首都大学東京　大学院理学研究科

化学専攻

年次報告

2019

はしがき

2019 年度の首都大学東京・理学研究科・化学専攻の年次報告書をお届けします。この報告書は、当専攻の教育・研究活動や社会貢献等を専攻外・学外の皆様にお伝えすることを目的としたものです。第一部では専攻全体としての活動状況・組織運営等について、第二部では各研究室の活動・研究成果について紹介しています。当専攻の一年間の活動の記録としてご活用頂ければ幸甚です。なお、2020 年度から本学は東京都立大学として新たなスタートを切ることになりましたので、首都大学東京として発行する年次報告書は本稿が最後になります。

化学専攻は、無機・分析化学系、有機・生物化学系、物理化学系の三つの柱を基本とし、理学的な視点に立脚した教育・研究活動を主軸としています。各系 4 研究室、合計 12 研究室から構成され、無機化学、有機化学、物理化学、分析化学、生物化学の基幹分野を網羅しています。また、新しい境界領域の開拓にも挑戦しており、化学専攻の教員の多くが異分野の研究者との交流・共同研究を積極的に推進しております。

2019 年度末には、新型コロナウイルスの感染拡大が世界的な問題となり、社会・教育・研究活動のあらゆる側面で大きな影響を受けました。本報告書を編集している 2020 年度前半も未だに先行き不透明な状況が続いております。この問題の解決に尽力されている多くの方々に改めて敬意を表するとともに、我々としても学術的な部分で貢献できることはないか模索すべきであると考えております。

本報告書の作成にあたっては、化学専攻の活動を客観的に評価する上で必要な情報を可能な限り網羅することを心がけましたが、至らない点があるかもしれません。皆様からの忌憚のないご意見を頂くことで、今後の各種活動ならびに年次報告書の取りまとめに生かすことができれば幸いに存じます。

最後になりますが、本報告書の編集・製版は化学事務室の職員の尽力により行われたことを付記します。

2019 年度　専攻長　竹川 暢之

目次

はしがき
目次
化学教室　教室協議会規則・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 1
２０１９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・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 21
各賞受賞・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 24
国際会議の開催、および組織委員としての活動・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 25
海外研究(国際会議における学術講演・海外での講義等)・・・・・・・・・・・・・・・・・ 26
共同研究・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 32
海外からの訪問者・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 35
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・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 43
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・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 49
各研究分野活動状況　２０１９年度・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ 52

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

2019年度化学科研究室別名簿（前期）

	錯体化学	環境・地球化学	無機化学	有機構造生物化学	有機化学	生物化学	物性物理化学	分子集合系物理化学	反応物理化学	有機合成化学	理論・計算化学	同位体化学
教授	杉浦 健一(3574)	竹川 暢之(3446)	山添 誠司(3577)	伊藤 隆(3538)	野村 琴広(3542)	廣田 耕志(3535)	菊地 耕一(3453)		城丸 春夫(3447)	清水 敏夫(3585)	波田 雅彦(3583)	
准教授		佐藤 総一(3584)	大浦 泰嗣(3576)	三島 正規(3538)	稲垣 昭子(3541)	田岡 万悟(3536)	児玉 健(3442)	好村 滋行(3455)			中谷 直輝(3543)	久冨木 志郎(3922)
					西長 亨(3541)							
助教		三澤 健太郎(3445)	白井 直樹(3576)	池谷 鉄兵(3525)		阿部 拓也(3535)		川上 庸平(3434)	松本 淳(3451)	平林 一徳(3573)	阿部 穣里(3582)	秋山 和彦(3587)
		芝本 幸平(3445)										
D3(秋入学)	モハマッド・モシュール・ラーマン(3575)										Jun Yi(3361)	
D3						大岡 正人	和田 哲也(3452)	曹 勇(3433)			砂賀 彩光(3571) 菅野 翔平(3581)	
D2(秋入学)	リザ ウンメ アイマン				CHAIMONGKOLKUNASIN Sapanna(3528)						Ma Zhifeng(3361) Salmahaminati(3582)	アリ アーメド サラー アブデルカリーム(3921)
D2		坂部将仁(3584)						安田 健人(3435)			宮本 優弥(3361)	
D1(秋入学)	ISLAM MD Rafikul RATUL MD Wahidul Islam		MD Sultanur Reza									KHAN Irfan(3921)
D1						千松 賢史		保坂 悠人(3433)				
M2	中谷 文(3575) 貴 晃耿(3575)	池田 春輝(3564) 井手 佑(3564) 市村 和貴(3584)		清水 瑞香(3537) 高田 夢人(3537) 工藤 工(3537)	KITPHAITUN Suphitchaya(3528) 青木 大輔(3532) 伊澤 樹(3533) 井上 健介(3528) 藤原 知也(3531) 于 鵬飛(3533) 章 超陽(3532) 祖父江 友希(3531)	宮田 啓史 宮本 侑弥	川端 翔弥(3452) 高井 良也(3442) 吉田 俊(3442)	黒田 瑞季(3433) 山下 晃史(3435)	牧野 恵里香(3451) 松本 稔(3448) 滝沢 信行(3448)	柳沼 達也(3572) 西井 裕亮(3572)	佐藤 有沙留(3582) 菅沼 麻莉奈(3543) 橋本 拓磨(3543) 吉田 玲(3582)	岡倉 啓(3587) 片山 裕加(3921) 小林 祐太(3921) 森下 さくら(3921)
M1	池田 敦貴(3575) 田中 博彦(3575) 本多 理紗(3575) 王 宇婷(3575)	太田 寛之(3564) 小林 優也(3564) 長崎 安奈(3564) 伊藤 大地(3564)	滝澤 一輝(3561) 藤木 裕宇(3561) 松山 知樹(3561) CHUDATEMIYA Voraklit(3561)	亀井 駿(3537) 小泉 太貴(3537) 鈴木 拓巳(3537) 田岸 亮馬((3537) 田嶋 真彩子(3537)	CHALJAROEN Pornpoon(3532) 大山 遼(3531) 川本 雄太(3532) 河村 倫生(3532) 小出 晃士(3533) 濱田 日向子(3531)	猪又 侑里子 桑田 和佳奈 平塚 真由	津倉 弘輝(3452) 降矢 裕輝(3442)	江良 勝哲(3435) 鈴木 天青(3433) 古屋 哲博(3433)		高杉 水晶(3572) 高橋 瞳(3572)	道明 武信(3543)	大川 毅晃(3921)
B4	桑原 康太(3575) 酒井 和佳奈(3575) 和田 真由子(3575)	鈴木 健太(3564) 河西 優壮(3564) 野崎 一真(3564) 安井 健太朗(3564) 吉田 雅貴(3564)	柴田 香奈子 塚田 実緒 鈴木 充	立石 森 舘野 佳太 末広 忠範 中島 弘輝 渡邉 史輝	岡部 正輝 高橋 あすか 中島 野乃香 松尾 一輝	上原 美紀 小島 幸太 斎藤 草志 半澤 佑哉	山口 来紗子(3452) 鎌田 直也(3442) 飯島 萌乃(3442) 山岸 主輝(3442)	伊藤 功(3435) 大堀 貴士(3433) 笹田 智輝(3433) 劉 芳美(3435)	稲田 駒那(3451) 岩崎 裕希人(3451) 中澤 京平(3451) 吉田 遥(3451)	大槻 拓晃(3572) 梶山 翔(3572) 宮本 耀(3572)	角田 佳史(3581) 井上 悠貴 木下 皓史 富田 大樹 葛山 尚大	齋藤 涼太(3587) 諏訪 智也(3587) 中野 聡士(3921) 中村 佳幹(3921)
客員教授 博士研究員 客員研究員 研究生 等		【伊與田研究室】(5651) （客員教授） 伊與田 正彦 大谷 裕之 （特任研究員） 孫 顕枝(3564)	（客員教授） 海老原 充 （客員准教授） 古田 悦子 （客員研究員） 小林 貴之 （客員研究員） 平山純(3561)	（客員教授） 甲斐荘 正恒(3045) Peter Guentert Jonathan Heddle （客員准教授） 長川 [illegible] （客員研究員） 宮ノ入 洋平 寺内 勉 武田 光弘 大島 宏昌 金場 哲平 （研究員） 三島 綾子(3525) 鶴志田一(3525)	（特任教授） 小宮 三四郎 （客員研究員） 堀 位 宮本 昌幸 Pengoubol Semtamon （実験補助員） 下村 まり子(3528)	（客員教授） 森田 武彦 （客員研究員） 此村 直人 宇井 彩子 （客員教授） 藤邊 俊明 劉 裕之 （特任研究員） 荘 悦子(5623) 井並 優佳(5623) (RA) 山内 芳雄(5623) （客員研究員） 新川高志(5623) 長野光司(5623) 斎藤宗雄(5623)		（客員教授） 加藤 直	（客員教授） 阿知波 洋次(3448) （客員研究員） 松本 幸三	（客員教授） 赤坂 健	（客員教授） 中辻 博 今村 穣 牛尾 二郎(3571) （特任教授） 多田 零(3571)	（客員教授） 片田 元己(3921) （客員准教授） 野村 貴美(3921) （客員研究員） Lenka Volfova Libor Machala Paul Adrian Bingham Adoriana Lancok
秘書		岡村 佳恵(3445) 三根 真貴子(3446)		倉光 千賀子(3538)	立神 真弓(3542) 堀戸 さやこ(3542) 杉山 晴瑠(3542) 森山 恵(3542)	中川 万紀子(3535) 杉山 律子(5623)		梶原 雅子(3455)			牛尾 洋子(3583)	

【学科事務室】
青山 桑江(3410)
高橋 悦子(3411)
田中 純子(3411)

【学生実験室】
小林 昌平(3462)

【元素分析室】
森本 陽子(3463)

化学教室委員会委員

2019年度化学専攻内委員

専攻長	竹川 暢之
次期専攻長	波田 雅彦
会計委員	佐藤 総一
将来構想委員	竹川 暢之
	波田 雅彦
	廣田 耕志
	伊藤 隆
将来計画委員	波田 雅彦
	佐藤 総一
	池谷 鉄兵
	芝本 幸平
カリキュラム委員	中谷 直輝
	廣田 耕志
	大浦 泰嗣
安全管理委員	中谷 直輝
	伊藤 隆
	山添 誠司
	城丸 春夫
広報委員補佐	大浦 泰嗣
共同利用機器管理委員	松本 淳
	川端 庸平
	(2019.6.末退職)
化学安全教育とりまとめ	廣田 耕志
学生実験取りまとめ	秋山 和彦
オープンクラス担当者	稲垣 昭子
劇物・毒物管理者	清水 敏夫
溶媒委員	平林 一徳

理工人事制度WG	三澤 健太郎
理工男女共同WG	稲垣 昭子
大学院教育GPコアメンバー	伊藤 隆
	好村 滋行
教育改革GP委員	好村 滋行
パンフレット委員	伊藤 隆
	兒玉 健
	佐藤 総一
	阿部 拓也
化学メーリングリスト管理	中谷 直輝
クラス担任（1年）	野村 琴広
	佐藤 総一
	西長 亨
	菊地 耕一
	杉浦 健一
	好村 滋行
クラス担任（2年）	清水 敏夫
	山添 誠司
	廣田 耕志
	久冨木 志郎
	兒玉 健
	田岡 万悟
クラス担任（3年）	三島 正規
	竹川 暢之
	伊藤 隆
	稲垣 昭子
	中谷 直樹
	波田 雅彦
准教授委員長	中谷 直樹
助教委員長	阿部 拓也

