谷鉄兵, 伊藤隆, "NMR によるマルチドメイン蛋白質 Drk の動態解析", 第17回日本蛋白質科学会年会, 仙台国際センター, 2017年6月20-22日
06. 伊藤隆, "Investigating protein behaviours in cultured human cells by paramagnetic in-cell NMR", 新学術領域「柔らかな分子系」第5回公開シンポジウム, ロイトン札幌, 2017年6月26-27日
07. Yusuke Suemoto, Takashi Tanaka, Hajime Kamoshida, Jin Inoue, Masaki Mishima, Peter Guentert, Tepei Ikeya and Yutaka Ito, "Protein structure determination in living eukaryotic cells by in-cell NMR spectroscopy", 19th International Union of Pure and Applied Biophysics (IUPAB) and 11th European Biophysical Societies' Association (EBSA) Congress, Edinburgh International Conference Centre, Edinburgh, UK, 2017年7月16-20日
08. Takuro Wakamoto, Soichiro Kitazawa, Tepei Ikeya, Tomoshi Kameda, Christian Roumestand, Nicola J. Baxter, Mike P. Williamson, Ryo Kitahara, "Structure determination of the locally disordered state of ubiquitin by high-pressure NMR spectroscopy", ISMAR2017, Canada, Québec, 2017年7月23-28日
09. 伊藤隆, "in situ structural biology by NMR", 分子研研究会「生体金属動態」, 分子科

学研究所, 2017年8月26-27日

10. 末元雄介, 井上仁, 新井崇一郎, 三島正規, 猪股晃介, 葛西卓磨, 木川隆則, 池谷鉄兵, 伊藤隆, "NMRによるマルチドメイン蛋白質 Drk の動態解", 第18回若手 NMR 研究会, かんぼの宿紀伊田辺, 2017年9月2-4日
11. 岡田真由, 池谷鉄兵, Rajesh Sundaresan, 野尻英里, 美川務, 伊藤隆, "Protein structural refinement using paramagnetic effects in solution NMR", 第18回若手 NMR 研究会, かんぼの宿紀伊田辺, 2017年9月2-4日
12. 伊藤隆, "NMR approaches to investigate protein folding and dynamics in the crowded intracellular environment", 第55回生物物理学会年会, 熊本大学, 2017年9月20日
13. 池谷鉄兵, "NMR データの自動解析および蛋白質立体構造計算の現状と創薬研究への応用の可能性", よこはま NMR 研究会, 理研横浜キャンパス, 2017年9月26日
14. Masaki Mishima "Structural analysis of flexible multi-domain proteins" 2017 Taiwan-Japan biomedical symposium on magnetic resonance, 台南市, 台湾, 2017年10月15-18日
15. 貴堂晃弘, 工藤工, 金場哲平, 伊藤隆, 三島正規, "溶液 NMR を用いたマルチドメインタンパク質 PKC の構造解析", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
16. 工藤工, 伊藤隆, 三島正規, "溶液 NMR を用いたリン酸化タンパク質とマルチドメインタンパク質の複合体の構造解析", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
17. 永井敢, 小林彩保, 伊藤隆, 三島正規, "溶液 NMR を用いた lncRNA 結合タンパク質 SHARP の構造解析", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
18. 会津貴大, 永井敢, 伊藤隆, 三島正規, "細胞接着に関わるマルチドメインタンパク質 vinculin の溶液 NMR 法による構造解析", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
19. 猪股晃介, 鴨志田一, 伊藤隆, 木川隆則, "動物細胞の健全性が細胞内タンパク質のフォールディング状態に与える影響", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
20. 岡田真由, 池谷鉄兵, Rajesh Sundaresan, 野尻英里, 美川務, 伊藤隆, "常磁性効果を用いた溶液 NMR 法による蛋白質 の立体構造解析", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
21. 末元雄介, 井上仁, 鴨志田一, 三島正規, 猪股晃介, 葛西卓磨, 木川隆則, 池谷鉄兵, 伊藤隆, "NMRによるマルチドメイン蛋白質 Drk の動態解析", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
22. 鴨志田一, 池谷鉄兵, 三島正規, 伊藤隆, "ヒト培養細胞中の蛋白質の3D 三重共鳴 NMR 測定", 第56回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017年11月14-16日
23. 北沢創一郎, 青島佑, 伊賀 惇記, 池谷鉄兵, 北原亮, "リン酸化ユビキチンの2つのコ

ンフォメーションの立体構造 決定と圧力効果", 第 56 回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017 年 11 月 14-16 日

24. 若本拓朗, 北沢創一郎, 池谷鉄兵, 亀田倫史, Roumestand Christian, Baxter Nichola, Willamson Mike, 北原亮, "高圧力 NMR 法によるユビキチンの局所変性状態の立体構造決定", 第 56 回 NMR 討論会, 首都大学東京・南大沢キャンパス, 2017 年 11 月 14-16 日
25. 葛西卓磨, 池谷鉄兵, 木川隆則, "スパースモデリングによる NMR 計測・解析の高速高精度化", 新学術領域「スパース モデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」第 5 回公開シンポジウム, 東京大学・本郷キャンパス, 2017 年 12 月 17-20 日
26. 会津貴大, 永井敢, 伊藤隆, 三島正規, "細胞接着に関わるマルチドメインタンパク質 vinculin の溶液 NMR による構造解析", 2017 年度生命科学系合同年次大会, 神戸ポートアイランド, 2017 年 12 月 6-9 日
27. 永井敢, 小林彩保, 伊藤隆, 三島正規, "溶液 NMR 法を用いた RNA 結合タンパク質 SHARP の構造解析", 2017 年度生命科学系合同年次大会, 神戸ポートアイランド, 2017 年 12 月 6-9 日
28. 貴堂晃弘, 工藤工, 金場哲平, 伊藤隆, 三島正規, "ライゲーシオン反応を用いたマルチドメインタンパク質 PKC の構造解析に向けた試み", 2017 年度生命科学系合同年次大会, 神戸ポートアイランド, 2017 年 12 月 6-9 日

有機化学研究室

当研究室では、有機金属化学や合成化学、分子触媒化学を基盤に、環境調和・低負荷型の精密合成プロセスを構築可能とする高性能分子触媒の設計・合成、及びその特徴を活かした有機高機能材料の創製を目的とした研究に取り組んでいます。また、炭素-炭素結合形成などの精密合成反応を達成する上で重要な鍵を握る反応性の高い有機金属化学種の合成と反応化学に関する研究、光を駆動力とする合成プロセスを構築する新しい有機金属光触媒の開発、優れた光・電子機能を発現する新しい π 共役系化合物群の合成と特性解析にも取り組んでいます。具体的な課題は以下の通りです。

- (1) 高性能分子触媒による環境調和型の効率合成法の開発や高機能材料の精密合成
- (2) 光を駆動力とする光増感性有機金属触媒の開発
- (3) 新しい π 共役系化合物の設計・合成・機能評価

内容：有機金属化学、有機合成化学、分子触媒化学、構造有機化学、反応有機化学、有機金属光触媒、新しい有機高機能材料の開発、分子触媒の特徴を生かした新規精密合成反応の開発と機構解析、新しい有機金属化学種の合成と反応化学

I. 原著論文

01. T. Miyashita, M. Kunisawa, S. Sueki, K. Nomura
“Synthesis of poly(arylene vinylene)s containing different end groups by combined acyclic diene metathesis polymerization with Wittig-type coupling”
Angew. Chem. Int. Ed., **56**, 5288-5293 (2017). *Inside Backcover Article (Highlight) Press Release (TMU, JST)*
02. M. Imamura, H. Shimizu, J. Yamakawa, H. Otani, T. Nishinaga, M. Iyoda
“Cyclic π -expanded oligothiophene 12-mers as semishape-persistent macrocycles”
Heterocycles, **95**, 380-389 (2017).
03. S. Chaimongkolkunasin, X. Hou, K. Nomura
“Ring opening metathesis polymerization of norbornene or tetracyclododecene with cyclooctene by using (arylimido)vanadium(V)-alkylidene catalyst”
J. Polym. Sci.: Part A: Polym. Chem., **55**, 3067-3074 (2017). *Special issue, celebrating Prof. Grubbs 75th birthday.*
04. G. Nagai, T. Mitsudome, K. Tsutsumi, S. Sueki, T. Ina, M. Tamm, K. Nomura
“Effect of Al cocatalyst in ethylene and ethylene/norbornene (Co)polymerization by (imido)vanadium dichloride complexes containing anionic N-heterocyclic carbenes having weakly coordinating borate moiety”
J. Jpn. Petrol. Inst., **60**, 256-262 (2017). *Special issue (invited submission).*
05. K. Tsutsumi, K. Itagaki, K. Nomura
“Synthesis and structural analysis of palladium(II) complexes containing neutral or anionic C2-symmetric bis(oxazoline) ligands: Effects of substituents in the 5 position”
ACS Omega, **2**, 3886-3990 (2017).
06. T. Nishinaga, Y. Sotome

“Stable radical cations and their π -dimers prepared from ethylene- and popylene-3,4-dioxythiophene co-oligomers: Combined experimental and theoretical investigations”

J. Org. Chem., **82**, 7245-7253 (2017).

07. M. S. Asano, Y. Yasuda, D. Kagota, T. Haque, K. Nomura
“Effects of terthiophene as the end-groups in triblock copolymers consisting of poly(fluorene vinylene) and oligo(phenylene vinylene): Time-resolved fluorescence and its anisotropy”
J. Photochem. Photobiol. A: Chem., **349**, 18-24 (2017).
08. Q. Yan, K. Tsutsumi, K. Nomura
“Synthesis and structural analysis of aryloxo-modified trinuclear half-titanocenes, and their use as catalyst precursors for ethylene polymerisation”
RSC Adv., **7**, 41345-41358 (2017).
09. S. Phungsripheng, M. Akita, A. Inagaki
“Substituent Effect of the Bridging Ligand in the Trinuclear Ru Complexes on Photocatalytic Oxygenation of a Sulfide and Alkenes”
Inorg. Chem., **56**, 12996-13006 (2017).
10. K. Nomura, X. Hou
“Cis Specific chain transfer ring-opening metathesis polymerization using a vanadium(V)-alkylidene catalyst for efficient synthesis of end-functionalized polymers”
Organometallics (Communication), **36**, 4103-4106 (2017).
11. J. Yi, W. Yang, W.-H. Sun, K. Nomura, M. Hada
“Vanadium NMR chemical shifts of (imido)Vanadium(V) dichloride complexes with imidazolin-2-iminato and imidazolidin-2-iminato ligands: A cooperation with quantum-chemical calculations and multiple linear regression analyses”
J. Phys. Chem. A, **121**, 9099-9105 (2017).
12. K. Nomura, M. Oshima, T. Mitsudome, H. Harakawa, P. Hao, K. Tsutsumi, G. Nagai, T. Ina, H. Takaya, W.-H. Sun, S. Yamazoe
“Synthesis, structural analysis of (imido)vanadium dichloride complexes containing 2-(2'-benz-imidazolyl)pyridine ligands: Effect of Al cocatalyst for efficient ethylene (co)polymerization”
ACS Omega, **2**, 8660-8673 (2017).
13. S. Kikuchi, K. Saito, M. Akita, A. Inagaki
“Non-radical light-controlled polymerization of styrene and vinyl ethers catalyzed by an iridium–palladium photocatalyst”
Organometallics, **37**, 359-366 (2018).
14. H. Harakawa, S. Patamma, A. Boccia, L. Boggioni, D. Ferro, S. Losio, K. Nomura, I. Tritto
“Ethylene copolymerization with 4-methylcyclohexene, 1-methylcyclopentene by half-titanocene catalysts: Effect of ligands and microstructural analysis of the copolymers”
Macromolecules, **51**, 853-863 (2018).
15. T. Fujio, T. Miwata, M. Takase, S. Sueki, K. Nomura
“Facile, efficient synthesis of star shaped π -conjugated systems by combined olefin metathesis with Wittig-type coupling”

J. Chin. Chem. Soc., 65, 317-324 (2018). 中國化学会(台北) *Special issue, International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2016 (C&FC2016)*

16. T. Yamada, K. Nomura, M. Fujiki
“Noticeable chiral center dependence of signs and magnitudes in circular dichroism (CD) and circularly polarized luminescence (CPL) spectra of all-trans poly(9,9-dialkyl-fluorene-2,7-vinylene)s bearing chiral alkyl side chains in solution, aggregates, and in thin films”
Macromolecules, 51, 2377-2387 (2018).
17. H. Shimizu, K. H. Park, H. Otani, S. Aoyagi, T. Nishinaga, Y. Aso, D. Kim, M. Iyoda
“A Saturn-like complex composed of macrocyclic oligothiophene and [60]fullerene: structure, stability, and photophysical properties in solution and the solid state”
Chem. Eur. J., 24, 3793-3801 (2018).