全学・理学研究科等委員会委員

2019年度全学理学研究科委員

理学部理学研究科

専攻長・コース長	竹川　暢之
専攻長代理	波田　雅彦
	廣田　耕志
理工学系人間関係相談チーム	伊藤　隆
研究費評価・配分委員会部会	波田　雅彦
理工学研究科研究推進室	波田　雅彦
理工学研究科広報委員会	好村　滋行
教務委員会部会	田岡　万悟
グローバル副専攻WG	田岡　万悟
基礎教育部会	兒玉　健
理工学系インターンシップ委員会	山添　誠司
教員養成カリキュラム委員会	廣田　耕志
理工学系入試委員会（多様な入試）	三島　正規
理工学系入試委員会（入試制度）	菊地　耕一
理工学研究科大学院入試委員	野村　琴広
自己点検・評価委員会部会	杉浦　健一
ＦＤ委員会	中谷　直樹
就職担当教員	山添　誠司
	伊藤　隆
理工学研究科図書委員会	三島　正規
環境安全部会	西長　亨
特別管理産業廃棄物管理責任者	菊地　耕一
保安管理部会	清水　敏夫
高圧ガス保安管理部会	西長　亨
放射線安全部会	久冨木　志郎
毒物劇物関係	稲垣　昭子
ＲＩ施設委員会	大浦　泰嗣
国際規制物質管理委員会	久冨木　志郎
理工人事制度WG	菊地　耕一

南大沢キャンパス

セクシャルハラスメント防止	伊藤　隆
高圧ガス保安管理部会	白井　直樹
放射線安全部会	久冨木　志郎
危険物保安監督者	清水　敏夫
ＲＩ施設委員会	久冨木　志郎
国際規制物資管理委員会	久冨木　志郎
動物実験委員	田岡　万悟
危険物保安管理委員	稲垣　昭子
放射線管理室委員	大浦　泰嗣
	秋山　和彦

人事異動　2019 年度

＜採用＞

なし

＜定年退職＞

教授　　城丸　春夫　　2020 年 3 月 31 日

＜退職＞

助教　　川端　庸平　　2019 年 6 月 30 日
（民間企業へ転出）

2019年度化学科時間割

曜日	学年	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 教養科目　三島(後)			11-110 無機化学総論 杉浦(前) 1-109 分析化学I 竹川(後)	6-210 基礎ゼミ 田岡(前) 6-211 基礎ゼミ 竹川(前)
月	2		11-206 構造物理化学　城丸(前)	12-105 有機化学Ⅲ　稲垣(後)	11-102 分析化学II　大浦(前) 11-101 有機構造解析　三島(後)	
月	3	11-103 物性化学I 菊地(前)	11-103 放射化学I　大浦(前) 11-108 宇宙化学　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)		
月	4	化学セミナー(後)(8-301-竹川, 8-307-城丸,8-304-好村, 8-302-菊地・兒玉、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・西長・佐藤・稲垣) 6時限まで
月	4				化学セミナー(後)(11-201 波田・中谷)	
火	1	1-101 教養科目 伊藤(前)	1-210 教養科目 大浦(前) 1-107 教養科目 城丸(後)		1-301 一般化学 Ic　阿知波(前) 1-202 化学概説 Ia　清水(前) 1-201 化学概説 Ib　佐藤(前) 1-310 化学概説 Ib　稲垣(前) 1-110 化学概説 Ib　西長(前) 1-202 化学概説 IIa　伊藤(後) 1-110 化学概説 IIb　山添(後)	
火	2					
火	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 兒玉(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)		6-213　総合ゼミナール　竹川/大橋/海老原(後)
水	1					
水	2	1-109 量子化学I　波田(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　好村(後)	12-101 有機化学Ⅱ　西長(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　Koo(後)	8-303 化学コロキウムⅠ　菊地/野村/廣田/竹川(前)
水	3		11-103 地球環境化学 竹川(前) 11-103 化学基礎測定I 野村貴(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)		
木	1	1-101 無機化学各論I　久冨木(後)		1-101 一般化学 Ib　阿知波(前) 1-209 一般化学 IIb　加藤(後)	1-103 一般化学 Ia　波田(前)	
木	1			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)		
木	2		12-101 無機化学各論II　杉浦(前) 12-101 錯体化学　杉浦(後)	1-204 有機化学Ⅰ　野村(琴)(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)	
木	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)		
金	1				1-102 物理化学初等演習 I(前) 1-201 一般化学 IIa　菊地(後)	6-205 基礎ゼミ 好村(前) 1-103 物理化学初等演習 II(後)
金	2			8-385 化学実験 d / 自然科学実験　武蔵(後)		
金	2			11-201 有機及生物化学演習 各教員(後)		
金	3	11-103　化学基礎測定II 大浦・山添(前)	11-306 反応有機化学 野村(琴)(前) 11-103 合成有機化学 清水(後)	11-301 無機固体化学 山添(前) 11-102 反応物理化学　城丸(後)	11-101 理論化学概論 中谷(前) 12-101 化学コロキウムⅡ　各教員(後)	[6限]　11-103 放射化学II 大浦(後)
金	4	化学セミナー(後) (8-305-久冨木)		化学セミナー(後)(8-306-山添・大浦)		化学セミナー(後)(8-303-伊藤・三島) 6時限まで

2019年度 大学院授業時間割

首都大学東京　理工学研究科　分子物質化学専攻

(　　)内は授業番号

	① 8:50~10:20 授業科目	教室	② 10:30~12:00 授業科目	教室	③ 13:00~14:30 授業科目	教室	④ 14:40~16:10 授業科目	教室	⑤16:20~17:50 授業科目	教室	⑥ 18:00~19:30 授業科目	教室	⑦ 19:40~21:10 授業科目	教室
月	(後期)化学特別セミナーⅡ(R238)Ⅹ(R951) ○ (後期)化学特別セミナーⅣ(R260)Ⅲ(R975)			8-302 菊地・児玉	(前期)化学特別セミナーⅠ(R247)Ⅱ(R962) (後期)セミナーⅡ(R248)Ⅹ(R963) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R271)Ⅳ(R936) ○(後期)セミナーⅣ(R272)Ⅲ(R937)			8-302 清水						
月			化学特別講義Ⅱ(前期) (R233) (物性物理化学)	8-302 菊地・児玉	物理化学特別講義Ⅰ (R159) ○ (物理実験学特論D)(後b) (R160)	8-301 ＊栗								
月	(前期)化学特別セミナーⅠ(R237)Ⅸ(R952) (後期)セミナーⅡ(R238)Ⅹ(R953) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R261)Ⅳ(R976) ○(後期)セミナーⅣ(R262)Ⅲ(R977)			8-304 好村										
月	(前期)化学特別セミナーⅠ(R239)Ⅸ(R954) (後期)セミナーⅡ(R240)Ⅹ(R955) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R263)Ⅳ(R978) ○(後期)セミナーⅣ(R264)Ⅲ(R979)			8-301 竹川			(後期)化学特別セミナーⅡ(R246)Ⅹ(R961) ○ (後期)化学特別セミナーⅣ(R270)Ⅲ(R985)			11-201 波田・中谷				
月	(前期)化学特別セミナーⅠ(R241)Ⅸ(R956) (後期)セミナーⅡ(R242)Ⅹ(R957) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R265)Ⅳ(R950) ○(後期)セミナーⅣ(R266)Ⅲ(R951)			11-202 廣田・田岡	(前期)化学特別セミナーⅠ(R243)Ⅱ(R958) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R267)Ⅳ(R982)			8-307 城丸						
月	(後期)化学特別セミナーⅠ(R244)Ⅸ(R959) ○ (後期)化学特別セミナーⅣ(R268)Ⅲ(R983)			8-307 城丸	(前期)化学特別セミナーⅠ(R235)Ⅱ(R950) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R259)Ⅳ(R974)			8-301 菊地・児玉						
月	(前期)化学特別セミナーⅠ(R251)Ⅸ(R966) (後期)セミナーⅡ(R252)Ⅹ(R967) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R275)Ⅳ(R990) ○(後期)セミナーⅣ(R276)Ⅲ(R991)			12-208 杉浦					(前期)化学特別セミナーⅠ(R253)Ⅱ(R968) (後期)セミナーⅡ(R254)Ⅹ(R969) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R277)Ⅳ(R992) ○(後期)セミナーⅣ(R278)Ⅲ(R993)			11-101 [illegible]		
火			化学特論Ⅱ(後期) (R222) (宇宙地球化学)	8-302 竹川・大浦			(前期)化学特別セミナーⅠ(R245)Ⅱ(R960) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R269)Ⅳ(R934)			8-302 波田・中谷				
火			物理化学特別講義Ⅱ (R108) ○ (前期)(原子物理学) (R205)	11-202 田沼										
火			物理化学特別講義Ⅰ(前b)(ナノ・界面物性特論Ⅱ) (R137) ○ (R139)	8-300 柳										
火			物理化学特別講義Ⅱ (化学特論Ⅶ)(前期) (R167) ○ (分子の理論と計算) (R168)	8-302 波田・中谷										
水	物理化学特別講義Ⅱ (化学特論Ⅴ)(後期) (R163) ○ (分子物性化学) (R164)	11-101 城丸	化学特論Ⅲ(前期) (R223) (有機化学特論)	11-201 [illegible]					(後期)化学英語特論 (R234)	8-302 ＊Julian Koe				
水	物理化学特別講義Ⅱ (化学特論Ⅵ)(前期) (R165) ○ (凝縮系の物理化学) (R166)	11-103 菊地・好村・児玉	物理化学特別講義Ⅱ (R109) ○ (前期)(物性物理学Ⅰ) (R206)	11-102 冠畑										
水			化学特論Ⅳ(後期) (R224) (現代生命科学)	11-202 [illegible]	物理化学特別講義Ⅰ (R161) ○ (物理実験学特論C)(後a) (R162)	8-301 田沼								
木	化学特別講義Ⅱ(前期) (R231) (有機反応論)	11-206 野村	① 物理化学特別講義Ⅰ(前a)(物質科学ミニマム特論) (R110) ○ (R113)	8-301 真庭	① 物理化学特別講義Ⅰ(前b) (R143) ○ (ソフトマター物性特論Ⅱ) (R144)	8-301 栗田								
木														
金	化学特論Ⅰ(前期) (R221) (無機化学)	11-301 杉浦・久冨木・山添					(前期)化学特別セミナーⅠ(R255)Ⅸ(R970) (後期)セミナーⅡ(R256)Ⅹ(R971) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R279)Ⅳ(R934) ○(後期)セミナーⅣ(R280)Ⅲ(R995)	8-306 山添・大浦						
金	(後期)化学特別セミナーⅡ(R250)Ⅹ(R965) ○ (後期)化学特別セミナーⅣ(R274)Ⅲ(R959)			8-305 久冨木	(前期)化学特別セミナーⅠ(R249)Ⅸ(R964) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R273)Ⅳ(R966)			8-305 久冨木	(前期)化学特別セミナーⅠ(R257)Ⅸ(R972) (後期)セミナーⅡ(R258)Ⅹ(R973) ○ (前期)化学特別セミナーⅢ(R281)Ⅳ(R996) ○(後期)セミナーⅣ(R282)Ⅲ(R997)			8-303 伊藤・三島		
金														
土														
集中授業	化学特別実験		ⅠA(前期)(R284) ⅠB(前期)(R940)		ⅠB(後期)(R285) ⅠA(後期)(R941)	各教員	放射線実験法Ⅰ(前期) (R005)	12-101	化学学外体験実習		物理化学特別講義Ⅰ・Ⅱ			
集中授業	化学特別実験		ⅡA(前期)(R287) ⅡB(前期)(R942)		ⅡB(後期)(R288) ⅡA(後期)(R943)	各教員	○ 放射線実験法Ⅰ(前期) (R006)	久冨木, 他	○ 化学学外体験実習		○ 物理化学特別講義Ⅰ・Ⅱ			
集中授業			○ ⅢA(前期)(R290) ⅢB(前期)(R944)		○ ⅢB(後期)(R291) ⅢA(後期)(R945)	各教員	放射線実験法Ⅱ(前期) (R007)	RI棟	化学特別講義Ⅰ					
集中授業			○ ⅣA(前期)(R293) ⅣB(前期)(R946)		○ ⅣB(後期)(R294) ⅣA(後期)(R947)	各教員	○ 放射線実験法Ⅱ(前期) (R008)	久冨木	○ 化学特別講義Ⅰ					

注意：○印は博士後期課程の授業

博士前期課程10月入学者は化学特別セミナーⅠ・Ⅱについて、Ⅱを後期に履修し、前期にⅠを履修する。また、化学特別実験については1年次後期にⅠAを履修し、翌年度前期にⅠBを履修する。2年次後期にⅡAを履修し、翌年度前期にⅡBを履修する。博士後期課程10月入学者は化学特別セミナーⅢ・Ⅳについて、Ⅲを後期に履修し、前期にⅣを履修する。また、化学特別実験については1年次後期にⅢAを履修し、翌年度前期にⅢBを履修する。

また、2年次においては、2年次後期に化学特別セミナーⅢを履修し、前期にⅣを履修する。また、化学特別実験については2年次後期にⅣAを履修し、翌年度前期にⅣBを履修する。

在学者数　2019年度

2019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	51名	48名	46名	57名	202名
総計					202名

博士前期課程	一年生	二年生	計
首都大学東京	35名	36名	71名
総計			71名

博士後期課程	一年生	二年生	三年生	計
首都大学東京	6名	8名	7名	21名
総計				21名

進路状況 2019年度

2020年3月15日現在

1. 学部卒業者数：46 名

進路

進学： 37名	首都大学東京	31 名
	他大学	6 名
就職その他：9 名	民間企業	6 名
	公務員等	0 名
	教員	2 名
	その他	1 名

2. 大学院博士前期課程修了者数：33 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：30名	民間企業	26 名
	公務員等	1 名
	教員	名
	その他	3 名

3. 大学院博士後期課程修了者数：7 名

進路

就職その他：7名	民間企業	3 名
	公務員等	0 名
	教員	2 名
	PD・その他	2 名

学位授与　2019年度

＜学士＞

錯体化学

桑原　康太	D2の対称性を有するピレンの四量体の合成とその性質
酒井　和佳奈	軸不斉を有するビピレノールの化学修飾とそれらの分光学的性質
和田　真梨子	脱水剤を用いたスズ(IV)ポルフィリン-フェノラート錯体の合成法の開発

環境・地球化学

河西　優杜	熱脱離型質量分析計を用いた分子運動速度の測定方法の開発
鈴木　龍太	均一核生成による粒子生成モデルの開発
野崎　一真	燃焼発生源からのエアロゾル粒子測定のための試料採取法の開発
安井　健太朗	難揮発性有機エアロゾル粒子の測定法開発のための基礎性能評価
吉田　雅貴	大気中における非水溶性固体粒子の測定方法の開発

無機化学

柴田　香菜子	Keggin型$[SiNb_{12}O_{40}]^{16-}$金属酸化物クラスターの塩基触媒特性評価
鈴木　充	金属鉄含有率が高いユークライトNWA10962の化学組成と地殻進化論的な位置づけ
塚田　実緒	$[Nb_{6-x}Ta_xO_{19}]^{8-}$の合成とその塩基触媒応用

有機構造生物化学

末広　志織	In-cell NMRによるSam68蛋白質の機能解析
立石　泰	Multi-States立体構造計算法を用いたYUH1の構造解析
渡邉　吏輝	NMRを用いたマルチドメイン蛋白質の動的構造解析
中島　弘稀	水素結合を介したスピン結合の観測

有機化学

岡部　正暉	ハーフチタノセン触媒による環状オレフィン系ポリマーの合成と解析
高橋　あすか	光エネルギーを捕捉する多核反応場における二酸化炭素変換
中島　野乃香	オレフィン重合に有効なイミド配位ニオブ錯体の合成と反応性
松尾　一輝	3,4-ジオキシチオフェン混合4量体で保護された金微粒子の合成と性質

生物化学

上原　美紀	分裂酵母 *fbp1* 遺伝子におけるストレス特異的転写制御機構の解明
小島　幸太	ヒト TK6 細胞を用いた Polymerase δ exonuclease 活性の機能解明
齋藤　尊志	損傷乗り越え DNA 合成における DDX11 の役割
半澤　佑哉	オオミジンコの tRNA の転写後修飾の分析手法の確立

物性物理化学

藤田　直也	Sm を含む二核金属内包フラーレンの探索
前島　萌乃	LaY ヘテロ二核金属内包フラーレンアニオンの ESR 研究
山岸　主暉	Tb 二核内包フラーレンアニオンの単分子磁石特性の研究
山口　未紗子	ハロゲン結合を有する IDTDH のラジカル塩の構造と物性

分子集合系物理化学

伊藤　碧	自己推進粒子を用いた捕食者・被食者系のシミュレーション
大槻　眞士	熱的に駆動する非対称な弾性スイマー
笹田　智暉	凹凸を持つ固体表面上でのゴムの摩擦
劉　芳美	不均一な輸送係数を持つ二成分系の相分離

反応物理化学

相田　莉那	卓上型イオン蓄積リングの安定周回条件の検討
岩崎　裕希人	アセチレンの5重イオン化と解離ダイナミクス
中津　京平	フラーレンのトップダウン型合成法の検証
吉田　遥	Bottom-up 過程によるアセチレンからのフラーレン生成

有機合成化学

大橋　拓尭	9員環チアクラウンエーテルのポリメチル化反応の検討
梶山　輝	ジピレニルジスルフィドの不斉に関する研究
宮本　耀	硫黄二座配子によって安定化された金クラスターの合成

理論・計算化学

井上	悠貴	ベイズ最適化を用いた perovskite 太陽電池材料の最適化
木下	皓史	深層学習によるペロブスカイト化合物のバンドギャップ予測
富田	大樹	Pd-Si クラスターの構造制御メカニズムに関する理論的研究
冨山	尚大	反磁性分子におけるシッフモーメントの電子状態項の再考

同位体化学

斎藤	涼太	家庭ごみ焼却スラグに含まれる有価金属成分の効率的分離法の開発
諏訪	智也	プロメチウムを含む不安定な二金属内包フラーレン分離法の開発
中野	聡士	Na_2O-P_2O_5-V_2O_5 ガラスを正極材とするナトリウムイオン電池の評価
中村	拡幹	模擬家庭ゴミスラグより作成した鉄アルミノケイ酸塩の光触媒効果と構造の相関

<修士>

錯体化学

黄　晁祺　　ピレンを有した1,2-ジアリールベンゼンの分子内炭素-炭素結合形成反応

環境・地球化学

池田　春輝　　ナノ粒子化学組成分析計の検出性能評価と実大気観測への応用
井手　佑　　熱脱離型エアロゾル質量分析計における粒子成分のイオン化効率に関する研究
市村　和貴　　テルロニウム部位を有する新規三脚型四座配位子の合成と配位能の検討性

有機構造生物化学

清水　涼香　　In-mitochondria NMR の方法論的研究
髙田　夢人　　異種核 NMR による、タンパク質の水素結合の観測
工藤　工　　タンパク質リン酸化酵素 PKC の NMR による構造研究

有機化学

Kitphaitun Suphitchaya
Synthesis of New Polymers by Precise Olefin Polymerization by Aryloxide-Modified Half-Titanocene Catalysts (フェノキシ配位ハーフチタノセン触媒による新規オレフィン系ポリマーの精密合成)
青木　大峻　　ハーフチタノセン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　　イミド配位ニオブ-アルキリデン錯体による二置換アセチレンのメタセシス重合
井上　健介　　キレート多座配位スカンジウム錯体尾合成と触媒反応への適用に関する研究
祖父江 友希　　光触媒能を有する BINAP イリジウム二核ヒドリド錯体の合成と反応開発
藤原　知也　　光増感性 Cu-Pd 二核錯体の合成とスチレン類重合特性
于　瀚森　　Synthesis of Surface Modified Concerted Catalysts Supported by Combined Precise Living Ring-Opening Metathesis Polymerization with End-Modification (リビング開環メタセシス重合による星型ポリマー表面固定化型の新規協奏機能分子触媒の合成)

生物化学

宮田　啓史　　遺伝学的手法を用いた BLM-TOP3α-RMI の機能的関係性の解明
吉本　侑依　　染色体の安定性における複製フォーク因子 TIPIN と相同組換え修復因子 BRCA1 の関連性の解明

物性物理化学

川端　朔弥	有機超伝導体 β-(BDA-TTP)$_2$I$_3$における電気伝導性の一軸圧印加方向依存性
髙井　良也	Dy 二核内包フラーレンアニオンの単分子磁石特性のケージ依存性
吉田　俊	Sc 内包フラーレンアニオンの単離と分光学的研究

分子集合系物理化学

黒田　瑞季	二つの弾性マイクロスイマー間の流体力学的相互作用（英文）
山下　晃史	生成・消滅を伴う自己推進粒子の集団運動のシミュレーション

反応物理化学

滝沢　信行	ガス流中レーザー誘起ブレークダウン、および気相中グラファイトレーザーアブレーションによるポリイン生成
牧野　恵里香	卓上型イオン蓄積リング(μE-ring)を用いた負イオン蓄積実験
松本　陸	グラファイトレーザーアブレーションによるフラーレン生成効率のガス温度依存性

有機合成化学

西井　裕亮	含硫黄カリックス[4]アレーンの合成と錯形成に関する研究

理論・計算化学

佐藤　有汰留	Mechanistic elucidation of uranium isotope fractionation in biotic reduction based on relativistic quantum chemical calculation (相対論的量子化学計算に基づく生物性還元におけるウラン同位体の分別の機構解明（英文）)
菅沼　麻莉奈	星間塵表面における反応生脱離に関する第一原理シミュレーション
橋本　拓磨	自然軌道反関数理論の数値的検証と機械学習による反関数設計
吉田　玲	第一原理計算による 7Be 核の電子捕獲壊変を速める化合物探索