II. 著書、総説等

01. 野村琴広
“オレフィンメタセシス化学の最近の進展—より高活性かつ緻密な反応制御を可能とする触媒開発”
化学, 72, 70-71(2017).
02. 野村琴広
“高性能分子触媒が先導する新規オレフィン系高分子機能材料の創製”
ペトロテック, 41 (1), 20-23 (2018).
03. Y. Chen, M. M. Abdellatif, K. Nomura
“Olefin metathesis polymerization: Some recent developments in the precise polymerizations for synthesis of advanced materials (by ROMP, ADMET)”
Tetrahedron, 74, 619-643 (2018). Invited submission.
04. K. Nomura, T. Mitsudome, K. Tsutsumi, S. Yamazoe
“Solution XAS analysis for exploring the active species in homogeneous vanadium complex catalysis”
J. Phys. Soc. Jpn., 87, 061014 (2018). Invited submission.
05. S. Zhang, W. Zhang, K. Nomura
“Synthesis and reaction chemistry of alkylidene complexes with titanium, zirconium, vanadium, and niobium: Effective catalysts for olefin metathesis polymerization and the other organic transformations”
Adv. Organomet. Chem., 68, 93-136 (2017). Invited submission.
06. 野村琴広
“溶液 X 線吸収微細構造 (XAFS) 解析によるバナジウム触媒の構造解析: エチレン二量
化・重合に有効なイミド配位バナジウム触媒を事例に”
「次世代ポリオレフィン総合研究」, 郷 茂夫, 寺野 稔 (編), 11, 58-62 (2017).
07. 野村琴広, 林原瞳
“バナジウム錯体触媒によるオレフィン重合・二量化反応 高性能分子触媒の創製と活性
種解析”

III. 学会発表、講演等

1. N. Srisupap, K. Wised, K. Nomura

“Synthesis of (imido)niobium(V) complexes and some reactions”

16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis

(札幌, 5 月, 2017).

2. S. Chaimongkolkunasin, X. Hou, K. Nomura

“Imido vanadium(V)-alkylidene complexes for olefin metathesis polymerization”

16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis

(札幌, 5 月, 2017).

3. S. Pengoubol, K. Nomura

“Synthesis of ultrahigh molecular weight poly(α -olefin)s by half titanocene catalysts”

16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis

(札幌, 5 月, 2017).

4. Z. Sun, K. Nomura

“Precise synthesis of star-shaped polymers by living ring-opening metathesis polymerization”

16th Korea-Japan Symposium on Catalysis & 3rd International Symposium of Institute for Catalysis

(札幌, 5 月, 2017).

5. S. Sueki, T. Miyashita, M. Kunisawa, K. Nomura

“Synthesis of poly(arylene vinylene)s with different end groups by combining acyclic diene metathesis polymerization with Wittig-type coupling”

The 19th IUPAC International Symposia on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS19) (Jeju, Korea, June, 2017).

6. M. Kuboki, K. Nomura

“Synthesis of (imido)niobium(V) complexes and some reactions”

The 19th IUPAC International Symposia on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS19) (Jeju, Korea, June, 2017)

7. H. Harakawa, S. Patamma, I. Tritto, K. Nomura

“Copolymerization of ethylene with methylcyclohexenes, 1-methylcyclopentene using half-titanocene catalysts”

The 19th IUPAC International Symposia on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS19) (Jeju, Korea, June, 2017)

8. S. Chaimongkolkunasin, X. Hou, K. Nomura

“Synthesis of (imido)Vanadium(V)-alkylidene complexes: Highly-active thermally robust olefin metathesis catalysts”

The 22nd International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry (ISOM XXII) (Zurich, Switzerland, July, 2017).

9. M. Kunisawa, T. Miyashita, S. Sueki, K. Nomura

“Synthesis of poly(fluorine-2,7-vinylene)s with different end groups by combined acyclic diene metathesis polymerization with Wittig-type coupling”

The 22nd International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry (ISOM XXII) (Zurich, Switzerland, July, 2017).

10. 野村琴広

“バナジウム・チタン錯体触媒によるオレフィン重合における触媒活性種解析”

第 12 回次世代ポリオレフィン総合研究会 (東京, 8 月, 2017).

11. 下屋庄司, 松阪裕子, 野村琴広, 稲垣昭子

“フルオレンを含む二座ホスフィンを有する光増感性ロジウム及びイリジウム多核錯体の合成”

錯体化学会第 67 階討論会 (北海道大学, 9 月, 2017)

12. 野村琴広, 満留敬人, 永井 豪, 五十嵐 淳, 堤 健, 末木俊輔, 高谷 光, Tamn Matthias, 山添誠司

“イミド配位バナジウム錯体によるエチレンの重合・二量化と溶液 XAFS 手法を活用した触媒活性種解析”

第 64 回有機金属化学討論会 (東北大学, 9 月, 2016).

13. 大宮拓也, 堤 健, 野村琴広

“キレート多座配位ニオブ錯体の合成と反応性に関する研究”

第 64 回有機金属化学討論会 (東北大学, 9 月, 2016).

14. 久保木勝晴, 堤 健, 野村琴広

“キレートアニオン性配位子を有するイミド配位ニオブ錯体の合成と反応性”

第 64 回有機金属化学討論会 (東北大学, 9 月, 2016).

15. Srisupap Natta, Kritdikul Wised, 堤 健, 野村琴広

“Reaction chemistry of (arylimido)niobium(V) tris(ketimide) complex with various phenol/alcohols”

第 120 回触媒討論会 (愛媛大学, 9 月, 2016).

16. 林原 瞳, Hou Xiauhua, 野村琴広

“イミド配位バナジウム-アルキル錯体とフェノールとの配位子交換反応の解析, 及び簡便な触媒スクリーニング手法への適用”

第 120 回触媒討論会 (愛媛大学, 9 月, 2016).

17. 原川仁志, Patamma Srisuda, Incoronata Tritto, 野村琴広

“ハーフチタノセン触媒を用いるエチレンと置換シクロヘキセンや置換シクロペンテンとの共重合”

第 120 回触媒討論会 (愛媛大学, 9 月, 2016).

18. 堤 健, 下城 真, 野村琴広

“C₂-対称ビスオキサゾリン/Ni(II), Pd(II) 錯体の合成とオレフィン重合への応用”

第 120 回触媒討論会 (愛媛大学, 9 月, 2016).

19. 山田拓海, 末木俊輔, 藤木道也, 野村琴広

“キラル側鎖を有するポリフルオレンビニレンの合成とその特性解析”

- 第 66 回高分子討論会 (愛媛大学, 9 月, 2017).
20. Chaimongkolkunasin Sapanna, Hou Xiaohua, 野村琴広
“Imido vanadium(V)-alkylidene complexes for olefin metathesis polymerization”
第 66 回高分子討論会 (愛媛大学, 9 月, 2017).
21. K. Nomura
“Olefin metathesis: Design of efficient catalysts for synthesis of advanced materials”
Inner Mongolia University (Hohhot, China, 9 月, 2017).
22. K. Nomura
“Design of efficient molecular catalysts for development of advanced polymeric materials”
Institute of Process Engineering, CAS (Beijing, China, 9 月, 2017).
23. K. Nomura
“Design of efficient molecular catalysts for development of advanced polymeric materials”
Beijing Institute of Technology (Beijing, China, 9 月, 2017).
24. K. Nomura
“Development of Advanced Polymeric Materials by Precise Polymerization, End-Functionalization, Grafting”
Beijing Institute of Fashion Technology (Beijing, China, 9 月, 2017).
25. 野村琴広
“ポリオレフィンの精密合成のための触媒設計”
2017 年度高分子学会 Webinar 講演 (東京, 10 月, 2017).
26. K. Nomura
“XAS Analysis for exploring the oxidation state of the catalytically active species in reaction with ethylene by (imido)vanadium complex catalysts”
Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) (Tianjin, China, 10 月, 2017). Keynote Lecture
27. S. Chaimongkolkunasin, X. Hou, K. Nomura
“Design of (arylimido)vanadium(V) alkylidene complex catalysts for ring-opening metathesis polymerization of cyclic olefins”
Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) (Tianjin, China, 10 月, 2017).
28. H. Harakawa, S. Patamma, I. Tritto, K. Nomura
“Copolymerization of ethylene with methylcyclohexenes, 1-methylcyclopentene using half-titanocene catalysts”
Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) (Tianjin, China, 10 月, 2017).
29. S. Pengoubol, K. Nomura
“Synthesis of ultrahigh molecular weight poly(α -olefin)s and their functionalization by half-titanocene catalysts”
Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) (Tianjin, China, 10 月, 2017).
30. Z. Sun, K. Nomura
“Precise synthesis of star-shaped polymers by living ring-opening metathesis polymerization”
Asian Polyolefin Workshop 2017 (APO2017) (Tianjin, China, 10 月, 2017).
31. 永井 豪, Tamm M, 野村琴広
“ボレート含有 N-ヘテロ環状カルベン (WCA-NHC) 配位子を有するバナジウム及びチタン錯体の合成とエチレン重合”

- 第 47 回石油・石油化学討論会 (鳥取, 11 月, 2017).
32. 久保木勝晴, 堤 健, 野村琴広
“イミド配位ニオブ錯体の合成とエチレンとの反応”
第 47 回石油・石油化学討論会 (鳥取, 11 月, 2017).
33. 岡崎 竣,¹ 藤木道也,¹ 野村琴広,² 山田拓海² (¹ 奈良先端大院物質、² 首都大院理工)
“ポリシラン共重合体を光分解性らせん誘起足場高分子とする青色発光 CPL 特性のポリフルオレンビニレン(PFV) 凝集体の発生”
第 26 回ポリマー材料フォーラム (大阪, 11 月, 2017 年).
34. K. Nomura
“Design of Efficient Molecular Catalysts for Development of Polymeric Functional Materials”
Universite libre de Bruxelles (Brussel, Belgium, 11 月, 2017). Solvay Colloquium
35. K. Nomura
“Olefin metathesis: Efficient method for precise synthesis of end-functionalized liner/star conjugated polymersting”
University of Ghent (Ghent, Belgium, 11 月, 2017).
36. K. Nomura
“Olefin metathesis: Design of efficient catalysts and synthesis of advanced conjugated materials”
University of Mons (Mons, Belgium, 11 月, 2017).
37. K. Nomura
“Olefin metathesis: efficient methods for synthesis of advanced materials”
University of Liege (Liege, Belgium, 11 月, 2017).
38. 西長 亨, 赤羽根敬弘, 高瀬雅祥, 野村琴広, 真崎康博
“中央に嵩高い置換基をもつ π 共役オリゴマーのジカチオン種のジラジカル性と π ダイマー”
第 44 回有機典型元素化学討論会 (東京, 12 月, 2017).
39. K. Nomura
“(Imido)vanadium complex catalysts for olefin polymerization/dimerization”
University of Lille (Lille, France, 12 月, 2017).
40. K. Nomura
“Precise synthesis of cyclic olefin polymers by olefin insertion/metathesis polymerization”
Beijing University of Chemical Technology (Beijing, China, 12 月, 2017).
41. K. Nomura
“Olefin metathesis: Efficient method for precise synthesis of end-functionalized conjugated polymers/oligomers as advanced functional materials”
Hefei Institute of Technology (Hefei, China, 12 月, 2017).
42. K. Nomura
“(Imido)vanadium complex catalysts for olefin polymerization/oligomerization”
University of Science and Technology of China (Hefei, China, 12 月, 2017).
43. 野村琴広
“高性能分子触媒が先導する新しいオレフィン系高分子機能材料の研究開発”
日本化学会第 98 年会 (日本大学, 船橋, 3 月, 2018). アドバンスト・テクノロジー・プログラム (ATP) -触媒元素戦略で拓く未来社会-

生物化学研究室

生物化学は生命現象を化学的に研究する生物学と化学の融合研究領域であり、生物を成り立たせている物質とそれが担う化学反応のしくみ、そしてそれぞれの物質や反応の生命システムの中でもつ役割を究明することを目的とする。我々の研究室では、生体を構成するタンパク質群のダイナミクスとそれらが担う生体反応を分子レベルで解明するために、遺伝学手法から質量分析手法に至る幅広いテクニックを駆使して研究を進めている。研究室では、以下の2点のプロジェクトを主に手がけている。

- (i) 遺伝情報を格納する「染色体」の恒常性維持機構の解明に挑戦している。染色体の異常は細胞老化やガン化に関わり、その恒常性維持機構の解明は、高齢化の進む今日にあって集中的な研究を必要とされる研究分野の一つである。染色体は、遺伝情報が書き込まれている DNA と呼ばれる物質と、ヒストンタンパク質がつくるヌクレオソームを最小単位として形成される「クロマチン」からできている。クロマチンは、遺伝情報を読み出したり、傷ついた DNA を直したりするような DNA に直接作用する化学反応を行う際には、DNA がむき出すように構造変化する必要がある。このような反応はクロマチンリモデリングと呼ばれている。我々は、クロマチンの制御機構などの遺伝情報の制御システムを解析している。また、損傷した DNA を修復する機構の基礎科学的解明を行い、新しい抗がん治療法に資する化学物質の探索などの技術応用への橋渡しを目指している。
- (ii) タンパク質と RNA を包括的に解析することで、細胞の基本的な働きを支える物質ネットワークを解明する研究に挑戦している。生物の中で起きている様々な現象は、タンパク質分子と RNA の集合体「リボヌクレオプロテオーム」が複雑に制御している。その構成成分とそれぞれの相互作用のダイナミクスを解析するために、我々の研究室では、最新の質量分析法と情報処理技術を駆使した RNA やタンパク質解析のための先端技術を開発している。また、この技術を基礎にして、従来の生化学や分子生物学、細胞生物学の方法と組み合わせることで、細胞の基本的な働きを「分子の言葉」で理解することを目標として研究を行っている。