同位体化学

雨倉　啓	ランタノイドフラーレン(Ln^{3+}@C_{82}^{3-})における内包原子が電子状態に及ぼす微小な影響
片山　裕加	家庭ごみ焼却スラグと酸化鉄より作成したガラスセラミックスの構造と環境浄化光触媒効果との相関
小林　祐太	ナトリウムイオン電池正極材料への応用へ向けたスズ含有バナジン酸塩ガラスセラミックスの開発
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で前駆体を用いずに合成したε-Fe_2O_3の評価

＜博士＞

有機構造生物化学

田中　孝　　In-cell NMR approaches to investigate protein structure and dynamics inside living cells

有機化学

Sarntamon Pengoubol

Precise Synthesis of Ultrahigh Molecular Weight Polymers by Polymerization of Long Chain α-Olefins and their Functionalization （遷移金属触媒による長鎖α-オレフィンの重合による超高分子量ポリマーの合成と官能基化）

Chaimongkolkunasin Sapanna

Design of (Arylimido)vanadium(V)-Alkylidene Complex Catalysts for Ring-Opening Metathesis Polymerization of Cyclic Olefins" （環状オレフィンの開環メタセシス重合に有効な芳香族イミド配位バナジウム錯体触媒の創製）

生物化学

大岡　正人　　遺伝子改変細胞を用いたゲノム維持機構に関する研究（英文）

理論化学

菅野　翔平　　Computational Chemistry Studies on Optical Functional Materials: Electronic Structure, Material Design, and Materials Informatics （計算化学を用いた光機能性材料の検討：電子構造、材料設計、マテリアルズインフォマティクス（英文））

砂賀　彩光　　Theoretical study on CP violation in molecules based on relativistic chemistry: Analysis on enhancement mechanism and development of accurate computational method including QED effect (分子中の CP 対称性破れに関する相対論的量子化学に基づく理論的研究：増幅機構および QED 効果を考慮した精密計算手法の開発（英文））

Yi　Jun　　Theoretical Study of the NMR, XANES, and Reaction Mechanism of Transition Metal Complex Catalysts (遷移金属錯体触媒の NMR、XANES、および反応メカニズムに関する理論的研究（英文））

文部科学省・日本学術振興会科学研究費補助金　2019 年度

＜新学術領域研究＞

伊藤　隆　　新学術領域研究（計画研究）新規
生命金属動態解析を可能とする in-cell NMR による金属タンパク質研究

＜基盤研究＞

竹川　暢之　　基盤研究 B（一般）代表　継続
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

伊藤　隆　　基盤研究 S　分担者　新規
マルチスケール分子動力学シミュレーションによる細胞内分子動態の解明

野村　琴広　　基盤研究 B　継続
高性能精密重合・多量化遷移金属分子触媒の創製と高機能材料・革新的合成法の開発

廣田　耕志　　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

波田　雅彦　　基盤研究 B　代表　継続
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　代表　新規
遺伝子量補正を担う分子複合体の構造基盤を解明する多面的アプローチ

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　継続
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　継続
微量 RNA の動的な転写後修飾の解析法

基盤研究 B　分担者　新規
遺伝子量補正を担う分子複合体の構造基盤を解明する多面的アプローチ

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

好村　滋行　　基盤研究 C　継続
ソフトマター中のマイクロマシンの非平衡ダイナミクス

三澤　健太郎　　基盤研究 B（一般）分担者　継続
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

芝本　幸平　　基盤研究 C　継続
三次元配置による高変換効率を持つ色素／プラズモニック増感太陽電池の開発

白井　直樹　　基盤研究 B　分担者　継続
放射化学的手法を用いたハロゲンの地球化学の新展開

基盤研究 B　分担者　新規
木星の形成は原始太陽系星雲を分裂させたのか？-分化隕石からのアプローチ-

池谷　鉄兵　　基盤研究 C　継続
低感度・低解像の NMR データにも適用可能な新規信号処理と蛋白質構造解析法の開発

基盤研究 C　分担者　継続
高分子量蛋白質の NMR 構造解析を目指したスパース選択標識と NMR 自動解析法の開発

阿部　穣里　　基盤研究 C　代表　継続
バクテリアによるウラン同位体分別の理論的解明

基盤研究 B　分担者　継続

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

基盤研究 B　分担者　継続

電子EDM探索のための冷却分子の研究

＜挑戦的萌芽研究＞

山添　誠司　　挑戦的萌芽研究　継続

多元プラズマ触媒反応装置によるメタン直接変換技術の開発

野村　琴広　　挑戦的萌芽研究　継続

星型・球状ポリマー表面固定化型の新規協奏機能分子触媒の創製

波田　雅彦　　挑戦的萌芽研究 代表　新規

核シッフモーメントの電子遮蔽効果：相対論的量子化学計算による高精度予測

＜若手研究＞

阿部　拓也　　若手研究 B　代表　継続

遺伝学とプロテオミクス解析の融合によるコヒーシン制御ネットワークの解明

＜国際共同研究加速基金＞

山添　誠司　　国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(B)）分担者　新規

高性能オレフィン重合・二量化分子触媒の活性種・中間体の革新的構造解析新手法の開発

野村　琴広　　国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(B)）新規

高性能オレフィン重合・二量化分子触媒の活性種・中間体の革新的構造解析新手法の開発

廣田　耕志	国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(B)）代表　新規 革新的ガン治療に向けた遺伝子シナジー解明のための国際共同研究ネットワーク
中谷　直輝	国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(B)）分担者　新規 高性能オレフィン重合・二量化分子触媒の活性種・中間体の革新的構造解析新手法の開発
阿部　拓也	国際共同研究加速基金（国際共同研究強化(B)）分担者　新規 革新的ガン治療に向けた遺伝子シナジー解明のための国際共同研究ネットワーク

その他の研究助成　2019年度

＜首都大学東京＞

廣田　耕志　　学長裁量枠 研究環　新規
ゲノム不安定化防止機構の国際共同研究環

部局競争的経費　新規
複製ポリメラーゼεの校正エキソヌクレアーゼ活性による複製フォーク維持機構の解明

中谷　直輝　　傾斜的研究費（部局競争）
Fe元素の計算化学を主導する強相関電子系の密度汎関数理論の開発

三澤　健太郎　　傾斜的研究費（若手奨励経費）　新規
リアルタイム質量分析装置の小型化に向けたパルスノズルによる新規試料導入機構の開発

＜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・展開共同研究 A　新規
パイ電子拡張型新規軸不斉化合物の合成とクライオプローブ付きNMRを用いたINADEQUATE測定による構造決定

竹川　暢之　　環境省環境研究総合推進費　代表　継続
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

学術相談料：富士電機株式会社　継続
ブラックカーボン粒子計測技術の研究

学術相談料：日本製鉄株式会社　新規および継続
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

共同研究： 日本製鉄株式会社　新規
PM2.5 評価技術の確立および適用

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

文部科学省　元素戦略プロジェクト研究拠点形成型「京都大学　実験と理論計算科学のインタープレイによる触媒・電池の元素戦略研究拠点」　継続
放射光分光を活用した革新的複合クラスター触媒の開発

戦略的創造研究推進事業(さきがけ)　新規
振動エネルギーで駆動する新しい触媒反応系の開拓

NEDO 先導研究プログラム　未踏チャレンジ 2050　新規
二酸化炭素のリサイクル・資源化のための新しい触媒プロセス開発

野村　琴広　　（公財）小笠原科学技術振興財団　新規
定量的な末端官能基化・精密集積化を基盤とする強発光高分子機能材料の創製

（公財）双葉電子記念財団　新規
共役ポリマーの定量的な末端官能基化を基盤とする新規集積型光機能材料の創製

特定研究寄附金：日本ポリケム（株）　新規
研究助成

学術相談：ポリプラスチックス（株）　新規
研究助成

学術相談：AGC（株）　新規
研究助成

廣田　耕志　　武田科学振興財団　新規
非コードRNA転写と共役したクロマチン再編成の普遍的分子機構の解明

波田　雅彦　　　学術相談　東芝　継続
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

共同研究　デンソー
（内容の開示不可）

大浦　泰嗣　　　環境省環境研究総合推進費「原子力事故データの総合解析による事故時の有害物質大気中動態評価法の高度化」分担者
SPM計ろ紙の核種分析によるプルーム動態の解析

稲垣　昭子　　　物質・デバイス領域共同研究拠点　展開共同研究A　代表　継続
光増感性金属触媒による新規材料の開発と物性・機能評価

田岡　万悟　　　A-STEP　分担者　新規
ｘＮＡの構造解析と定量分析を可能にする分析プラットフォームの開発（中山洋）

AMED難治性疾患実用化研究事業　分担者　継続
ヒトSLC29A3異常症における発症機序の解明（柴田琢磨）

久冨木　志郎　　2019年度　物質・デバイス領域共同研究拠点　一般研究課題　継続
ナトリウムイオン電池への応用を目的とした導電性バナジン酸塩ガラス正極材の開発

東京都高度研究　継続
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

白井　直樹　　　平成30年度理学研究科若手推奨研究費　代表　新規
親銅元素（Cd, In, Tl, Pb, Bi）を用いた隕石衝突イベント検出への挑戦

池谷　鉄兵　　　公益財団法人島津財団助成金　新規
核磁気共鳴分光法による生細胞内蛋白質の立体構造解析法の開発

阿部　拓也　　　公益財団法人かなえ医療振興財団助成金　継続
乳癌原因遺伝子BRCA1とDNA複製因子Tipinの合成致死に関する研究

各賞受賞　　2019年度

坂部　将仁

優秀講演賞（中でも特別講演賞としてChemistry Letters Young Awardを受賞）
12月7日
7配位スチボニウムカチオン[14–Sb–7]$^{+}$の合成とその構造
第46回有機典型元素化学討論会

国際会議の開催、および組織委員としての活動　2019 年度

杉浦　健一

・円偏光発光の化学と物理の融合を目指した国際会議の主催
2019年11月

伊藤　隆

・ISMAR-APNMR-NMRSJ-SEST2021合同会議
大阪府立国際会議場　2021年8月22日～8月27日（準備中）　プログラム委員

野村　琴広

・Asian Polyolefin Workshop 2019 (APO2019)
Hiroshima, Japan　2019年12月　International Advisory Board
・Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020)
Bangkok, Thailand　2020年2月　International Advisory Board, Chair in Catalysis Science and Technology Session
・International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2021 (C&FC2021)
Tokyo, Japan　2021年12月　International Advisory Board
・第66回有機金属化学討論会
首都大学東京　2019年9月　討論会現地実行委員長　International Advisory Board
・山形大会（第49回石油・石油化学討論会）
山形　2019年10月　ポリマー・オリゴマーセッション企画担当

松本 淳

・多価イオン物理学国際会議LOC

海外研究［国際会議における学術講演・海外での講義等］　2019年度

杉浦　健一
PACCON 2020
2020年2月、ただしコロナウイルスのため出席取りやめ
タイ、バンコク市
Synthetic Studies of π-Expanded Axially Chiral Biaryls and Their Chiroptical Properties（招待講演）