クロマチン構造やゲノム高次構造の制御による遺伝情報制御システムの研究では、H29年に以下の3点の成果を上げた。(1) 非コードRNA転写に共役したクロマチン再編成に関わる、ヒストン修飾酵素やリモデリング因子を同定した。(2) 非コードRNA転写の活性化に必要なエレメントを同定し、活性化部位からクロマチン再編成が誘導されるまでの誘導範囲を同定した。(3) クロマチン再編成後の高次ゲノム構造形成の見出し、高次構造形成による転写因子の新規の結合制御メカニズムを提唱した。ゲノム損傷応答、恒常性維持の研究では、H29年に以下の3点の成果を上げた。(1) 複製ポリメラーゼ δ や ϵ のゲノム維持における働きを発見した。(2) 複製ポリメラーゼ ϵ の研究を行い、ウイルスやがんの治療に用いられているヌクレオチドアナログ製剤の薬理作用の原理を解明し、治療効果を予測するための方法を作った。(3) 染色体構造を支えるコヒーシタンパク質の制御因子ESC01/2の機能を解析し、間期での染色体構造維持に関わる新機能を発見した。

上記研究では、イギリス、イタリア、スイス、米国などと国際共同研究し、H29年度にはのべ3人の学生が海外留学した。

リボヌクレオプロテオーム研究

本研究では、液体クロマトグラフィー-質量分析計(LC-MS)を利用したRNAの転写後修飾(エピトランスクリプトーム)の解析法を継続的に開発している。その方法は、特異性の高いRNA切断法を中心とするRNA前処理とLC-MS法を組み合わせる方法で、数千塩基に及ぶRNAの擬ウリジン化やメチル化、プロセシングなどの転写後修飾の正確な位置をフェムトモルレベルの試料から決定することができるようになっている。また、安定同位体標識した合成RNAを利用して転写後修飾を網羅的にかつ定量的に解析する方法(Stable Isotope-labeled Ribonucleic Acid as Internal Standard: SILNAS法)や擬ウリジン解析の新しい方法を考案し、転写後修飾の研究が最も進んでいるRNAの1つであるヒトのリボソームRNAに適用し、その転写後修飾を含む全化学構造と修飾率を決定した。現在、より微量の試料を迅速に解析するための改良に取り組んでいる。

I. 原著論文

1. Ooka M, Abe T, Cho K, Koike K, Takeda S, Hirota K, Chromatin remodeler ALC1 prevents replication-fork collapse by slowing fork progression. *PLoS One* 13: e0192421 (2018)

2. Tsuda M, Terada K, Ooka M, Kobayashi K, Sasanuma H, Fujisawa R, Tsurimoto T, Yamamoto J, Iwai S, Kadoda K, Akagawa R, Huang SN, Pommier Y, Sale JE, Takeda S, Hirota K, The dominant role of proofreading exonuclease activity of replicative polymerase epsilon in cellular tolerance to cytarabine (Ara-C). *Oncotarget* 8: 33457–33474 (2017)
3. Tsuda M, Cho K, Ooka M, Shimizu N, Watanabe R, Yasui A, Nakazawa Y, Ogi T, Harada H, Agama K, Nakamura J, Asada R, Fujiike H, Sakuma T, Yamamoto T, Murai J, Hiraoka M, Koike K, Pommier Y, Takeda S, Hirota K, ALC1/CHD1L, a chromatin-remodeling enzyme, is required for efficient base excision repair. *PLoS One* 12: e0188320 (2017)
4. Kawasumi R, Abe T, Arakawa H, Garre M, Hirota K, Branzei D, ESCO1/2's roles in chromosome structure and interphase chromatin organization. *Genes Dev* 31: 2136–2150 (2017)
5. Fujisawa R, Ohashi E, Hirota K, Tsurimoto T, Human CTF18-RFC clamp-loader complexed with non-synthesising DNA polymerase epsilon efficiently loads the PCNA sliding clamp. *Nucleic Acids Res* 45: 4550–4563 (2017)
6. Asada R, Umeda M, Adachi A, Senmatsu S, Abe T, Iwasaki H, Ohta K, Hoffman CS, Hirota K, Recruitment and delivery of the fission yeast Rst2 transcription factor via a local genome structure counteracts repression by Tup1-family corepressors. *Nucleic Acids Res* 45: 9361–9371 (2017)
7. Adachi A, Senmatsu S, Asada R, Abe T, Hoffman CS, Ohta K, Hirota K, Interplay between chromatin modulators and histone acetylation regulates the formation of accessible chromatin in the upstream regulatory region of fission yeast *fbp1*. *Genes Genet Syst* (2017)
8. "A Sensitive Microbead-Based Organic Media-Assisted Method for Proteomics Sample Preparation from Dilute and Denaturing Solutions" Taoka M, Fujii M, Tsuchiya M, Uekita T, Ichimura T. *ACS Appl Mater Interfaces* 2017;9(49):42661–42667
9. "Truncated forms of U2 snRNA (U2-tfs) are shunted toward a novel uridylylation pathway that differs from the degradation pathway for U1-tfs." Ishikawa H, Nobe Y, Izumikawa K, Taoka M, Yamauchi Y, Nakayama H, Simpson RJ, Isobe T, Takahashi N. *RNA Biol.* 2018;15(2):261–268.

10. "Atomic Resolution Snapshot of Leishmania Ribosome Inhibition by the Aminoglycoside Paromomycin." Shalev-Benami M, Zhang Y, Rozenberg H, Nobe Y, Taoka M, Matzov D, Zimmerman E, Bashan A, Isobe T, Jaffe LC, Yonath A, Skiniotis G. Nat Commun. 2017;8(1):1589.
11. "TDP-43 stabilises the processing intermediates of mitochondrial transcripts." Izumikawa K, Nobe Y, Yoshikawa H, Ishikawa H, Miura Y, Nakayama H, Nonaka T, Hasegawa M, Egawa N, Inoue H, Nishikawa K, Yamano K, Simpson RJ, Taoka M, Yamauchi Y, Isobe T, Takahashi N. Sci Rep 2017;7(1):7709.
12. "TRIM32-cytoplasmic-body formation is an ATP-consuming process stimulated by HSP70 in cells." Ichimura T, Taoka M, Shoji I, Kato H, Sato T, Hatakeyama S, Isobe T, Hachiya N. PLoS One. 2017;12(1):e0169436.
13. "Rab2a and Rab27a cooperatively regulate transition from granule maturation to exocytosis through the dual effector Noc2." Matsunaga K, Taoka M, Isobe T, Izumi T. J Cell Sci. 2017;130(3):541-550.
14. "Poly(A)-specific ribonuclease regulates the processing of small-subunit rRNAs in human cells" Ishikawa H, Yoshikawa H, Izumikawa K, Miura Y, Taoka M, Nobe Y, Yuko; Yamauchi Y, Yoshio; Nakayama H, Hiroshi; Simpson R, Richard; Isobe T, Takahashi N. Nucleic Acids Res 2017;45(6): 3437-3447.

II. 著書、総説等

橋本健朗 化学結合論-分子の構造と機能
放送大学教材 (分担執筆)

III. 学会発表、講演等

1. "LC-MS based determination of pseudouridine at single nucleotide resolution in mammalian non-coding RNAs using a uridine synthesis deficient cell line" Yuka Yamaki; Yuko Nobe; Hiroshi Nakayama; Hideaki Ishikawa; Yoshio Yamauchi; Nobuhiro Takahashi; Toshiaki Isobe; Masato Taoka. 65th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, Indianapolis, IN, USA, 6/7/2017
2. "Characterization of post-transcriptional modifications using low-mass-fragment signatures generated by highly-accurate tandem mass

spectrometry” Hiroshi Nakayama; Yuko Nobe; Yoshio Yamauchi; Masato Taoka; Toshiaki Isobe. 65th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, Indianapolis, IN, USA, 6/7/2017

3. 「リボヌクレオプロテオーム解析：質量分析を基礎とした網羅的な RNA 転写後修飾解析法の開発」田岡万悟 JProS2017 年大会 ホテル阪急エキスポパーク、大阪 7/19/2017 (招待)
4. 浅田隆大、梅田未来、千松賢史、足立朗、阿部拓也、岩崎博史、太田邦史、Charles S. Hoffman、廣田耕志、局所的ゲノム高次構造制御を介した転写因子の標的結合制御機構の解析、第 34 回染色体ワークショップ(千葉 2017 1 月 11-13 日)
5. 廣田耕志、SUMO 化蛋白質を認識する RING 型ユビキチンリガーゼ RNF4 による染色体恒常性維持機構の解明、ヒストンバリエーション研究会、ヒストンバリエーション研究会 (仙台, 2017 2/11)
6. Ryuta Asada and Kouji Hirota, Transcriptional activation via “catch-and-release” translocation of transcription factor Rst2 between activation sites is mediated by local higher-order genome structure., The 9th International Fission Yeast Meeting (カナダ 2017 5 月)
7. 廣田耕志, In vivo evidence for translesion DNA synthesis by replicative DNA polymerase δ , US-JP DNA repair work meeting (カルフォルニア 2017 5 月 17 日)
8. 浅田隆大, 廣田耕志, 局所的ゲノム高次構造を介した転写因子の標的配列結合タイミング制御機構の解析, クロマチン動構造ワークショップ (北海道 2017 6 月)
9. 千松賢史, 廣田耕志, 長鎖 non-coding RNA 転写による クロマチン構造制御メカニズムの解明, クロマチン動構造ワークショップ (北海道 2017 6 月)
10. 阿部拓也, 廣田耕志, A method to evaluate the frequency of aneuploidy, SMC proteins (山形 2017 6 月)
11. 廣田耕志, 非コード RNA の転写開始によって誘導されるクロマチン再編成の転写や組換えにおける役割, 遺伝研研究会 (静岡 2017 10 月 2 日)
12. 梅村小雪, 廣田耕志, オーキシソグロンシステムを用いたトポイソメラーゼ 1 の細胞内機能の解析, バイオコンフェレンス (東京 2017 11 月 6 日)
13. 千松賢史, 廣田耕志, metabolic stress-induced lncRNA (mlonRNA) 転写はクロマチン再編成を誘導し、転写と減数分裂期組換えを活性化させる, バイオコンフェレンス (東京 2017 11 月 6 日)

14. 鈴木雄也, 廣田耕志, The establishment of highly sensitive and quantitative analysis assay to detect chromosome loss using HSV-TK, バイオコンフェレンス (東京 2017 11 月 6 日)
15. 千松賢史, 廣田耕志, metabolic stress-induced lncRNA (mlonRNA) 転写によるクロマチン再編成は、転写と減数分裂期組換えを活性化する, 染色体ワークショップ (愛知 2017 11 月)
16. 恒川千明, 廣田耕志, 局所的ゲノム高次構造を介した転写因子の標的配列結合タイミング制御機構の解析, 染色体ワークショップ (愛知 2017 11 月)
17. 浅田隆大, 廣田耕志, DNA トポロジーによるヌクレオソームポジションの規定と転写制御, 染色体ワークショップ (愛知 2017 11 月)
18. 千松賢史, 廣田耕志, metabolic stress-induced lncRNA (mlonRNA) 転写はクロマチン再編成を誘導し、転写と減数分裂期組換えを活性化させる, 分子生物学会 (神戸 2017 12 月 7 日)
19. 鈴木雄也, 廣田耕志, The establishment of highly sensitive and quantitative analysis assay to detect chromosome loss using HSV-TK, 分子生物学会 (神戸 2017 12 月 7 日)
20. 梅村小雪・廣田耕志, T オーキシンドェグロンシステムを用いたトポイソメラーゼ 1 の細胞内機能の解析, 分子生物学会 (神戸 2017 12 月 7 日)
21. 廣田耕志, ALC1 クロマチンリモデリング因子のゲノム維持における働き, 分子生物学会 (神戸 2017 12 月 7 日)
22. 阿部拓也, 廣田耕志, 複製フォーク構成因子とヒストンバリエント H2AX、DNA 修復因子の遺伝学的関係性の解析, ヒストンバリエント研究会 (東京 2018 2 月)

物性物理化学研究室

私たちが利用している物質（固体）の性質とは、物質を作る原子や分子一個の性質の単なる足し合わせでなく、原子や分子が多数集まってはじめて現れるものである。最近、注目されている超伝導、いろいろなタイプの磁性、光物性などの性質も、物質特有の性質である。このような物性と物質を構成している個々の原子や分子の関連性を解明できれば、これまで明らかにされている合成や物質変換の技術を駆使することにより、思いのままに目的とする物性を示す物質を手にすることが可能となる。また、配列や組み合わせを制御することにより、これまでの物質にはないような新しい物性やいくつかの性質が組み合わさった複合物性を示す物質を作ることも夢ではない。本研究室では、新規物性や複合物性を示す物質の開発を目的として研究を行っている。

（１）新しいタイプの有機超伝導体の開発

有機超伝導体は、分子を修飾することにより、多種多様なものを作ることが可能である。また、光や磁場などに応答する官能基を導入することにより、光や磁場などに応答する複合機能性を示す有機超伝導体を作ることも可能と考えられる。そこで、世界ではじめて非対称な分子からなる有機超伝導体を開発した実績をもとに、従来の設計指針に固執せず、新たな視点から、新しい分子骨格を有する超伝導体や光や磁場などに応答する超伝導体などの開発を進めた。その結果、非対称ドナー分子 DMET に引き続き、TTF の分子骨格を持たない有機分子 BDA-TTP と DODHT 分子から超伝導体を開発することに成功した。特に、異方的に圧力を加えることで、構造を異方的に変化させ、超伝導が発現する圧力や超伝導転移温度を変化させる試みも行っている。