山添　誠司
Johnson Matthey Japan Academic Conference 2019
2019年11月15日
栃木、日本
Catalysis of Atomically Precise Metal/Metal Oxide Clusters

伊藤　隆
33rd Annual Symposium of the Protein Society
2019年7月2日
Seattle, USA
Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living eukaryotic cells

野村　琴広
102nd Canadian Chemistry Conference and Exhibition　Keynote 講演
2019年6月4日
ケベック、カナダ
Vanadium- and niobium-alkylidene complexes catalysts for olefin metathesis polymerization

2019 US-Japan Polymer Symposium: -Macromolecules: Challenges and Opportunities for the 21 st Century-　招待講演
2019年6月18日
スタンフォード大学、カリフォルニア、アメリカ合衆国
Olefin insertion copolymerization and ring opening metathesis polymerization with cyclic olefins

5th Blue Sky Conference on Catalytic Olefin Polymerization 招待講演
2019年6月26日
ナポリ、ソレント、イタリア
Half-titanocene catalysts for synthesis of new polyolefins by ethylene copolymerizations, and solution XAS for analysis of active species

23rd International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry (ISOM23) Keynote 講演
2019年7月2日
バルセロナ、スペイン
Vanadium-, niobium-alkylidene catalysts for olefin metathesis polymerisation

7th international symposium of Institute for Catalysis in Hokkaido University Keynote 講演
2019年7月30日
札幌、北海道
Olefin metathesis: Efficient methods for precise synthesis of new advanced conjugated polymers by exclusive end-modification

The 8th Asia-Pacific Congress on Catalysis (APCAT8) 招待講演
2019年8月6日
バンコク、タイ
(Imido)vanadium and niobium complexes as efficient catalysts for ethylene dimerization/polymerization and ring-opening metathesis polymerization of cyclic olefins

Asian Polyolefin Workshop 2019 (APO2019) 招待講演
2019年12月4日
広島、日本
Effect of anionic donor ligands and Al cocatalyst in ethylene (co)polymerization using (arylimido)vanadium complex catalysts

The 16th pacific polymer conference 招待講演
2019年12月10日
シンガポール
Olefin metathesis polymerization by vanadium-, niobium-alkylidene catalysts

Universiti Kebangsaan Malaysia (UKM)　招待講演
2019年12月16日
クアラルンプール、マレーシア
Olefin metathesis: Efficient method for synthesis of functional polymers and fine chemicals

Mahidol University 招待講演
2019年12月17日
バンコク、タイ
Polymerization/dimerization using (Imido)vanadium and niobium complex catalysts

アテネオ デ マニラ大学　招待講演
2020年1月13日
マニラ、フィリピン
Olefin metathesis: efficient methods for synthesis of advanced polymers, and conversion of bio renewables

フィリピン大学　Diliman校　招待講演
2020年1月14日
マニラ、フィリピン
Olefin metathesis: efficient methods for synthesis of advanced polymers, and conversion of bio renewables

Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) 招待講演
2020年2月13日
バンコク、タイ
Metal catalyzed olefin polymerization: Efficient catalysts for synthesis of petroleum based polymers, and bio based polymers

廣田　耕志
IFOM研究所共同シンポジウム
2019年10月
IFOM研究所　イタリア
Role of proofreading exonuclease activity of replicative polymerase ε in camptothecin induced safe replication fork slowing

波田　雅彦

Jun Yi and ◎Masahiko Hada

5th Edition on Global Conference on Catalysis, Chemical Engineering & Technology (CAT2019)

London, United Kingdom

51V-NMR Chemical Shifts and Analyses of Vanadium Complex Catalysts: A Cooperation of QC calculation and MLR Analysis

Shohei Kanno, Yutaka Imamura, and ◎Masahiko Hada

Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020)

Feb.13-14,2020

IMPACT Forum, Bangkok, Thailand.

A suggestion of Novel Materials for Perovskite Solar Cells from Materials Informatics

Ataru Sato, Minori Abe, and ◎Masahiko Hada

Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020)

Feb.13-14,2020

IMPACT Forum, Bangkok, Thailand.

Relativistic Quantum-Chemical Calculation on Uranium Isotope Fractionation in Biotic Reduction

久冨木 志郎

Seminar in the University of Zagreb 2019

May 28, 2019

Zagreb (Croatia)

Mössbauer Study of Electrically Conductive Sodium Phosphovanadate and Photocatalytic Iron Silicate Glasses

2nd International Conference on Radioanalytical and Nuclear Chemistry 2019 (RANC-2019)

May 5-10, 2019

Budapest (Hungary)

Mössbauer Study of Iron-Containing Aluminosilicate Glass Exhibiting Visible-Light Activated Catalytic Ability

5th Mediterranean Conference on the Application of the Mössbauer Effect (MECAME2019)
May 19-23, 2019
Montpellier (France)
Mössbauer Study of Iron- and Tin- Containing Vanadate Glass Applying as a Cathode Active Material for Sodium Ion Battery

The 35th International Conference on the Application of the Mössbauer Effect (ICAME2019)
Sep 1-6, 2019
Dalian (China)
Mössbauer Study of Iron-Silicate Glass-Ceramics prepared from Domestic Waste Slag Exhibiting Visible-light Activated Photocatalytic Effect

Magyar Mössbauer Laboratóriumok Hálózata
Oct. 3, 2019
Budapest (Hungary)
Mössbauer Study of Iron-silicate Glass-Ceramics Prepared from Domestic Waste Slag Exhibiting Visible-light Activated Photocatalytic Effect

松本 淳
8th International Workshop on Electrostatic Storage Devices (ESD8)
August 26-30, 2019
Tianjin, China
Symmetric charge transfer cross section measurements of Ar^{+} and Ar^{2+} by using a table-top ion storage ring

阿部 穣里
Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019)
Sep.30-Oct.3, 2019
The University of Sydney Abercrombie Business School, New South Wales, Australia
Theoretical study of uranium isotope fractionation by bacteria

Kitphaitun Suphitchaya
Asian Polyolefin Workshop 2019 (APO2019)
2019年12月
広島、日本
Aryloxo-modified half-titanocenes as highly active ethylene copolymerization catalysts: Effect of phenoxy para substituents

The 8th Asia-Pacific Congress on Catalysis (APCAT8)
2019年8月6日
バンコク、タイ
Synthesis of aryloxo-modified half-titanocenes as highly active ethylene (co)polymerizatioin catalysts

Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020)
2020年2月
バンコク、タイ
Efficient ethylene copolymerization using half-titanocene catalysts: Precise synthesis of amphiphilic graft copolymers by post-polymerization modification

Chaijaroen Permpoon
Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020)
2020年2月
バンコク、タイ
Synthesis of bio-based long-chain polyesters by tandem acyclic diene metathesis (ADMET) polymerization and hydrogenation using Ruthenium Catalysts

共同研究　　2019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　日本製鉄株式会社
- 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
- 2018年～現在　タイ国立行政開発大学院大学（NIDA）（タイ）
- 2018年～現在　シラパコーン大学（タイ）

山添　誠司
- ジョンソンマッセイジャパン
- 花王株式会社
- 日産化学株式会社

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　シュトゥットガルト大学・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　（公財）高輝度光科学研究センター

城丸　春夫
- 通年　イエテボリ大学・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

波田　雅彦
- 通年　埼玉大学
- 通年　奈良女子大学
- 2019年10月～2020年3月　デンソー

三島　正規　　・東京大学
・豊橋技術科学大学
・大阪大学

稲垣　昭子　　・2018 年 4 月 1 日～2019 年 3 月 31 日
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

西長　亨　　・平成26年1月～　北里大学理学部化学科
・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

中谷　直輝　　・通年　フランス・ストラスブール大学
・通年　イタリア・カメリーノ大学
・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

久冨木　志郎　　・2019 年 3 月 14 日～4 月 1 日
ルジェルボスコヴィッチ研究所・クロアチア
・2019 年 9 月 13 日～10 月 6 日
エトボシュローランド大学・ハンガリー
・2019 年度
九州大学先導物質化学研究所
・2019 年度
東京工業大学　物質理工学院

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

阿部　拓也　　・2019年8月　IFOM研究所・イタリア

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　穣里　　・通年　スイス連邦工科大学ローザンヌ校
・通年　東京工業大学

海外からの訪問者　　2019年度

環境・地球化学研究室

Prof. Chak K. Chan,
City University of Hong Kong
2019 年 12 月 18 日　セミナー

有機構造生物化学研究室

Prof. Geerten W. Vuister, Department of Molecular and Cell Biology,
University of Leicester, UK
2019 年 11 月 7 日～14 日　研究成果講演

Dr François-Xavier Theillet, Institut de Biologie Intégrative de la Cellule
Université Paris-Saclay, France
2019 年 11 月 13 日　研究交流

Dr Tanja Mittag, Structural Biology Department
St. Jude Children's Research Hospital, USA
2019 年 11 月 29 日～12 月 5 日　研究成果発表

Dr Daniel Nietlispach, Department of Biochemistry
University of Cambridge, UK
2019 年 12 月 17 日～12 月 21 日　共同研究

田仲加代子博士, Department of Molecular and Cell Biology,
University of Leicester, UK
2020 年 1 月 6 日　共同研究
（生物化学と合同）

有機化学研究室

Georgia Fardell
University of Newcastle, Australia
2019年2月25日～5月30日　Internship　学生

Prathiba Thamizhavel
Institute of Chemical Technology, Mumbai, India
2019年5月20日～6月25日　Internship　学生

Jeeranun Manit
Mahidol University, Thailand
2019年5月30日～8月25日　Internship　学生

İbrahim Ethem Kakaş
Istanbul Technical University, Turkey
2019年7月5日～9月8日　Internship IAESTE　学生

Kamal Dawood
Cairo University, Egypt
2019年9月30日～10月29日　JSPS再招へい事業

Karol Grela
Warsaw University, Poland
2019年6月13日　共同研究打ち合わせ

Walter Kaminsky
University of Hamburg, Germany
2019年11月1～5日　共同研究打ち合わせ・特別講演会

Kitiyanan Boonyarach
Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京　2020年1月10日～1月11日　共同研究打ち合わせ・シンポジウム

Hathaikarn Manuspiya
Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京　2020年1月10日～1月11日　共同研究打ち合わせ・シンポジウム

Pramoch Rangsunvigit
Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京　2020年1月10日～1月11日　共同研究打ち合わせ・シンポジウム

Panuwat Padungros
Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京　2020年1月10日～1月11日　共同研究打ち合わせ・シンポジウム

Peeranuch Poungsripong
Chulalongkorn University, Thailand
2020年2月1日　研究打ち合わせ

Gilbert Yu
Ateneo de Manila University, Philippines
2020年3月11日　研究打ち合わせ

理論・計算化学研究室
Professor Dr.Deba Khadka, Mid-Western University, Napal
2019 年 11 月 18 日～11 月 22 日　研究討議