（２）金属内包フラーレンの研究

金属内包フラーレンは、球殻状構造を持つフラーレンの内部空間に金属原子を内包した分子である。最近、本研究室では、2 個の金属原子を内包した二核金属内包フラーレンの分子物性に関する研究を行っている。特に、内包金属が磁性、あるいは、発光特性を持つものについて、その性質を分光学的手法を用いて調べている。

（３）Chiral な磁性体の構造研究

Chiral な磁性体は、chiral 磁化に伴う巨大非線形磁化率、巨大電気磁気効果、巨大不斉磁気光学効果、磁化誘起第二光高調波の発生等が期待できる。本研究室では Chiral な磁性体の構造を制御することにより、Chiral な磁性体に特徴的な物性を制御することを目指した研究を行っている。

I. 原著論文

01. Y. Taguchi, H. Endo, T. Kodama, Y. Achiba, H. Shiromaru, T. Wakabayashi, B. Wales, J.H. Sanderson
"Polyynes formation by ns and fs laser induced breakdown in Hydrocarbon gas flow "
Carbon, **115**, 169-174 (2017).
02. Ali Ramadhan, Michal Wesolowski, Tomonari Wakabayashi, Haruo Shiromaru, Tatsuya Fujino, Takeshi Kodama, Walter Duley, Joseph Sanderson
"Synthesis of hydrogen- and methyl-capped long-chain polyynes by intense ultrashort laser pulse irradiation of toluene"
Carbon, **118**, 680-685 (2017).
03. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Takeshi Kodama, Masahiko Hada
"Theoretical Insights into the Electronic Structures and Stability of Dimetallofullerenes $M_2@I_h-C_{80}$ "
The Journal of Physical Chemistry C, **121**, 18169-18177 (2017).
04. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Takeshi Kodama, Masahiko Hada
"Quantum Chemical Study on Endohedral Heteronuclear Dimetallofullerene $M_1M_2@I_h-C_{80}$ toward Molecular Design"
The Journal of Physical Chemistry C, **121**, 27700-27708 (2017).

II. 著書、総説等

III. 学会発表、講演等

01. 中鳥なつみ、三谷拓示、山口貴久、古川貢、加藤立久、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Searching for the unprecedented endohedral metallofullerenes by applying the separation method for those stable only in an anion form」
第52回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3、東京)
02. 三谷拓示、中鳥なつみ、山口貴久、古川貢、加藤立久、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Production and Characterization of Hetero-dimetallofullerene: $GdV@C_{80}(I_h)$ 」
第52回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3、東京)
03. 小林和博、三谷拓示、中鳥なつみ、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Attempt to produce dimetallofullerenes containing Yb」
第52回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3、東京)
04. 西本真也、小林和博、平山貴晟、三谷拓示、中鳥なつみ、山口貴久、古川貢、加藤立久、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Spectroscopic studies of $La_2@C_{78}$ anion」
第52回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3、東京)
05. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Takeshi Kodama, Masahiko Hada
「Electronic Structures and Stability of Metal Encapsulated C_{80} fullerenes: Ab

initio DFT study]

第 52 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3、東京)

06. 田口裕貴、遠藤瞳、兒玉健、若林知成、阿知波洋次、城丸春夫、Wales Benji、Sanderson Joseph
「炭化水素ガス流中のレーザー誘起ブレイクダウンによるポリイン生成」
第 52 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3、東京)
07. Haruka Suzuki, Yuki Taguchi, Takeshi Kodama, Yohji Achiba, Haruo Shiromaru
「Absolute yield of fullerene formed by graphite laser ablation at medium-high ambient temperatures」
第 52 回 フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3、東京)
08. 三谷拓示、山口貴久、古川貢、加藤立久、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「 $GdM@C_{80}(I_h)$ ($M=Y, La$) アニオンの合成とキャラクターゼーション」
第 11 回 分子科学討論会 (2017.9、仙台)
09. 小林和博、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Yb を含む二核金属内包フラーレンの探索」
第 11 回 分子科学討論会 (2017.9、仙台)
10. 西本真也、古川貢、加藤立久、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Nd を含む二核金属内包フラーレンアニオンの分光学的研究」
第 11 回 分子科学討論会 (2017.9、仙台)
11. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Takeshi Kodama, Masahiko Hada
「Quantum-Chemical Studies on Lanthanide encapsulated metallofullerenes towards designing functional materials」
第 11 回 分子科学討論会 (2017.9、仙台)
12. 兒玉健
「炭素ケージに内包された金属ダイマーの物理化学」
第 56 回 電子スピンスイェンス学会年会 SEST2017 (2017.11、東京)

分子集合系物理化学研究室

界面活性剤や脂質等の両親媒性分子がつくる集合体（ミセル・吸着膜・自己組織化膜・ベシクル・マイクロエマルジョン・リオトロピック液晶など）やコロイド・高分子・ゲルなど「ソフトマター」と総称される物質は、生体やわれわれの身近にある食品、薬品、家庭用品等の主要な構成要素となっている。したがってこれらに関する基礎的な研究は極めて重要であり、古くから研究対象とされているが、その構造やダイナミクスの立場から本格的な研究が行われるようになったのは比較的最近のことである。本研究室では、以下の観点からソフトマターの物性を記述する統一的な概念を見出すことを目指している。

(1) 両親媒性分子集合体の構造とダイナミクス

界面活性剤や脂質などの両親媒性分子は、水との親和性が正反対の2つの官能基を有しているため、水中では分子同士が一定の方向に配向し、条件に応じて多様なモルホロジーと機能を持った集合体へと組織化する。これらの集合体の特徴のひとつは、用いる空間と時間のスケールに応じて、異なる構造とダイナミクスが見えてくることである。本研究室では、静的・動的な光散乱、X線小角散乱(SAXS)、X線小角散乱/ずり応力同時測定(Rheo-SAXS)、小角光散乱/ずり応力同時測定(Rheo-SALS)、光学顕微鏡観察等の手法を駆使することにより、広範囲の空間および時間スケールにわたって平均構造とダイナミクスの両面を調べている。

(2) ソフトマターの理論的研究

コロイド、高分子、液晶、膜、ゲルなどのいわゆる「ソフトマター」と呼ばれる物質を対象とする研究は、非線形や非平衡科学の新しい問題と密接に関連している。これらの物質に共通する点は、物質中にメソスコピックな長さのスケールの構造が存在することであり、粗視化した物の見方が重要になる。本研究室では、ソフトマターの構造、相挙動、ダイナミクスについて、解析的手法や計算機シミュレーションを用いて研究を行っている。

I. 原著論文

01. Swaminath Bharadwaj, P. B. Sunil Kumar, S. Komura, and Abhijit P. Deshpande, "Spherically symmetric solvent is sufficient to explain lower critical solution temperature in polymer solutions", *Macromol. Theory Simul.*, 26, 1600073 (11pp) (2017).
02. K. Yasuda, R. Okamoto, S. Komura, and A. S. Mikhailov, "Localization and diffusion of tracer particles in viscoelastic media with active force dipoles", *EPL*, 117, 38001 (7pp) (2017).
03. K. Yasuda, R. Okamoto, and S. Komura,

- “Anomalous diffusion in viscoelastic media with active force dipoles” ,
Phys. Rev. E, 95, 032417 (14pp) (2017).
04. K. Yasuda, R. Okamoto, and S. Komura,
“Swimmer-microrheology” ,
J. Phys. Soc. Jpn., 86, 043801 (4pp) (2017)
05. Y. Hosaka, K. Yasuda, R. Okamoto, and S. Komura,
“Lateral diffusion induced by active proteins in a biomembranes” ,
Phys. Rev. E, 95, 052407 (10pp) (2017).
06. R. Okamoto, S. Komura, and J.-B. Fournier,
“Dynamics of a bilayer membrane coupled to a two-dimensional cytoskeleton: Scale transfers of membrane deformations” ,
Phys. Rev. E, 96, 012416 (10pp) (2017).
07. K. Yasuda, Y. Hosaka, M. Kuroda, R. Okamoto, and S. Komura,
“Elastic three-sphere microswimmer in a viscous fluid” ,
J. Phys. Soc. Jpn., 86, 093801 (4pp) (2017).
08. Y. Hosaka, K. Yasuda, I. Sou, R. Okamoto, S. Komura,
“Thermally driven elastic micromachines” ,
J. Phys. Soc. Jpn., 86, 113801 (4pp) (2017).
09. I. Sou, R. Okamoto, S. Komura, and J. Wolff,
“Coexistences of lamellar phases in ternary surfactant solutions” ,
Soft Materials, 15, 272-281 (2017).
10. T. Hoshino, S. Komura, and D. Andelman,
“Permeation through a lamellar stack of lipid mixtures” ,
EPL, 120, 18004 (7pp) (2017).
11. Y. Kawabata, R. Bradbury, S. Kugizaki, K. Weigandt, Y. B. Melnichenko, K. Sadakane, N. L. Yamada, H. Endo, M. Nagao, H. Seto,
“Effect of interlamellar interactions on shear induced multilamellar vesicle formation”
J. Chem. Phys., 147, 034905 (10pp) (2017).
12. Y. Kawabata, K. Ohmoto, A. Murakami, Y. Takahashi, Y. Yamauchi, T. Kato,
“Hydrophilic and hydrophobic tail effects on vesicle formation in a non-ionic surfactant aqueous solution below the Krafft temperature”
Colloids and Surfaces A, 520, 779-787 (2017).

II. 著書、総説等

Ⅲ. 学会発表、講演等

01. 川端庸平, 加藤直
「高い親水性を有する非イオン界面活性剤水溶液のクラフト転移」
日本化学会第 97 春季年会 (2017. 3, 横浜)
02. 尾崎亮太, 川端庸平, 加藤直
「非イオン界面活性剤ベシクルの 2 分子膜に対するアルカンの添加効果」
日本化学会第 97 春季年会 (2017. 3, 横浜)
03. 正岡幸子, 川端庸平, 加藤直
「ジエステル型カチオン界面活性剤二分子膜の融点以下におけるノニオン界面活性剤
添加効果」
日本化学会第 97 春季年会 (2017. 3, 横浜)
04. K. Suzuki, Y. Kawabata, and T. Kato
“Simultaneous measurements of rheology/small-angle light scattering on the
lamellar phase of a nonionic surfactant and re-entrant lamellar/onion transition
with varying temperature”
日本化学会第 97 春季年会 (2017. 3, 横浜)
05. 安田健人, 岡本隆一, 好村滋行, A. S. Mikhailov
「Anomalous diffusion in viscoelastic media with active force dipoles」
日本物理学会第 72 回年次大会 (2017. 3, 大阪)
06. 好村滋行, 安田健人, T. V. Sachin Krishnan, 岡本隆一
「Membrane fluctuations in non-equilibrium environments」
日本物理学会第 72 回年次大会 (2017. 3, 大阪)
07. Y. Hosaka, K. Yasuda, R. Okamoto, S. Komura
“Lateral diffusion induced by active proteins in a biomembrane”
新学術領域研究「ゆらぎと構造」第 4 回領域研究会 (2017. 6, 東京)
08. T. Hoshino, S. Komura, D. Andelman
“Permeation through a lamellar stack of lipid mixtures”
新学術領域研究「ゆらぎと構造」第 4 回領域研究会 (2017. 6, 東京)
09. S. Komura, K. Yasuda, R. Okamoto, A. S. Mikhailov
“Anomalous diffusion in viscoelastic media with active force dipoles”
新学術領域研究「ゆらぎと構造」第 4 回領域研究会 (2017. 6, 東京)
10. R. Okamoto, S. Komura, J.-B. Fournier

“Dynamics of a bilayer membrane coupled to a two-dimensional cytoskeleton:
scale transfers of membrane deformations”

新学術領域研究「ゆらぎと構造」第4回領域研究会 (2017.6, 東京)

11. I. Sou, R. Okamoto, S. Komura, J. Wolff

“Coexistences of lamellar phases in ternary surfactant solutions”

新学術領域研究「ゆらぎと構造」第4回領域研究会 (2017.6, 東京)

12. Y. Umemura, T. Hoshino, S. Komura

“Morphogenesis of small intestinal villus”

新学術領域研究「ゆらぎと構造」第4回領域研究会 (2017.6, 東京)

13. K. Yasuda, R. Okamoto, S. Komura

“Swimmer-microrheology”

新学術領域研究「ゆらぎと構造」第4回領域研究会 (2017.6, 東京)

14. 加藤直

「基礎からの静的・動的散乱と X 線小角散乱」

日本油化学会 界面実践講座 2017 (2017.7, 東京)

15. S. Komura

“Swmmier-microrheology”

トロント大学セミナー (2017.8, トロント)

16. 関谷智之, 川端庸平, 加藤直

「長鎖陽イオン性界面活性剤水溶液のクラフト転移に伴う構造色とアルキル鎖長の効果」

第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)