同位体化学研究室
ルカ　パヴィッチ 博士・ルジェルボスコヴィッチ研究所
2019 年 3 月 1 日～3 月 13 日　共同研究打ち合わせ、セミナーでの講演

学会活動等（学協会等での委員等）　2019 年度

竹川　暢之
- International Commission on Atmospheric Chemistry and Global Pollution (iCACGP)
  Scientific Steering Committee　2015～2022 年
- 日本学術会議　International Global Atmospheric Chemistry (IGAC)
  小委員会委員　2015～2020 年
- 環境省　船舶・航空機排ガス影響把握検討委員会　2017 年～

山添　誠司
- 触媒学会　代議員　平成 29 年～令和 2 年
- 触媒学会　討論会委員　平成 30 年～令和 2 年
- SPRUC　X 線スペクトロスコピー研究会　代表　平成 30 年～令和 1 年

伊藤　隆
- 日本核磁気共鳴学会　評議員　2019 年 4 月 1 日～2021 年 3 月 31 日
- 日本核磁気共鳴学会　理事　2019 年 4 月 1 日～2021 年 3 月 31 日
- 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 10 期正会員
- 近畿化学協会　代議員
- 近畿化学協会　有機金属部会常任幹事
- 触媒学会　ファインケミカルズ合成触媒研究会　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
- MDPI (Multidisciplinary Digital Publishing Institute) Publishing (Basel, Switzerland)　*Catalysts*, Section Editor in Chief, Editorial Board
- Scientific Research Publishing, Inc. (Irvine, CA, USA)　*Green Sustainable Chemistry*, Editorial Board

城丸　春夫
- 原子衝突学会会長

清水　敏夫	・Journal of Sulfur Chemistry　編集委員　2006年～ ・有機合成化学協会　関東支部幹事　2019 年～
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 ・日本化学会関東支部役員　2018 年～
佐藤　総一	・日本化学会　春季年会プログラム編成委員（ヘテロ原子化学部門） 2019年1月～3月
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　運営協議会委員　2015 年～ ・京都大学複合原子力科学研究所　原子炉利用研究者グループ幹事　2019年～
三島　正規	・日本核磁気共鳴学会　評議委員　2019 年～2020 年
稲垣　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
好村　滋行	・日本液晶学会　ソフトマターフォーラム委員　2019 年度
久冨木　志郎	・大学等放射線施設協議会　常議員　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
白井　直樹	・放射化分析研究会　幹事　平成 30 年度～
池谷　鉄兵	・日本核磁気共鳴学会　日本核磁気共鳴学会第 58 回年会　会計監査 2019 年 11 月 7 日～9 日
松本 淳	・原子衝突学会庶務幹事

阿部　穣里	・同位体科学会　執行役員　2017 年～	
	・REHE2020　国際委員　2018 年～	

他大学非常勤講師（講演・集中講義など）　2019年度

山添　誠司　東京大学
2019年7月8～9日
XAFSの基礎と応用　～クラスターの構造・物性解明～

廣田　耕志　明星大学
2019年5月
生物科学特別講義

波田 雅彦　東京海洋大学
前期
物質科学

大浦　泰嗣　北里大学理学部
後期
放射化学

三島　正規　横浜市立大学
特別講義　10月25日

芝本　幸平　中央大学　理工学部応用化学科　後楽園キャンパス
前期
化学情報処理

中央大学　国際経営学部　多摩キャンパス
後期
化学

白井　直樹　電気通信大学
後期
基礎科学実験B

池谷　鉄兵　帝京科学大学
前期・後期
最近の遺伝子生命工学

阿部　拓也　　帝京科学大学
2019年4月、10月
最近の遺伝子生命工学

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

講演会・研究会等での講義・講演　2019 年度

山添　誠司

第 124 回触媒討論会「界面分子変換の機構と制御」セッション　(長崎大学)
精密合成したクラスター材料の触媒特性
2019 年 9 月 18 日

PF 研究会「XAFS・X 線顕微鏡分光分析分野での IMSS，PF 戦略的利用に関する研究会」　(つくば)
XAFS による精密合成した金属クラスターの構造・物性解明
2019 年 12 月 18 日

第 8 回 SPring-8 グリーンサスティナブルケミストリー研究会/第 47 回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ触媒開発の最前線—放射光を用いた触媒構造・活性発現因子の解明—　(東京)
放射光を用いた金属クラスターの構造・物性解明
2019 年 12 月 20 日

伊藤　隆

第 13 回バイオ関連化学シンポジウム 2019　(仙台)
溶液 NMR を用いた in situ 構造生物学
2019 年 9 月 5 日

第 42 回日本分子生物学会年会　(福岡)
Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living eukaryotic cells
2019 年 12 月 4 日

日本化学会第 100 春季年会　(野田)(学会中止)
高度細胞機能を解析する分子動態計測と情報科学との融合（趣意説明）
2020 年 3 月 23 日

野村　琴広

高分子学会関東支部 第60回茨城地区活動講演会　招待講演
精密重合と定量的な末端官能基化を基盤とする新しい集積型光機能材料の創製
2019年6月14日

第14回ポリオレフィン研究会　招待講演
溶液X線吸収法（XAS）によるエチレンやスチレン重合触媒の活性種解析
2019年8月22日

第124回触媒討論会　招待講演
オレフィンの精密重合・二量化に有効な高性能チタンおよびバナジウム分子触媒の設計
2019年9月19日

佐藤　総一　　第54回典型元素化学セミナー（神奈川）
ppy配位子を3つ有する擬6配位ビスムチンの酸化反応
2019年8月25日

三島　正規　　高分子学会関東支部武蔵野地区高分子懇話
多次元 NMR とケミカルバイオロジーによる構造生物学
2019 年 11 月 22 日

首都大学東京オープンユニバーシティ
「分子の観点で理解する先端生命科学」
2020 年 1 月 9 日、16 日、23 日

中谷　直輝　　錯体化学討論会2019、シンポジウムS1「Metal-ligand cooperation: New design in the development of functional organometallic complexes」
Computational Analyses on Hydrosilylation Reactions Catalyzed by 4d and 5d Metal Complexes
2019年9月21日

PF研究会「X線分光理論の新展開：構造・電子状態解析から磁性研究まで」
Energy-specific TD-DFT study on the K-edge spectra of vanadium complex catalysts
2019年10月3日

第9回量子化学スクール
電子相関とpost-HF法
2019年12月16～18日

久冨木　志郎　　第 11 回東京都施策提案研究発表会
家庭ごみ焼却スラグを原料とする環境浄化光触媒ガラスの開発
2019 年 7 月 4 日〜7 月 5 日

首都大学東京・新技術説明会
廃棄物を有効活用でき、高い光フェントン効果を示す触媒
2019 年 7 月 30 日

Pre-Solid State Symposium in IMCE Kyushu University
Mössbauer Study of Conductive Vanadate Glass and its Application for A Cathode Active Material of Na-ion Battery
2019 年 11 月 25 日

池谷　鉄兵　　第 20 回若手 NMR 研究会
MD シミュレーション vs　NMR 立体構造計算(multi-state　立体構造計算)

秋山　和彦　　第 63 回放射化学討論会（いわき産業創造館）
光量子放射化法による家庭ごみ焼却スラグの組成分析
2019 年 9 月 24 日〜9 月 26 日

第 63 回放射化学討論会（いわき産業創造館）
ランタノイド内包フラーレン($Ln^{3+}@C_{82}^{3-}$)における内包金属原子が炭素ケージに及ぼす摂動的影響
2019 年 9 月 24 日〜9 月 26 日

第 63 回放射化学討論会（いわき産業創造館）
プラスチックシンチレータを用いた放射性水溶液の放射能測定法の開発
2019 年 9 月 24 日〜9 月 26 日

非常勤講師（集中講義など）　2019 年度

有機化学

Karol Grela・Warsaw University, Poland
2019 年 6 月 13 日
第 297 回化学コロキウム

Kamal Dawood・Cairo University, Egypt
2019 年 10 月 18 日
第 299 回化学コロキウム

Walter Kaminsky・University of Hamburg, Germany
2019 年 11 月 4 日
第 298 回化学コロキウム、特別講演会

Kitiyanan Boonyarach・Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京
2020 年 1 月 10 日
TMU-CU Symposium 2020

Hathaikarn Manuspiya・Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京
2020 年 1 月 10 日
TMU-CU Symposium 2020

Pramoch Rangsunvigit・Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京
2020 年 1 月 10 日
TMU-CU Symposium 2020

Panuwat Padungros・Chulalongkorn University, Thailand
首都大学東京
2020 年 1 月 10 日
TMU-CU Symposium 2020

S. M. A. Hakim Siddiki・北海道大学
2020 年 2 月 27 日
第 304 回化学コロキウム

Gilbert Yu・Ateneo de Manila University, Philippines
2020 年 3 月 11 日
第 303 回化学コロキウム

分子集合系物理化学

物理化学特別講義 I　後期
北畑裕之（千葉大学大学院理学研究院・准教授）
非線形科学：パターン形成からアクテイブマターまで

反応物理化学

物理化学特別講義 I
広島大学大学院理学研究科化学専攻　高口博志　2020 年 1 月 14・15 日
イオン・ラジカルのレーザー分光学と反応ダイナミクス

理論・計算化学

大学院集中講義　物理化学特別講義 I
中嶋 浩之　量子化学研究協会研究所・部門長
シュレーディンガーレベルの量子化学

2019年度　教育改革推進事業（理学GP）

化学における大学院教育のグローバル化

伊藤隆

好村滋行

化学専攻における大学院教育のグローバル化教育の活動として、2019 年度には以下の(1)大学院生の海外派遣支援を中心に、(2)の講習会・交流会を通して、大学院生の国際会議参加・研究留学をトータルで支援する企画を随時実施した。

(1) 大学院生の国際化:

研究内容を英語で発表することを前提として、大学院生の国際会議(国内開催も含む)、国外研究機関での研修、海外のサマースクールなどへの派遣を実施した。アメリカ合衆国、フランス、スペインを含む国内外の研究施設にのべ 6 名の大学院生が研修に訪れ、各々の研究を大きく推進させることができた。2019 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。それぞれの募集に対し、選考小委員会を設けて申請書を審査した。それぞれの募集に対し、審査委員会を開催し、選考小委員が議論して採択を決定した。なお、国際会議派遣および国外研修派遣の採択者は7名であったが、第 2 期の海外国際会議派遣採択者 1 名分は 2019 年度末の渡航中止によりキャンセルとなったため、実際の派遣は 6 名であった。

(2)留学体験学生との懇談会:

本学で複数回の留学体験をした学生 2 名(博士後期課程 3 年、博士前期課程 2 年)に協力を要請し、留学体験談や留学によって学んだことについての懇談会を行った。理学部学部生、理学研究科院生の海外留学への動機付け、支援を目的とした企画である。化学科のみならず、数理、生命科学、物理などの他学科からの参加も多く盛況であった。

講習会タイトル:「GP 特別企画　留学体験者との交流懇談会」

開催日時: 2019 年 6 月 11 日(火)17:00～18:00

場所: 南大沢キャンパス 11 号館 102 号室

参加人数: 約 20 名

教室の行事

平成 29 年度 「化学への招待」首都大学東京１日体験化学教室

主催：理学部化学科および都市環境学部環境応用化学科

共催：日本化学会・関東支部

実施日：8 月 16 日（金）

会場：首都大学東京 8 号棟学生実験室他

全体世話人：稲垣昭子

理学部化学科で、以下の 6 課題を担当した。

1. 光る蛋白質を見てみよう！
2. 合成色素を作ってみよう！！アゾ色素・オレンジーII の合成
3. 化学現象のコンピュータシミュレーション
4. 小さな金の粒子を作って色や反応性を調べよう！
5. 触媒ってなぁに？ー環境にやさしいものづくりの化学ー
6. 超伝導体にふれてみよう