17. 三好樹, 川端庸平, 岡田賢, 出口茂, 加藤直

「n-hexadecane を内包したナノエマルジョンの融点以下の構造とその温度依存性」

第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)

18. 鈴木健斗, 川端庸平, 加藤直

「低ずり速度領域で形成されるラメラ/オニオン中間構造」

第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)

19. 加藤祐樹, 川端庸平, 加藤直

「非イオン界面活性剤水溶液のクラフト転移に対するフッ素系界面活性剤添加効果」

第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)

20. 石井佑果, 川端庸平, 加藤直

「リン脂質/非イオン界面活性剤混合系におけるクラフト転移と膜構造」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)

21. 安田健人, 岡本隆一, 好村滋行
「Swimmer-microrheology」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
22. 星野拓馬, 好村滋行, D. Andelman
「Permeation through a lamellar stack of lipid mixtures」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
23. 曹勇, 好村滋行, J. Wolff
「Coexistences of lamellar phases in ternary surfactant solutions」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
24. 安田健人, 好村滋行
「Anomalous diffusion in viscoelastic media with active force dipoles」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
25. 梅村侑生, 好村滋行
「Morphogenesis of small intestinal villus」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
26. 保阪 悠人, 好村滋行, A. S. Mikhailov
「Stochastic properties of force dipoles」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
27. 山下 晃史, 好村滋行
「Spreading dynamics of biological tissues」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
28. 太田 結, 好村滋行
「Three-disk swimmer in a two-dimensional fluid membrane」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
29. 黒田 瑞季, 好村滋行
「Collective dynamics of two three-sphere swimmers」
第16回関東ソフトマター研究会 (2017.8, 東京)
30. 川端庸平, 長尾道弘, 瀬戸秀紀
「ざり流動励起マルチラメラベシクル形成における膜間相互作用の役割」
第68回コロイドおよび界面化学討論会 (2017.9, 神戸)

31. 尾崎亮太, 川端庸平, 加藤直
「アルカン添加による非イオン界面活性剤ベシクルの構造変化」
第 68 回コロイドおよび界面化学討論会 (2017. 9, 神戸)
32. 関谷智之, 川端庸平, 加藤直
「長鎖陽イオン性界面活性剤水溶液のクラフト転移に伴う構造色とアルキル鎖長の効果」
第 68 回コロイドおよび界面化学討論会 (2017. 9, 神戸)
33. 鈴木健斗, 川端庸平, 菜嶋健司, 大野宏策, 加藤直
「低ずり速度領域で形成されるラメラ/オニオン中間構造」
第 68 回コロイドおよび界面化学討論会 (2017. 9, 神戸)
34. 川端庸平, 加藤直
「非イオン界面活性剤水溶液クラフト温度以下のゲル相に対する電解質添加効果」
第 68 回コロイドおよび界面化学討論会 (2017. 9, 神戸)
35. 稲葉堯通, 武仲能子, 川端庸平, 加藤直
「カチオン性界面活性剤混合水溶液における金ナノロッドの合成 : クラフト温度以下のラメラ構造の影響」
第 68 回コロイドおよび界面化学討論会 (2017. 9, 神戸)
36. 三好樹, 川端庸平, 岡田賢, 出口茂, 加藤直
「n-hexadecane を内包したナノエマルションの融点以下の構造とその温度依存性」
第 68 回コロイドおよび界面化学討論会 (2017. 9, 神戸)
37. 正岡幸子, 川端庸平, 加藤直
「ジエステル型カチオン界面活性剤希薄水溶液に対するノニオン界面活性剤添加効果」
第 68 回コロイドおよび界面化学討論会 (2017. 9, 神戸)
38. T. Kato
“Shear-Induced Structural Transition in the Surfactant Lyotropic Phase”
2nd Asian Conference on Oleo Science (ACOS 2017) (Plenary Lecture) (2017. 9, Tokyo).
39. 好村滋行
“Some new aspects of three-sphere swimmers”
新学術領域研究「アクティブマターの概念で繋ぐ生命機能の階層性」(2017. 9, 函館)
40. 好村滋行
“Some new aspects of three-sphere swimmers”

第7回ソフトマター研究会 (2017. 10, 京都)

41. 好村滋行
「ソフトマターからバイオマターへ」
首都大オープンユニバーシティ特別講座 (2017. 10, 東京)
42. 好村滋行
“Swimming in viscoelastic structured fluids”
数理解析研究所「生物流体力学における基礎問題と応用問題」 (2017. 10, 京都)
43. 好村滋行
「遊泳するマイクロマシンのゆらぎと構造」
第11回 物性科学領域横断研究会(領域合同研究会) (2017. 11, 柏)
44. Y. Hosaka, S. Komura, A. S. Mikhailov
“Stochastic Properties of an Active Force Dipole”
Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017. 11, 仙台)
45. T. Hoshino, S. Komura, H.-Y. Chen, K.-A. Wu
“Pattern Formation of Skin Cancer: Effects of Hydrodynamic Interactions”
Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017. 11, 仙台)
46. S. Komura, K. Yasuda, R. Okamoto, A. S. Mikhailov
“Anomalous Diffusion in Viscoelastic Media with Active Force Dipoles”
Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017. 11, 仙台)
47. M. Kuroda, K. Yasuda, Y. Hosaka, R. Okamoto, S. Komura
“Elastic Three-Sphere Microswimmer in a Viscous Fluid”
Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017. 11, 仙台)
48. C.-C. Liang, K. Yasuda, S. Komura, H.-Y. Chen
“Dynamics of the Cell Membrane Coupled to Cytoskeleton”
Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017. 11, 仙台)
49. I. Sou, R. Okamoto, S. Komura, J. Wolff
“Coexistences of Lamellar Phases in Ternary Surfactant Solutions”
Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017. 11, 仙台)
50. Y. Umemura, T. Hoshino, S. Komura
“Morphogenesis of Small Intestinal Villus”
Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017. 11, 仙台)

51. K. Yasuda, R. Okamoto, S. Komura

“Swimmer-Microrheology”

Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017 (2017.11, 仙台)

52. S. Komura

“Swimmer-microrheology”

Active Matter Miniworkshop (2017.12, 台湾)

反応物理化学研究室

原子が数個から数百個集合した物質はクラスターと呼ばれる。クラスターは原子分子のように孤立した物質相とは異なることはもちろんのこと、固体状態ともその性質が異なっており、「新物質相」としての特性が幅広い分野から注目されている。実際 1990 年夏にサッカーボール型炭素分子（炭素クラスター） C_{60} が大量合成・分離精製され、その結果として C_{60} 錯体の超伝導発現や炭素ナノチューブの発見が物質化学に与えた衝撃は大きい。また、宇宙空間中には未発見の炭素やケイ素のクラスターが漂っていると予想され、こうしたクラスターの発見やその性質の解明は、生命発生の前駆過程であると考えられている物質進化の理解の鍵をにぎっている。当研究室ではクラスターの構造や反応ダイナミクスを調べることにより、ナノ、サブナノメートル領域における新しい物理・化学的描像の構築に寄与することをめざすとともに、フラーレン類や炭素クラスターの生成機構の解明や、新規ナノ物質の創生をめざし、以下の研究を進めている。

1. 孤立イオンの輻射冷却の観測と冷イオンの衝突・分光実験

冷イオンの構造と反応および準安定イオンの緩和過程を調べることを目的として、超高真空のリング (TMU E-ring) に、炭素クラスターをはじめとする種々のイオンを周回させ、イオンと原子、分子の衝突実験やレーザー分光を行っている。

2. 多価イオン衝突によるクーロン爆発実験

ECR イオン源から引き出した多価イオンと分子、クラスターの衝突実験を行い、多電子移行反応によって生成した多価分子イオンの超高速分解過程（クーロン爆発）を研究している。爆発断片の飛跡を詳細に解析することによりターゲット分子の構造（スナップショット）を得ることを目的にしている。

3. 高密度励起による炭素クラスター、ポリインの生成実験

グラファイトや炭化水素分子をパルスレーザーで励起して、フラーレン、ポリインをはじめとする炭素クラスター誘導体の生成実験を行っている。

4. 質量分析に係る技術開発

高感度イオン検出器を開発し、その性能評価および多粒子同時計測実験への応用を進めている。また、ガラス細管によるイオンビーム偏向実験を行っている。

I. 原著論文

01. Y. Taguchi, H. Endo, T. Kodama, Y. Achiba, H. Shiromaru, T. Wakabayashi, B. Wales, J. H. Sanderson
“Polyynes formation by ns and fs laser induced breakdown in hydrocarbon gas flow”
CARBON, **115**, 169-174 (2017).
02. A. Ramadhan, M. Wesolowski, T. Wakabayashi, H. Shiromaru, T. Fujino, T. Kodama, W. Duley, J. Sanderson
“Synthesis of hydrogen- and methyl-capped long-chain polyynes by intense ultrashort laser pulse irradiation of toluene”
CARBON, **118**, 680 - 685 (2017).
03. A. Mery, A. Agnihotri, J. Douady, X. Flechard, B. Gervais, S. Guillous, W. Iskandar, E. Jacquet, J. Matsumoto, J. Rangama, F. Ropars, C.P. Safvan, H. Shiromaru, D. Zanuttini, A. Cassimi
“Role of a neighbor molecule in the fragmentation dynamics of nitrogen dimers”
Phys. Rev. Lett., **118**, 233402 (2017).
04. M. Yoshida, T. Furukawa, J. Matsumoto, H. Tanuma, T. Azuma, H. Shiromaru, K. Hansen
“Detection of recurrent fluorescence photons emitted from C₄”
J. Phys: Conf. Ser. **875**, 012017 (2017).

II. 総説等

III. 学会発表

01. Haruka Suzuki, Yuki Taguchi, Takeshi Kodama, Yohji Achiba, Haruo Shiromaru
“Absolute yield of fullerene formed by graphite laser ablation at medium-high ambient temperatures”
第 52 回 フラワーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3 東京)
02. Yuki Taguchi, Hitomi Endo, Takeshi Kodama, Tomonari Wakabayashi, Yohji Achiba, Haruo Shiromaru, Benji Wales, Joseph Sanderson
“Polyynes formation by laser induced breakdown in hydrocarbon gas flow”
第 52 回 フラワーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2017.3 東京)
03. 横川貴一, 高橋航大, 松本淳, 城丸春夫, 小島隆夫, 池田時浩
ガラス直管による多価イオンビームの偏向における抵抗率と適合イオン電流の相関
日本物理学会 第 72 回年次大会 (2017.3 豊中)
04. 河野直子, 古川武, 松本淳, 田沼肇, 東俊行 A, Hansen Klavs B, C, 城丸春夫
孤立 C₁₀ 分子負イオンの冷却における構造異性体の寄与
日本物理学会 第 72 回年次大会 (2017.3 豊中)
05. 柳ヶ瀬大將, 古川武, 田沼肇, 城丸春夫, 松本淳, 東俊行 A
極低温イオン源の冷却部シミュレーション及びイオン発生実験
日本物理学会 第 72 回年次大会 (2017.3 豊中)
06. 松本淳, 斎場隆二郎, 城丸春夫

卓上静電型イオン蓄積リングの作製Ⅱ
日本物理学会 第72回年次大会 (2017.3 豊中)

07. Jun Matsumoto, Ryojiro Saiba, Haruo Shiromaru,
“First ion storage in a table-top electrostatic storage ring (μE -ring)”
7th International Workshop on Electrostatic Storage Device (2017. 6, Lyon)
08. Ryujiro Saiba, Jun Matsumoto, Haruo Shiromaru,
“Diagnosis of the ion beam in a table-top electrostatic storage ring (μE -ring)”
7th International Workshop on Electrostatic Storage Device (2017. 6, Lyon)
09. Hiromasa Yanagase, Takeshi Furukawa, Hajime Tanuma, Haruo Shiromaru, Jun Matsumoto,
Toshiyuki Azuma
“Development of a cryogenic linear RF ion trap for the TMU E-Ring”
30th International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions (2017.8, Cairns)
10. Jun Matsumoto, Ryujiro Saiba, Haruo Shiromaru
“Storage test of a table-top electrostatic ion storage ring”
30th International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions (2017.8, Cairns)
11. Xavier Fléchar, A. Méry, A. N. Agnihotri, J. Douady, B. Gervais, S. Guillous, W. Iskandar,
E. Jacquet, J. Matsumoto, J. Rangama, F. Ropars, C.P. Safvan, H. Shiromaru, D. Zanuttini, A.
Cassimi
“Fragmentation dynamics of nitrogen dimers: role of the neighbor and access to the 3D
geometry”
30th International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions (2017.8, Cairns)
12. Ryuta Suzuki, Naoko Kono, Reito Andou, Takeshi Furukawa, Jun Matsumoto, Hajime
Tanuma, Toshiyuki Azuma, Klavs Hansen, Haruo Shiromaru
“Vibrational radiative cooling of isolated C_4^- and C_6^- ”
30th International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions (2017.8, Cairns)
13. Mai Yoshida, Takeshi Furukawa, Jun Matsumoto, Hajime Tanuma, Toshiyuki Azuma, Haruo
Shiromaru, Klavs Hansen
“Detection of recurrent fluorescence photons emitted from C_4^- ”
30th International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions (2017.8, Cairns)
14. Kiichi Yokokawa, Jun Matsumoto, Haruo Shiromaru, Pragya Bhatt, Herendra Kumar,
Cholakka Safvan
“Multiple ionization and dissociation of ethylene induced by collision of Xe^{9+} ”
30th International Conference on Photonic Electronic and Atomic Collisions (2017.8, Cairns)
15. 横川貴一, 高橋航太, 松本淳, 城丸春夫, 池田時浩, 小島隆夫
ガラス直管による多価イオンビームの偏向におけるエネルギー依存性と帯電ダイナ
ミクス
日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017.9 岩手)
16. 栗山みさき, 古川武, 松本淳, 田沼肇, 東俊行, 城丸春夫
TMU E-ring におけるグリシン正イオンの蓄積実験
日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017.9 岩手)