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、69 名の応募があった。実施に先立ち、応募者全員にメールによる実験テーマの希望調査を行い、テーマの振り分けを行った。事前連絡があった欠席、当日無断欠席等、18 名のキャンセルがあり、参加者は 51 名となった。参加者の男女比は約 1：2 であり女子学生の参加が多かった。学年は高校 1 年生、2 年生が 24 名ずつ最多であった。

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はなく、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。

平成31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2019」への体験化学実験の出展

１、開催概要

（１）行事名　平成３１年度東京都科学技術週間特別行事
　　　　　　　「Tokyoふしぎ祭エンス2019」

（２）日時　　平成３１年４月１３日（土曜日）１０：００～１７：００
　　　　　　　平成３１年４月１４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光る！弾む！スライムを作ろう
　　　　　　　　　　　　②入浴剤を作ろう
　　　　　　　演示実験：カレーが赤色に！カレールーの秘密！！

（６）参加者　TMU-SFC（代表：野宮 海音・理学部・化学科３年）

（７）監督者　佐藤 総一、松本 淳

体験化学参加人数　４月１３日　１２０人
　　　　　　　　　４月１４日　１２０人

２、内容

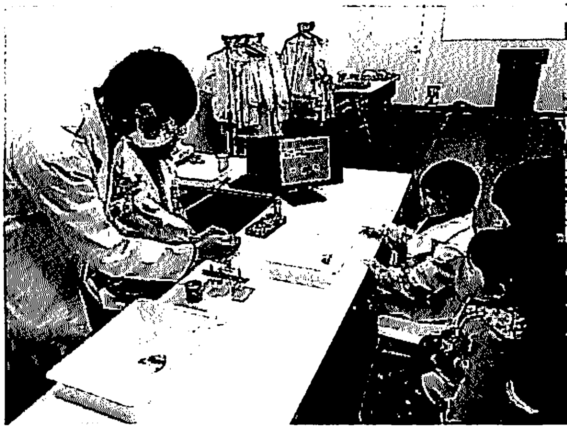
本学の産学公連携センターから依頼を受け、上記の日程、場所にて、「Tokyoふしぎ祭エンス2019」に体験化学実験を出展することになった。科学技術週間における東京都特別行事への出展は、今回で12回目となる。

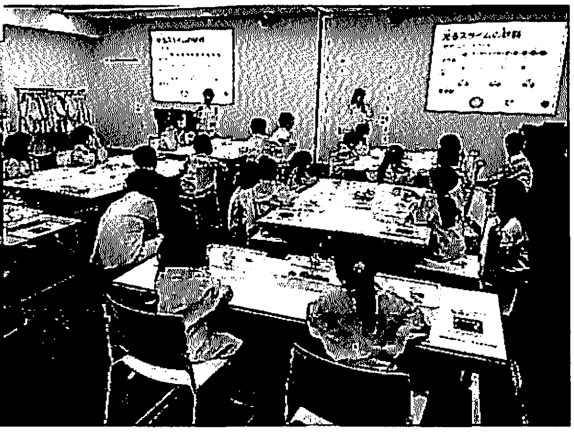
２０１９年４月１２日、１３日の両日、１０：００～１７：００の時間帯で子供向けの体験化学実験を行った。２日間で本イベントに携わったＴＭＵ－ＳＦＣ（体験化学実験クラブ）のメンバーは、総勢２４名（ＯＢ，ＯＧ含む）で、２つの体験型メニュー「光る！弾む！スライムを作ろう」と「入浴剤を作ろう」を実施した。体験型実験は１日に６回、各２０名の参加者を受け入れた。年齢の低いところでは５歳の子供、上は高校生、社会人といったところまで幅広い年齢層の方が、化学実験を体験されていった。各回の参加者募集は、それぞれ整理券を発行することによって進めた。

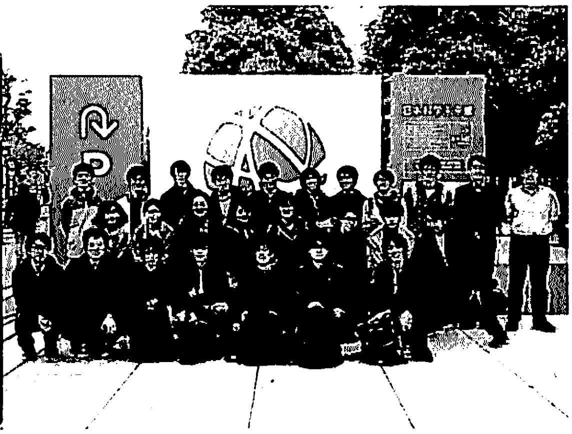
また「カレーが赤色に！カレールーの秘密！！」と題した演示実験も用意し、カレールーの原材料であるターメリックに含まれるクルクミンの pH による色の変化を実際に見てい

ただく実験を行った。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。こちらは、随時来場者を受け付ける体制で進めた。

途中、東京メトロポリタンテレビジョン（TOKYO MX）の取材を受け、当日夕、イベントの様子がテレビ放映された。







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

錯体化学研究室

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 Crystal Structure of 3-(3-Methyl-1H-indole-1-yl)phthalonitrile Sami AYARI, Kazunori HIRABAYASHI, Toshio SHIMIZU, Bassem JAMOUSSI, Mehmet F. SAGLAM, Devrim ATİLLA, and Ken-ichi SUGIURA
X-ray Structure Analysis Online 36 in press 2020年3月 査読有り

2 Efficient Synthesis of Arylenedioxy-Bridged Porphyrin Dimers through Catalyst-Free Nucleophilic Aromatic Substitution, Yamashita, Ken-ichi, Kuramochi, Narumi, Pham Qui Van, Hang, Furutani, Kazuhiro, Ogawa, Takuji, Sugiura, Ken-ichi
ChemPlusChem 85(1) 217 - 226 2020年1月 査読有り

3 Crystal Structure of Dinaphtho[2,1,1′,2′]furan Picrate, Risa HONDA, Atsuhiko TANAKA, Kazunori HIRABAYASHI, Kazuhiko AKIYAMA, Toshio SHIMIZU, and Ken-ichi SUGIURA
X-ray Structure Analysis Online 35 69 - 71 2019年12月 査読有り

4 Photochemical Reaction of Anthracene with Dioxygen Catalyzed by Platinum(II) Porphyrin, Ken-ichi Yamashita, Ken-ichi Sugiura
Tetrahedron Letters 60 151081 2019年9月 査読有り

5 Molecular structure and basic spectroscopic properties of 3-selenocyanatoindole: An important reference compound in organoselenium research, Atsuki Ikeda, Shahed Rana, Soichi Sato, Kazunori Hirabayashi, Masahiko Hada, Toshio Shimizu, Ken-ichi Sugiura
Tetrahedron 75 130551 2019年9月 査読有り

6 Syntheses and Characterization of 1- and 2-Hydroxypyren-Coordinated Sn(IV)

Porphyrins: Transmission-like Motion of Alcoholato-Coordinated Sn(IV) Porphyrin, Md. Moshiur Rahman, Kamrul Hassan, Kazunori Hirabayashi, Soichi Sato, Toshio Shimizu, Ken-ichi Sugiura
Polyhedron 171 128 - 136 2019年8月　査読有り

II.　著書、総説等
なし

III.　学会発表、講演等

1　Synthetic study on 3-Methylindole substituted zinc phthalocyanines
AYARI, Sami, SAGLAM, Mehmet F, SUGIURA, Ken-ichi
日本化学会第100春季年会 2020年3月25日

2　D2の点群を有する光学活性分子の合成とキロプティカル特性
杉浦健一
日本化学会第100春季年会 2020年3月25日　招待有り

3　D2の対称性を有する環状ピレン四量体の合成とキロプティカル特性
桑原康太，長谷川真士，山下健一，杉浦健一
日本化学会第100春季年会 2020年3月23日

4　Oxidative intramolecular multiple C-C bonds formation reactions of 1,2-diarylbenzenes
Md. Rafikul Iskam, Ken-ichi Sugiura
日本化学会第100春季年会 2020年3月23日

5　Chemical Modifications of Dinaphtofuran and Their Enhanced Physical Properties
Risa Honda, Ken-ichi Sugiura
Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) 2020年2月13日

6　Stereo Selective Origomerizations of Optically Pure Bipyrenols
Atsuhiko Tanaka, Subas Rajbangshi, Yoshitane Imai, Ken-ichi Sugiura
Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) 2020年2月13日

7　チオシアナートを軸配位子とした白金(IV)ポルフィリン錯体の合成と、それを用いた芳香族化合物の光チオシアン化反応
池田敦貴，山下健一，宮下智司，林賢太郎，ラーマン・モハマット・モシュール，

杉浦健一
第78回有機合成化学協会関東支部シンポジウム 2019年11月30日

8 ジナフトフラン多量体の合成及びその性質
本多理沙，平林一徳，清水敏夫，西川浩之，杉浦健一
第78回有機合成化学協会関東支部シンポジウム 2019年11月30日

9 完全に立体化学が制御された光学活性ピレンオリゴマーの合成と性質
田中惇彦，杉浦健一
第30回基礎有機化学討論会 The 30th Symposium on Physical Organic Chemistry 2019年9月25日

10 Oxidative Intramolecular Condensation Reactions of 1,2-Diareylbenzenes Aiming At Highly Conjugated Polycyclic Aromatic Hydrocarbons
モハマット・ラフィクル・イスラム，モハマット・アウラット・ホサイン，平林一徳，清水敏夫，杉浦健一
第30回基礎有機化学討論会 The 30th Symposium on Physical Organic Chemistry 2019年9月25日

11 ビピレノールを用いたピレン縮環フランの合成とその性質 Synthetic studies on a π-expanded pyrene-fused furan
本多理沙，杉浦健一
第30回基礎有機化学討論会 The 30th Symposium on Physical Organic Chemistry 2019年9月25日

12 白金ポルフィリンを用いたセレノシアン酸の極性転換と芳香族求電子反応性
池田敦貴，シャヘッド・ラナ，平林一徳，佐藤総一，清水敏夫，杉浦健一
第115回有機合成シンポジウム 2019年6月3日

13 白金ポルフィリンによって極性転換されたセレノシアナート基の反応挙動
池田敦貴，シャヘッドラナ，平林一徳，佐藤総一，清水敏夫，杉浦健一
第77回有機合成化学協会関東支部シンポジウム—横浜シンポジウム— 2019年5月18日

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。これまで韓国、台湾、タイにおける大気観測を実施しており、そのデータに基づき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た。電子顕微鏡解析と組み合わせることにより、アジア大陸の発生源から 1,000 km 以上離れた領域において、多様な混合状態を持つ粒子が存在することを明らかにした。

（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。本研究室では、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。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）熱脱離型エアロゾル質量分析計の気化・イオン化過程