17. 吉田茉生, 古川武, 松本淳, 田沼肇, 東俊行, 城丸春夫, Klavs. Hansen
炭素クラスター負イオン C_4^- および C_6^- のポアンカレ蛍光測定
日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017.9 岩手)
18. 的場史朗, 小泉哲夫, 高橋果林, 城丸春夫
コーティングテーパー型マイクロチャンネルプレートの検出効率
日本物理学会 2017 年秋季大会 (2017.9 岩手)
19. 高橋航大
低速多価イオン衝突における CO_2 の解離ダイナミクス
原子衝突学会第 42 回年会 (2017.09 東京)
20. 齋場隆二郎
卓上型イオン蓄積リング(μE -ring)による Ar^+ イオン蓄積実験
原子衝突学会第 42 回年会 (2017.09 東京)
21. 栗山みさき, 古川武, 松本淳, 田沼肇, 東俊行, 城丸春夫
グリシン正イオンおよびフラグメントイオンの蓄積実験
原子衝突学会第 42 回年会 (2017.09 東京)

有機合成化学研究室

近代有機化学は、従来の炭素中心の化学から、典型元素や遷移金属などの特性を巧みに利用した新たな物質化学へと発展し、飛躍的な反応性向上および機能性開発が成し遂げられている。特に周期表で第3周期以降の典型元素を利用する化学（高周期典型元素の化学）は著しい発展を遂げ、今までの有機化学では成しえなかった結合様式および反応性の発掘により、新たな有機化合物が多種生み出されつつある。当研究室では、有機合成化学、構造有機化学および物理有機化学を基盤として、新規な高周期典型元素化合物、主に周期表第16族に属するカルコゲン元素（硫黄、セレン、テルル）を中心とした化合物の合成、構造と性質に関する研究を行っている。今年度の主な研究内容は以下の通りである。

- (1) <ベンゼン環を有するチアクラウンエーテルの合成、構造と錯形成> 継続テーマとして、パラ置換ベンゼン環とシス二重結合を交互に導入した種々のサイズの大環状チアクラウンエーテルの合成に成功し、その構造をX線結晶構造解析により明らかにした。また、それらの基本的物性として、吸収スペクトルおよび酸化挙動を調べ、物性の違いを明らかにすると共に、遷移金属イオンとの錯形成を試み、新規な白金錯体の合成に成功した。
- (2) <キラルチアクラウンエーテルの合成と物性> チアクラウンエーテルの研究の展開として、アルキル鎖上にキラルな配位子を有するチアクラウンエーテルの合成に取り組み、種々のサイズの本ズチアクラウンエーテルの合成に成功した。その内、いくつかの結晶構造を明らかにすることができた。また、理論計算によるコンホメーション解析およびこれらの化合物の円二色性スペクトルを測定し、サイズの異なるこれら大環状化合物のコンホメーションの剛直性（柔軟性）を考察した。
- (3) <スルホニウム部位を有する不飽和チアクラウンエーテルの合成> 15 および 18 員環不飽和チアクラウンエーテルのスルフィド部位のメチル化反応を検討した。メチル化剤としてメチルトリフラートを1当量、2当量用いたところ、対応するモノメチル化体、ジメチル化体を得ることができた。飽和チアクラウンエーテルの場合、すべてのスルフィド部位をメチル化することができたのに対し、不飽和チアクラウンエーテルの場合にはトリメチル化体以上の生成物は確認できなかった。この理由について、理論計算により静電ポテンシャルや電荷密度を求めることにより考察した。
- (4) <ビス（トリアルキルスルホニウム塩）の合成> スルホニウム部位をメチレン鎖で架橋したビス（トリアルキルスルホニウム塩）の合成を検討した。ジヨードメタンとトリフルオロメタンスルホン酸銀との反応によりメチレンジトリフラートを調整した後、テトラヒドロチオフェンとの反応を行った。その結果、白色固体が生成し、これを酢酸エチルで再結晶したところ、針状結晶が得られた。種々のスペクトル測定、およびX線結晶構造解析の結果、スルホニウム部位がメチレン鎖で架橋された目的化合物であることがわかった。

I. 原著論文

01. Hossain, M. A.; Yamashita, K.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.; Goto, K.; Sugiura, K.

“Thiophene-Fused Dinaphthopentaphenes: Versatile Applications of 1,2-Bis(pyren-2-yl)aromatics in the Synthesis of π -Expanded Molecules”
Chemistry Select 2017, 2, 4342-4347.

02. Tomita, S.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.; Goto, K.; Sugiura, K.

“Basic Photophysical Properties of *meso*-Bis(pyren-2-yl)porphyrin: An Isomer of Pyrene-Substituted Porphyrins”
Synthesis 2017, 49, 2182-2186.

II. 著書、総説等

なし

III. 学会発表、講演等

01. Ando, R.; Nabeshima, K.; Sugiura, K.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.

「環構造に不斉を有するベンゾチアクラウンエーテルの合成と構造」
日本化学会第97春季年会 (2017, 3, 東京)

02. Fujii, R.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.; Akiyama, K.; Goto, K.; Yamashita, K.; Nishikawa, H.; Sugiura, K.

「3,3',5,5'-テトラキス(3-チエニル)ジフェノキノンの合成と性質」
日本化学会第97春季年会 (2017, 3, 東京)

03. Akimoto, H.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.; Okuda, K.; Imai, Y.; Goto, K.; Sugiura, K.

「2-メチルピレンを構成単位とした多量体の合成、光学分割、及びキロプティカル特性」
日本化学会第97春季年会 (2017, 3, 東京)

04. Kamimaki, R.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.

「p-置換ベンゼン環を有する不飽和チアクラウンエーテルの合成」
第7回CSJ化学フェスタ (2017, 10, 東京)

05. Nakashizuka, M.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.

「スルホニウム部位を有する不飽和チアクラウンエーテルの合成」

第7回CSJ化学フェスタ (2017, 10, 東京)

06. Murakami, T.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.
「1,2-ジチエットと2,3-ジメチルブタジエンとの熱反応及び光化学反応」
第7回CSJ化学フェスタ (2017, 10, 東京)
07. Hirabayashi, K.; Sugano, N.; Nakashizuka, M.; Yaginuma, T.; Shimizu, T.
「スルホニウム部位を有する飽和および不飽和チアクラウンエーテルの合成」
第44回有機典型元素化学討論会 (2017, 12, 東京)
08. Ando, R.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.
「*o*-置換ベンゼン環およびシクロヘキシル部位を有する環状チオエーテルの合成」
第44回有機典型元素化学討論会 (2017, 12, 東京)
09. Kamimaki, R.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.
「*p*-置換ベンゼン環で架橋した不飽和チアクラウンエーテルの合成と錯形成」
第44回有機典型元素化学討論会 (2017, 12, 東京)
10. Nakashizuka, M.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.
「不飽和チアクラウンエーテルのメチル化反応」
第44回有機典型元素化学討論会 (2017, 12, 東京)
11. Murakami, T.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.
「1,2-ジチエットと共役ジエンとの熱反応及び光反応」
第44回有機典型元素化学討論会 (2017, 12, 東京)

理論・計算化学研究室

化学結合や分子物性を原子核と電子の運動状態に立ち帰って解明しようとする努力は量子論が出現した直後から現在まで途切れなく続けられており、量子化学・理論化学・計算化学という研究分野を成立させた。最近では、コンピュータの飛躍的な発達にともない、複雑な化学現象の精密な理論的予測が可能となってきた。大学の研究室だけでなく、化学材料・電子機器メーカー、製薬会社の研究所などにおいても、化学計算シミュレーションが活用されつつある。本研究室では、電子相関理論や相対論を考慮した精密で新しい量子化学の理論を提案し、同時に計算効率の高い実用的な解法を開発している。また、国内外の実験グループと密接に連携した研究も進めており、数値的な実験の解析だけでなく、なぜそのような実験結果を与えるかというシナリオの提供や、実験で何がどの程度の値で測定できるかを定量的に予測することによって実験を先導することを目指している。主要なテーマは以下の通りである。

- (1) 相対論および電子相関理論を考慮した電子状態理論の構築
- (2) 重原子を含む分子の電磁氣的分子物性に関する理論的研究
- (3) 遷移金属錯体を使った触媒反応メカニズムの理論解析
- (4) CP対称性破れを示す電子EDM探索のための相対論的電子状態理論の開発
- (5) 第一原理シミュレーションによる星間空間の化学進化メカニズムの解明

I 原著論文

01. Marisa Nakada, Takuya Kuwabara, Shunsuke Furukawa, Masahiko Hada, Mao Minoura and Masaichi Saito
“Synthesis and Reactivity of a Ruthenocene-type Complex Bearing an Aromatic π -Ligand with the Heaviest Group 14 Element”
Chemical Science, **8**, 2092-2097 (2017).
02. Masaichi Saito, Tomoki Akiba, Shunsuke Furukawa, Mao Minoura, Masahiko Hada, and Hiroshi Y. Yoshikawa
“Anisotropic Crystals Based on Main-group Coordination Polymer with Alignment of Rigid π -Frameworks”
Organometallics, **36** (14), 2487–2490 (2017).
03. A. Sunaga, M. Abe, M. Hada, B. P Das
“Analysis of large effective electric fields of weakly polar molecules for electron electric-dipole-moment searches”
Phys. Rev. A **95**, 012502 (2017).

04. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Takeshi Kodama, Masahiko Hada
“Theoretical Insights into the Electronic Structures and Stability of Dimetallo- fullerenes $M_2@I_h-C_{80}$ ”
J. Phys. Chem. C, **121** (33), 18169–18177 (2017).
05. Shohei Kanno, Yutaka Imamura, Akinori Saeki, Masahiko Hada
“Rotational Energy Barriers and Relaxation Times of the Organic Cation in Cubic Methylammonium Lead/Tin Halide Perovskites from First Principles”
J. Phys. Chem. C, **121** (26), 14051–14059 (2017).
06. Shohei Kanno, Yutaka Imamura, Masahiko Hada
“Theoretical Study on Rotational Controllability of Organic Cations in Organic–Inorganic Hybrid Perovskites: Hydrogen Bonds and Halogen Substitution”
J. Phys. Chem. C, **121** (47), 26188–26195 (2017).
07. Tsukasa Tada, Takanori Fukushima, Masahiko Hada, and Yutaka Majima
“Quantum Chemical Studies on Electron-Accepting Overcrowded Ethylene with a Polarizable Skeleton”
J. Phys. Chem. A, **121**, 7797-7806 (2017).
08. Jun Yi, Wenhong Yang, Wen-Hua Sun, Kotohiro Nomura, Masahiko Hada
“Vanadium NMR Chemical Shifts of (Imido)Vanadium(V) Dichloride Complexes with Imidazolin-2-Iminato and Imidazolidin-2-Iminato Ligands: A Cooperation With Quantum-Chemical Calculations and Multiple Linear Regression Analyses”
J. Phys. Chem. A, **121**(47), 9099-9105(2017).
09. Terutaka Yoshizawa and Masahiko Hada
“Calculations of nuclear magnetic shielding constants based on the exact two-component relativistic method”
J. Chem. Phys., **147**(5) 154104(1-8), (2017)
10. Archana Velloth, Yutaka Imamura, Takeshi Kodama, Masahiko Hada
“Quantum Chemical Study on Endohedral Heteronuclear Dimetallofullerene $M_1M_2@I_h-C_{80}$ Toward Molecular Design”
J. Phys. Chem. C, **121** (49), 27700–27708 (2017).

11. Yutaka Imamura, Motomichi Tashiro, Michio Katouda, Masahiko Hada
“Automatic High-Throughput Screening Scheme for Organic Photovoltaics: Estimating the Orbital Energies of Polymers from Oligomers and Evaluating the Photovoltaic Characteristics”
J. Phys. Chem. C, **121** (51), 28275-28286 (2017).
12. V. S. Prasanna, M. Abe, V. M. Bannur, B. P. Das.
“Theoretical analysis of effective electric fields in mercury monohalides “
Phys. Rev. A, **95**, 042513(1-6) (2017).
13. N. Nakatani and S. Guo
“Density matrix renormalization group (DMRG) method as a common tool for large active-space CASSCF/CASPT2 calculations”
J. Chem. Phys., **146**, 094102 (2017).

II 著書、総説等

01. 中谷直輝
「ユビキタス金属と複雑電子系の新しい計算化学」
触媒 59 巻 1 号, トピックス, 2017 年 1 月

III 学会発表、講演等

【国内】

01. Sunaga, M. Abe, B. P. Das, M. Hada
“Analysis of large effective electric fields of weakly polar molecules for eEDM searches”
The 9th International Workshop on Fundamental Physics Using Atoms (FPUA),
Jan.9-10, 2017, Katsura Campus, Kyoto University, Kyoto, Japan
02. T. Tsutsui, M. Abe, B. P. Das, M. Hada
“Effective electric field calculations of BiO molecule for the search of electron’s electric dipole moment”
The 9th International Workshop on Fundamental Physics Using Atoms (FPUA),
Jan.9-10, 2017, Katsura Campus, Kyoto University, Kyoto, Japan
03. Velloth, Y. Imamura, T. Kodama, M. Hada
“Electronic Structures and Stability of Metal Encapsulated C₈₀ fullerenes: Ab initio DFT study”
第 52 回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム、2017 年 3 月 1-3 日、東京大学伊藤国際学術研究センター

04. 今村穰、田代基慶、河東田道夫、波田雅彦
「有機薄膜太陽電池における新規ドナー材料の理論的探索」
第 64 回応用物理学会春季学術講演会、2017 年 3 月 14-17 日、パシフィコ横浜
05. 菅野翔平、今村穰、佐伯昭紀、波田雅彦
「有機無機ハイブリッドペロブスカイトにおける振動及び回転運動に関する理論的検討」
第 64 回応用物理学会春季学術講演会、2017 年 3 月 14-17 日、パシフィコ横浜
06. 今村穰、田代基慶、河東田道夫、波田雅彦
「計算科学を用いた有機薄膜太陽電池の新規材料の探索」
日本化学会第 97 春季年会、2017 年 3 月 16-19 日、慶応義塾大学 日吉キャンパス
07. 菅野翔平、今村穰、佐伯昭紀、波田雅彦
「ペロブスカイト太陽電池における有機カチオンの回転運動に関する理論的研究」
日本化学会第 97 春季年会、2017 年 3 月 16-19 日、慶応義塾大学 日吉キャンパス
08. Velloth ,Y. Imamura ,T. Kodama, M. Hada
“Theoretical study on the electronic structures and stability of metal encapsulated C₈₀ fullerenes”
日本化学会第 97 春季年会、2017 年 3 月 16-19 日、慶応義塾大学 日吉キャンパス
09. M. Abe
“Relativistic quantum chemistry and recent applications to physics and chemistry”
E3 projects seminar RIKEN, Apr. 4, 2017, RIKEN, Saitama, Japan
10. 中谷直輝
「演算子の行列積表現を利用した密度行列繰込み群と並列化」
第 20 回理論化学討論会、2017 年 5 月 16-18 日、京都大学 百周年時計台記念館
11. 今村穰、田代基慶、河東田道夫、波田雅彦
「計算科学による高効率な有機薄膜太陽電池材料の探索と設計」
第 20 回理論化学討論会、2017 年 5 月 16-18 日、京都大学 百周年時計台記念館
12. 砂賀彩光、阿部穰里、波田雅彦
「4 成分相対論にも適用可能な超微細結合定数の演算子に関する検討」
第 20 回理論化学討論会、2017 年 5 月 16-18 日、京都大学 百周年時計台記念館
13. 菅野翔平、今村穰、佐伯昭紀、波田雅彦
「ペロブスカイト太陽電池における有機カチオンの回転と無機骨格の振動に関する理論的解析」
第 20 回理論化学討論会、2017 年 5 月 16-18 日、京都大学 百周年時計台記念館
14. 村田レオ、今村穰、波田雅彦
「PbS 量子ドットにおけるパッシベーションに関する理論的解析」
第 20 回理論化学討論会、2017 年 5 月 16-18 日、京都大学 百周年時計台記念館
15. 砂賀彩光、阿部穰里、波田雅彦
「4 成分相対論における超微細結合定数の定式化に関する考察」
日本コンピュータ化学会 2017 年春季年会、2017 年 6 月 8-9 日、東京工業大学 大岡山キャンパス

16. 宮本優弥、波田雅彦
「外部磁場によって誘起される閉殻重原子分子の電子スピン密度の解析」
日本コンピュータ化学会 2017 年春季年会、2017 年 6 月 8-9 日、東京工業大学 大岡山キャンパス
17. 阿部穰里
「相対論的量子化学の理論開発と応用」
エネルギー・環境・資源問題の解決に繋がる革新的材料創出に向けた光・量子ビーム応用技術調査専門委員会第 1 回研究会、2017 年 7 月 24 日、東京理科大学
18. 菅野翔平、今村穰、波田雅彦
「有機-無機ペロブスカイトにおける有機カチオンの回転運動の制御可能性に関する理論的考察」
第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、2017 年 9 月 5-8 日、福岡国際会議場
19. 村田レオ、今村穰、波田雅彦
「ハロゲン修飾量子ドットの電子特性に関する理論的解析」
第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、2017 年 9 月 5-8 日、福岡国際会議場
20. 中谷直輝
「遷移金属錯体の内殻イオン化・内殻励起スペクトルに関する理論的研究」
第 11 回分子科学討論会、2017 年 9 月 15-18 日、東北大学 川内北キャンパス
21. 今村穰、田代基慶、河東田道夫
「次世代有機太陽電池に関する自動材料探索スキーム」
第 11 回分子科学討論会、2017 年 9 月 15-18 日、東北大学 川内北キャンパス
22. Velloth, Y. Imamura, T. Kodama, M. Hada
“Quantum-Chemical Studies on Lanthanide Encapsulated Metallofullerenes Towards Designing Functional Materials”
第 11 回分子科学討論会、2017 年 9 月 15-18 日、東北大学 川内北キャンパス
23. 砂賀彩光、阿部穰里、波田雅彦
「Dirac 理論に基づく超微細結合定数の解析 —外殻軌道における相対論効果の増幅現象—」
第 11 回分子科学討論会、2017 年 9 月 15-18 日、東北大学 川内北キャンパス
24. 宮本優弥、波田雅彦
「相対論を考慮した Coupled Perturbed 方程式への残差除去の適用」
第 11 回分子科学討論会、2017 年 9 月 15-18 日、東北大学 川内北キャンパス
25. 今村穰
「計算科学による有機半導体材料の探索と設計」
第 66 回高分子討論会、2017 年 9 月 20-22 日、愛媛大学 城北キャンパス
26. 菅野翔平、今村穰、佐伯昭紀、波田雅彦
「色素増感型及びペロブスカイト型太陽電池に関する量子化学的研究」
第 7 回 CSJ 化学フェスタ 2017、2017 年 10 月 17-19 日、タワーホール船堀
27. 今村穰、田代基慶、河東田道夫、波田雅彦
「計算科学・データ科学を用いた次世代太陽電池材料のアプローチ」

日本コンピュータ化学会 2017 年秋季年会、2017 年 10 月 21-22 日、くまもと県民交流館パレア

28. 中谷直輝

「第一原理計算による星間氷表面への原子・分子の吸着エネルギーの推定」

第 3 回宇宙生命計算科学ワークショップ、2017 年 11 月 20-21 日、筑波大学

29. 宮本優弥、波田雅彦「特異値分解を利用した相対論的 NMR 計算における HALA 効果の解析」第 17 回大つくば物理化学セミナー、2017 年 11 月 25-26 日、群馬大学草津セミナーハウス

30. 村田レオ、今村 穰、波田雅彦「ハロゲン配位 PbS 量子ドットの電子特性に関する理論的解析」第 17 回大つくば物理化学セミナー、2017 年 11 月 25-26 日、群馬大学草津セミナーハウス

31. 菅野翔平、今村穰、波田雅彦「ハイブリッドペロブスカイトの計算化学的研究：有機カチオンの回転運動障壁とインフォマティクスによる新規材料探索」第 2 回フロンティア太陽電池セミナー、2017 年 11 月 30 日-12 月 1 日、金沢大学 サテライト・プラザ

32. 村田レオ、今村穰、波田雅彦

「ハロゲン修飾された量子ドットの電子物性と光電変換機構の検討」

第 2 回フロンティア太陽電池セミナー、2017 年 11 月 30 日-12 月 1 日、金沢大学 サテライト・プラザ

33. 菅沼麻莉奈、今村穰、波田雅彦

「計算科学を用いた有機薄膜太陽電池の界面構造の検討と新規アクセプター材料の自動探索」

第 2 回フロンティア太陽電池セミナー、2017 年 11 月 30 日-12 月 1 日、金沢大学 サテライト・プラザ

34. N. Nakatani

“Density matrix renormalization group in practice: Applications to strongly correlated molecular systems”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

35. M. Abe

“Relativistic calculations of parity and time reversal violation effects in atoms and molecules”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

36. Y. Imamura

“Theoretical Study on Spin-Forbidden Transition for Dye-Sensitized Solar Cell”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

37. T.Yoshizawa, M.Hada

“Calculations of nuclear magnetic shielding constants based on the two-component normalized elimination of the small component method”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

38. Jun Yi , Wenhong Yang , Wen-Hua Sun , K.Nomura , M. Hada

“Vanadium NMR Chemical Shifts of (Imido) Vanadium(V) Dichloride Complexes: A Cooperation with QC Calculations and MLR Analyses”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

39. S. Kanno, Y. Imamura, M. Hada

“Theoretical Study on Rotational Controllability of Organic Cations in Hybrid Perovskites”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

40. Sunaga , M. Abe , B. P. Das , M. Hada

“Analysis of effective electric fields of heavy molecules for electron electric-dipole-moment searches”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

41. M.Miyamoto, M. Hada

“Analysis of HALA effects in Relativistic NMR Calculation Using Singular Value Decomposition”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

42. T. Tsutsui , M. Abe , A.Vutha , J.Ekman , B. P. Das , M. Hada

“P and T symmetry violation in diamagnetic molecules: Schiff moment enhancement calculations at relativistic CCSD level”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9, 2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

43. R. Murata, Y. Imamura, M. Hada

“Theoretical study on halogen-passivated quantum dot solar cell”

International Symposium “Theoretical Design of Materials with Innovative Functions Based on Element Strategy and Relativistic Electron Theory”, Dec. 8-9,

2017, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Japan

【海外】

01. Y. Imamura

“Material Design for Organic Photovoltaics using Computational Science”

The International Symposium on Pure & Applied Chemistry 2017 (ISPAC2017),
Jun. 8-10, 2017, Hotel Continental Saigon, Ho Chi Minh City, Vietnam

02. M. Hada

“Quantum-Chemical Calculations on NMR chemical shifts of Molecules Containing Lead”

The Collaborative Conference on Materials Research (CCMR2017), Jun. 26-30,
2017, International Convention Center Jeju, Jeju island, South Korea

03. S.Kanno , Y.Imamura , A.Saeki ,M. Had

“Quantum Chemical Studies on Dye-sensitized and Perovskite Solar Cells”

The Collaborative Conference on Materials Research (CCMR2017), Jun. 26-30,
2017, International Convention Center Jeju, Jeju island, South Korea

04. M. Abe , F. Moynier , K. Asai , K.Ono , P.Sossi , Y. Zempo , Y.Imamura , M. Hada

“Theoretical Study of reduced partitioning function ratios of Zn-bearing minerals
and metals”

Goldschmidt 2017, Aug.13-18, 2017, Le Palais des Congres de Paris, Paris, France

05. Sunaga, M. Abe, M. Hada

“Analysis of hyperfine structure in Dirac theory: anomalous increase of relativistic
contraction of outer orbitals”

The 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and
Computational Chemists(WATOC), Aug.27-Sep.1, 2017, Gasteig Cultural Center,
Munich, Germany

06. T. Tsutsui , M. Abe , B. P. Das , M. Hada

“Effective electric field for electron’s electric dipole moment in BiO molecule:
fcomparison between Dirac CCSD and CASPT2”

The 12th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element
Chemistry and Physics(REHE), Sep.2-6, 2017, Old aula, Marburg, Germany

07. Sunaga, M. Abe, M. Hada

“Anomalous increase of relativistic effect for hyperfine coupling constant of outer
orbitals”

The 12th International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element
Chemistry and Physics(REHE), Sep.2-6, 2017, Old aula, Marburg, Germany

08. Jun Yi , Wenhong Yang , Wen-Hua Sun , K.Nomura , M. Hada

“Vanadium NMR Chemical shifts in Vanadium Complex Catalyst:A Cooperation of
Quantum-Chemical Calculation and Multiple Linear Regression analysis”

Advances in Polyolefins XI (APO-2017), Sep. 24-27, 2017, Hilton Sonoma Wine

Country, Santa Rosa, California, USA

09. M. Hada

“Relativistic Quantum-Chemical Calculations of NMR Chemical Shifts in Molecules Containing Heavy Metals”

The EMN Meeting on Computation and Theory 2017, Nov. 6-10, 2017, Hotel ibis One Central, Dubai, The United Arab Emirates

同位体化学研究室

同位体化学研究室はメスバウアーグループとフラーレングループから構成されている。メスバウアーグループでは主として鉄メスバウアー分光法を用いて機能性ガラスセラミックスの組成－物性－構造の相関解明研究を行っており、フラーレングループでは原子核壊変に伴い放出される放射線を用いた金属フラーレンの研究を行っている。いずれのグループも放射性同位元素(RI)を取扱うために必要な教育訓練を受けた後、RI 研究施設で実験を行う。以下に各研究グループの研究内容の詳細を示す。

テーマ1)メスバウアー分光法を用いた機能性材料のキャラクタリゼーション:

メスバウアー効果は ^{57}Co などから発生する γ 線を利用した共鳴吸収現象である。この手法によって、鉄イオンなどのメスバウアー吸収核とその周辺にあるイオンの間の化学結合の強さや電子の分布の偏り、磁性の有無などを非破壊で知ることが出来る。この特徴を生かし、メスバウアーグループでは導電性ガラスや赤外線透過ガラスおよび磁性体の組成－機能－物性の相関解明を行っている。最近取り組んでいる研究テーマ名を以下に示す。

- 1) 高い導電性を持つバナジン酸塩ガラスの開発とその高性能二次電池正極材への応用
- 2) 金属鉄および酸化ナノ粒子合成法の開発とその有機物分解機構の解明
- 3) 鉄イオン含有ケイ酸塩の構造と可視光応答型光触媒作用との相関解明

テーマ2)放射性同位元素を用いた金属フラーレンの研究:

サッカーボール型分子 C_{60} 等に代表されるフラーレン分子内部に金属原子を取り込んだ金属内包フラーレンは電子デバイスや医薬品としての応用が期待される分子の一つである。しかしながら金属フラーレンの生成量は非常に少なく、現在、応用研究はほとんど進んでいないのが現状である。我々は極少量でも非常に感度良く測定できる放射線を用いて金属内包フラーレンの性質を調べ、また、医学的に有用な放射性同位元素を罹患部位まで運搬するドラッグデリバリーとして水溶性金属フラーレンの合成を行い核医学的な応用を目指している。以下に研究テーマ名を示す。

- 1) 放射化学的手法を用いた金属内包フラーレンの基礎研究
- 2) 核医学的応用を目指した水溶性金属内包フラーレンの合成

I. 原著論文

1. S. Krehula, M. Ristić, M. Reissner, S. Kubuki, S. Musić, Synthesis and Properties of Indium-doped Hematite, *J. Alloys and Compounds*, 695, 1900–1907 (2017).
2. B. Kobzi, E. Kuzmann, K. Sinko, Z. Homonnay, M. Ristic, S. Krehula, T. Nishida, S. Kubuki, The relationship between Sn^{II} fraction and visible light activated photocatalytic activity of SnO_x-SiO₂ glass studied by Mössbauer spectroscopy, *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 311(3), 1859–1865(2017).
3. K. Sinkó, A. Meiszterics, J. Rohonczy, B. Kobzi, S. Kubuki, Effect of Phosphorus Precursor on the Structure of Bioactive Calcium Phosphate System, *Materials Science and Engineering C*, 73, 767–777(2017).
4. T. Nishida, Y. Izutsu, M. Fujimura, K. Osouda, Y. Otsuka, S. Kubuki and N. Oka, Highly conductive barium iron vanadate glass containing different metal oxides, *Pure and Applied Chemistry*, 89(4), 419–428 (2017).
5. S. Ishikawa, B. Kobzi, K. Sunakawa, S. Nemeth, A. Lengyel, E. Kuzmann, Z. Homonnay, T. Nishida and S. Kubuki, Visible-light activated photocatalytic effect of glass and glass ceramic prepared by recycling waste slag with hematite, *Pure and Applied Chemistry*, 89(4), 419–428 (2017).
6. T. Nishida, A. Morimoto, Y. Yamamoto, S. Kubuki, Waste water purification using new porous ceramic prepared by recycling waste glass and bamboo charcoal, *Applied Water Science*, DOI: 10.1007/s13201-017-0561-1 (2017).
7. B. Kobzi, Y. Watanabe, K. Akiyama, E. Kuzmann, Z. Homonnay, S. Krehula, M. Ristić, T. Nishida and S. Kubuki, ⁵⁷Fe-Mössbauer study and methylene blue decomposing effect of nanoparticle mixtures composed of metallic iron and maghemite, *J. Alloys. Compounds*, 722, 94–100 (2017).
8. T. Nishida, I. Furumoto, Y. Fujita, S. Kubuki, and N. Oka, Structural Relaxation and Electrical Conductivity of molybdovanadate glass, *J. Mater. Sci.: Mater Electron.* ; DOI: 10.1007/s10854-017-8191-9 (2017).

II. 著書、総説等

なし

III. 学会発表、講演等

<国際学会>

1. S. Krehula, M. Ristić, C. Wu, X. Li, L. Jiang, J. Wang, G. Sun, T. Zhang, M. Perović, M. Bošković, B. Antić, B. Kobzi, S. Kubuki and S. Musić, Microstructural properties and OER activity of hydrothermally prepared Ni-Fe (oxy) hydroxides, *3rd Mediterranean Conference on the Application of the Mössbauer Effect (MECAME2017)*, Jerusalem (Israel) (Jun. 5-7, 2017).
2. S. Kubuki, ⁵⁷Fe-Mössbauer study of iron-containing materials for environmental Purification, Sheffield Hallam University Seminar 2017, Sheffield (U. K.) (Jul. 20, 2017).
3. K. Sunakawa, S. Kubuki, Y. Aoki, T. D. Matsuda, R. Higashinaka, M. Perović, M. Bošković, E. Kuzmann, Z. Homonnay and T. Nishida, Local structure and magnetic properties of iron phosphate glass prepared by sol-gel method, *2nd International Conference on Phosphate Materials*, Oxford (U. K.) (Jul. 26-28, 2017).
4. S. Ishikawa, S. Kubuki, K. Akiyama, K. Sunakawa B. Kobzi, S. Nemeth, A. Lengyel, E. Kuzmann, Z. Homonnay, T. Nishida, ⁵⁷Fe-Mössbauer Study of Visible-light activated photocatalytic glass ceramics prepared from waste slag, *The 34th International Conference on the Application of the Mössbauer Effect (ICAME2017)*, St. Petersburg (Russia) (Sep. 3-8, 2017).
5. S. Shiba, K. Osouda, A. Kitajou, S. Okada, J. Okabayashi, T. Nishida, S. Kubuki, ⁵⁷Fe-Mössbauer Study of Sodium Phosphovanadate Glass, *The 34th International Conference on the Application of the Mössbauer Effect (ICAME2017)*, St. Petersburg (Russia) (Sep. 3-8, 2017).
6. K. Akiyama, S. Miyauchi, H. Kikunaga, S. Kubuki, Production and Properties of Promethium Metallofullerenes, *5th International Nuclear Chemistry Congress (5thINCC)*, Göteborg (Sweden) (Aug. 27- Sep. 1st, 2017).
7. K. Tanaka, K. Chiba, K. Akiyama, H. Haba, S. Kubuki, Development of metallofullerene separation by chemical reduction, *6th Asia-Pacific Symposium on Radiochemistry (APSORC2017)*, Jeju Island (Korea) (Sep. 17-22, 2017).

<国内学会>

1. 伊藤勇太・秋山和彦・久富木志郎・初川雄一
核反跳による Y@C₆₀ の合成.
第 61 回放射化学討論会 筑波大学 (茨城県つくば市)
(Sep. 2017)
2. 秋山和彦・宮内翔哉・雨倉啓・伊藤健太・菊永英寿・羽場宏光・久富木志郎
光核反応を用いた ¹⁴³Pm 製造と ¹⁴³Pm 内包フラーレンの合成及びその性質.

第 61 回放射化学討論会 筑波大学 (茨城県つくば市)
(Sep. 2017)

3. 田中康介・秋山和彦・羽場宏光・久富木志郎
化学的還元反応を用いた金属内包フラーレン分離の条件検討-2.
第 61 回放射化学討論会 筑波大学 (茨城県つくば市)
(Sep. 2017)
4. 柴祥矢, 久富木志郎, 秋山和彦, 西田哲明,
ナトリウムを含むバナジン酸塩ガラスの局所構造と電気的特性.
第 18 回メスバウアー分光研究会, 東京理科大学森戸記念館(東京都新宿区)
(Mar. 15, 16, 2017).
5. 石川史織, 久富木志郎, 秋山和彦, 砂川晃佑, Balazs Kobzi, Sylvia Nemeth, Attila Lengyel,
Ernő Kuzmann, Zoltán Homonnay, 西田哲明
スラグを原料とする鉄を含むアルミノケイ酸塩ガラスの可視光応答型光触媒効果
第 18 回メスバウアー分光研究会, 東京理科大学森戸記念館(東京都新宿区)
(Mar. 15, 16, 2017).
6. K. Sunakawa, S. Kubuki, K. Akiyama, Y. Aoki, T. Matsuda, R. Higashinaka, M. Perović,
M. Bošković, T. Nishida,
Local structure and magnetic properties of iron phosphate glass prepared by sol-gel
method,
第 18 回メスバウアー分光研究会, 東京理科大学森戸記念館(東京都新宿区)
(Mar. 15, 16, 2017).
7. B. Kobzi, S. Kubuki, E. Kuzmann, Z. Homonnay, M. Ristić, S. Krehula, T. Nishida,
Improved visible-light photocatalytic activity of $\text{SiO}_2\cdot\text{SnO}_x$ glass prepared using SnO_x
nanoparticles,
第 18 回メスバウアー分光研究会, 東京理科大学森戸記念館(東京都新宿区)
(Mar. 15, 16, 2017).
8. 藤田裕樹, 岡伸人, 久富木志郎, 西田哲明,
酸化スズを含む高導電性バナジン酸塩ガラスのメスバウアースペクトルと電気伝導度,
第 18 回メスバウアー分光研究会, 東京理科大学森戸記念館(東京都新宿区)
(Mar. 15, 16, 2017).
9. 西田哲明, 古本功, 藤田裕樹, 岡伸人, 久富木志郎,
高導電性モリブデンバナジン酸塩ガラスのメスバウアースペクトルと電気伝導度,
第 18 回メスバウアー分光研究会, 東京理科大学森戸記念館(東京都新宿区)
(Mar. 15, 16, 2017).

10. 久富木志郎, 襲田圭人, 柴祥矢,
Na イオン二次電池正極材としてのバナジン酸塩ガラスの開発
ダイナミックアライアンス G2 分科会, 北海道大学 電子科学研究所(札幌市北区)
(Jul.3-4, 2017).
11. 西田哲明, 古本功, 藤田裕樹, 岡伸人, 久富木志郎,
酸化モリブデンを含む導電性バナジン酸塩ガラスのメスバウアースペクトルと電気伝導度,
第 54 回アイソトープ・放射線研究発表会, 東京大学農学部(東京都文京区)
(Jul. 5-7, 2017).
12. K. Sunakawa, S. Kubuki, K. Akiyama, Y. Aoki, T. D. Matsuda, R. Higashinaka,
M. Perović, M. Bošković and T. Nishida,
ゾルゲル法により合成した鉄リン酸ガラスの磁氣的性質とメスバウアーパラメータの
相関,
第 54 回アイソトープ・放射線研究発表会, 東京大学農学部(東京都文京区)
(Jul. 5-7, 2017).
13. S. Shiba, S. Kubuki, K. Osouda, K. Akiyama, A. Kitajou, S. Okada, E. Kuzmann, Z. Homonnay,
N. Oka, T. Nishida,
Local Structure and Electrical Property of Sodium Vanadate Glass,
第 54 回アイソトープ・放射線研究発表会, 東京大学農学部(東京都文京区)
(Jul. 5-7, 2017).
14. S. Ishikawa, S. Kubuki, K. Sunakawa, B. Kobzi, S. Nemeth, A. Lengyel, E. Kuzmann,
Z. Homonnay, T. Nishida
Relationship between local structure and visible-light activated photocatalytic effect of glass
ceramics prepared from waste slag,
第 54 回アイソトープ・放射線研究発表会, 東京大学農学部(東京都文京区)
(Jul. 5-7, 2017).
15. 久富木志郎,
レアメタル不要で高性能な可視光応答型光触媒ガラス
首都大学東京新技術説明会, JST 東京別館ホール(東京都千代田区) (Jul.11, 2017).
16. 久富木志郎, 石川史織, 片山裕加, コブズィバラシュ,
スチール缶と家庭ゴミ焼却スラグを利用した水質浄化材の開発
東京都施策提案発表会, 東京都庁第二本庁舎(東京都千代田区) (Jul. 26-27, 2017).
17. 砂川晃佑, 久富木志郎, 秋山和彦, 青木勇二, 松田達磨, 東中隆, Marija Perovic, Marko

Boskovic, 西田 哲明,
ゾルーゲル法により合成した鉄リン酸ガラスの磁氣的性質と局所構造の相関,
日本セラミックス協会 30 回秋季年会, 神戸大学 (兵庫県神戸市)
(Sep. 19-21, 2017)

18. Kobzi Balazs, Kubuki Shiro, Homonnay Zoltan, Kuzmann Erno, Mira Ristic, Stjepko Krehula・
Nishida Tetsuaki,
Improving the visible light photocatalytic activity of SnOx·SiO₂ glass systems by introducing
SnOx nanoparticles,
日本セラミックス協会 30 回秋季年会, 神戸大学 (兵庫県神戸市)
(Sep. 19-21, 2017).

19. 中島覚, 飯本武志, 久富木志郎, 小崎完, 斎藤美希, 馬田敏幸, 高橋郁子, 垣下典永,
中西徹,
企画専門委員会の活動 -平成 29 年度教育訓練講習会アンケート調査結果報告とその考察-
平成 29 年度放射線安全部会年次大会, 淡路夢舞台国際会議場 (兵庫県淡路市)
(Oct. 12-13, 2017).