熱脱離型エアロゾル質量分析計は、世界のエアロゾル研究に幅広く活用されており、信頼性の高いデータ構築はこれらの研究の基盤となるものである。一方で、定量の根幹に関わる熱脱離過程やイオン化過程については理論的には十分に理解されていない。新たに構築した評価システムを用いて室内実験を行い、粒子からの脱離ガスの空間広がりが分子種に応じて大きく異なることを見出した。さらに、実験結果を解釈するために直接シミュレーション・モンテカルロ法に基づく分子衝突モデルを構築した。その結果、イオン化効率を決める要因の一つとして脱離点近傍での分子間衝突が重要であることが示された。

（4）航空機排気ナノ粒子の動態解明

国際民間航空機関 (ICAO) 主導のもと、2016 年に新たに航空機排出規制が設けられ、2020 年以降の製造エンジンより適用される。このため、航空機由来のナノ粒子への関心が国際的に高まっている。成田国際空港の滑走路近傍で観測を実施し、ナノ粒子の数濃度・

粒径別化学組成が融合した包括的なデータセットを取得した。実環境における離陸時の全粒子数排出係数の半分以上が 10 nm 以下にあり、そのほとんどが煤以外の揮発性粒子であることを示した。また、揮発性成分として未燃のジェットエンジンオイルが重要であることを明らかにした。

（5）光散乱を利用した粒子の多角的分析法の開発

エアロゾルの粒径、形状、主要成分を多角的に高速分析する上で、レーザー照射により誘起される光信号 (散乱、蛍光、白熱等) を検出する方法が有用である。当研究室では、2 波長のレーザー光を利用したエアロゾル分析装置の開発を行っている。これまで、粒子の飛行時間計測や散乱光強度の波長依存性の評価を行ってきた。今後は、レーザー誘起蛍光を利用した分析法の開発も進める。

＜有機典型元素化学に関する研究＞

高周期 p-ブロック元素化合物は、炭素を中心とした有機化学を基準とした場合、異常と考えられる性質を多々発現することが知られる。その中でも、容易に原子価拡大しオクテット則を超えた価電子を有する化合物、すなわち超原子価化合物を比較的安定に形成することが挙げられる。当研究室ではこれまで高周期第 16 族元素を中心とした超原子価化合物、中でも炭素配位子のみを有する珍しい化合物の創製を行ってきた。最近、第 16 族元素化合物のみならず第 15、13 族元素にも着目し、高周期第 15、13 族元素を中心原子とした新たな結合形態を有する新規化学種の創製にも取り組んでいる。

（1）分子内配位部位を有する配位子を導入した高配位有機ニクトゲン化合物の合成と、その酸化反応による新規 7 配位ジカチオン化合物の創製

（2）ピンサー型配位子を有する新規 6 配位インジウム化合物の合成

（3）テルロニウム部位を有する新規三脚型四座配位子の合成とその配位能の検討

I. 原著論文

1. Fushimi, A.*, Saitoh, K., Fujitani, Y., and Takegawa, N., Identification of jet lubrication oil as a major component of aircraft exhaust nanoparticles, Atmos. Chem. Phys., 19, 6389-6399, 2019.

2. Ide, Y., Uchida K., and Takegawa, N.*, Ionization efficiency of evolved gas molecules from aerosol particles in a thermal desorption aerosol mass spectrometer: Numerical simulations, Aerosol Sci. Technol., 53, 843-852, 2019.

3. Saitoh, K.*, Fushimi, A., Sera, K., and Takegawa, N., Elemental analysis of jet engine lubrication oil and jet fuel using in-air PIXE, International Journal of PIXE, in press.

4. Sun, C., and Takegawa, N.*, Calibration of a particle mass spectrometer using polydispersed aerosol particles, Aerosol Sci. Technol., 53, 1-7, 2019.

5. Uchida, K., Ide, Y., and Takegawa, N.*, Ionization efficiency of evolved gas molecules from aerosol particles in a thermal desorption aerosol mass spectrometer: Laboratory experiments,

Aerosol Sci. Technol., 53, 86-93, 2019.

6. Sato, S., Studies on diverse chemical species derived from chalcogen atoms ~ The Footprint of Professor Naomichi Furukawa in Heteroatom Chemistry~, *Heteroatom Chem.*, *29*, e21475/1-e21475/13, 2019.

7. Rahman, M. M., Hassan, K., Hirabayashi, K., Sato, S., Shimizu, T. and Sugiura, K., -i., coordinated Sn(IV) porphyrins: Transmission-like motion of alcoholato-coordinated Sn(IV) porphyrin, *Polyhedron*, *171*, 128-136, 2019.

8. Ikeda, A., Shahed, R., Sato, S., Hirabayashi, K., Hada, M., Shimizu, T., and Sugiura, K.-i., Molecular structure and basic spectroscopic properties of 3-selenocyanatoindole: An important reference compound in organoselenium research, *Tetrahedron*, *75*, 130551/1-130551/7, 2019.

II. 著書、総説等

1. 齊藤勝美、伏見暁洋、藤谷雄二、森野悠、早乙女拓海、竹川暢之、世良耕一郎（2019）ジェットエンジンオイル・燃料と成田国際空港滑走路近傍で捕集した粒径別粒子（粒径10 nm-10 μm）の元素組成, NMCC 共同利用研究成果報文集 24, 41-52.

III.学会発表、講演等

1. 坂部将仁, 佐藤総一, ppy 配位子を 3 つ有する擬 6 配位ビスムチンの酸化反応, 第 99 回日本化学会春季年会, 兵庫県神戸市, 2019 年 3 月 16－19 日.

2. 伊藤大地、竹内陽祐、坂部将仁、佐藤総一, piq 配位子を有するカルコゲノニウム塩の合成とその構造, 第 99 回日本化学会春季年会, 兵庫県神戸市, 2019 年 3 月 16－19 日.

3. Fushimi, A., Saitoh, K., Fujitani Y., and Takegawa, N., Jet engine lubrication oil as major component of aircraft exhaust nanoparticles, 23rd ETH-Conference on Combustion Generated Nanoparticles, Zurich, Switzerland, June 18, 2019.

4. Saitoh, K., Fushimi, A., Fujitani, Y., and Takegawa, N., Characteristics of chemical composition for ultrafine particle collected at Narita International Airport, 23rd ETH-Conference on Combustion Generated Nanoparticles, ETH Zurich, Switzerland, June 17-20, 2019.

5. Sakurai, H., Murashima, Y., Fujitani, Y., and Takegawa, N., Accuracy of particle size distribution and number concentration measured by the Engine Exhaust Particle Sizer (EEPS) spectrometer for particles in the size range from 6 nm to 300 nm, ETH Zurich, Switzerland, June 17-20, 2019.

6. Sakabe, M., Ichimura, K., and Sato, S., Hypercoordinated stibinyl dications $[12\text{–}Sb\text{–}6]^{2+}$ stabilized By Intramolecular Coordination, 13th International Conference of heteroatom Chemistry (ICHAC-13), Prague, Czech Republic, June 30-July 5, 2019.

7. 竹川暢之, 三澤 健太郎, 伏見 暁洋, 村島 淑子, 桜井 博, 成田国際空港で測定された民間航空機からの粒子排出特性, 第 36 回エアロゾル科学・技術研究討論会 広島市, 2019

年9月6日.

8. 三澤 健太郎, 竹川 暢之, 藤谷 雄二, 伏見 暁洋, 村島淑子, 桜井 博, 航空機排ガスの粒子質量排出係数の推定, 第36回エアロゾル科学・技術研究討論会 広島市, 2019年9月6日.

9. 井手 佑, 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気化成分のイオン化効率, 第36回エアロゾル科学・技術研究討論会 広島市, 2019年9月6日.

10. 長崎 安奈, 池田 春輝, 竹川 暢之, ナノ粒子組成分析計評価のための航空機潤滑油粒子の生成, 第36回エアロゾル科学・技術研究討論会 広島市, 2019年9月4−6日.

11. 小林 優也, 井手 祐, 竹川 暢之, 難揮発性硫酸塩エアロゾル粒子のオンライン測定方法の開発, 第36回エアロゾル科学・技術研究討論会 広島市, 2019年9月4−6日.

12. 村島淑子, 桜井 博, 藤谷雄二, 竹川暢之, Engine Exhaust Particle Sizer Spectrometer（EEPS）の個数濃度測定精度の評価方法, 第36回エアロゾル科学・技術研究討論会 広島市, 2019年9月4−6日.

13. 竹川 暢之, 三澤 健太郎, 伏見 暁洋, 村島淑子, 桜井 博, 航空機ナノ粒子の物理・化学特性 (1): 粒子数濃度, 第60回大気環境学会年会, 東京都府中市, 2019年9月20日.

14. 村島 淑子, 桜井 博, 藤谷 雄二, 竹川 暢之, 航空機ナノ粒子の物理・化学特性 (2)： 粒径分布測定器の評価, 第60回大気環境学会年会, 東京都府中市, 2019年9月20日.

15. 三澤 健太郎, 藤谷 雄二, 伏見 暁洋, 村島 淑子, 桜井 博, 竹川 暢之, 航空機ナノ粒子の物理・化学特性 (3)： 粒子質量排出係数, 第60回大気環境学会年会, 東京都府中市, 2019年9月20日.

16. 伏見 暁洋, 齊藤 勝美, 藤谷 雄二, 竹川 暢之,航空機ナノ粒子の物理・化学特性 (4): 有機組成と起源, 第60回大気環境学会年会, 東京都府中市, 2019年9月20日.

17. 齊藤 勝美, 伏見 暁洋, 藤谷 雄二, 竹川 暢之, 航空機ナノ粒子の物理・化学特徴 (5)： 化学組成, 第60回大気環境学会年会, 東京都府中市, 2019年9月20日.

18. Takegawa, N., Misawa, K., Fushimi, A., Murashima Y., and Sakurai, H., Particle emissions from in-use commercial aircrafts observed at the Narita International Airport, American Association for Aerosol Research (AAAR) 37th Annual Conference, Portland, OR, USA, October 17, 2019.

19. Ide, Y., Uchida, K., and Takegawa, N., Ionization efficiency of evolved gas molecules from aerosol particles in a thermal desorption aerosol mass spectrometer, AAAR 37th Annual Conference, Portland, OR, USA, October 16, 2019.

20. Murashima, Y., Sakurai, H., Fujitani, Y., and Takegawa, N., Laboratory evaluation of an Engine Exhaust Particle Sizer (EEPS) spectrometer for fast measurements of particle number size distributions in aircraft exhaust plumes, AAAR 37th Annual Conference, Portland, OR, USA, October 14-18, 2019.

21. Fushimi, A., Saitoh, K., Fujitani, Y., and Takegawa, N., Aircraft exhaust nanoparticles: great contribution of jet engine lubrication oil, AAAR 37th Annual Conference, Portland, OR, USA, October 14-18, 2019.

22. Kobayashi, Y., Ide, Y., and Takegawa, N., Development of a novel particle mass spectrometer for online measurements of refractory sulfate aerosols, AAAR 37th Annual Conference, Portland, OR, USA, October 14-18, 2019.

23. 竹川 暢之, 村島 淑子, 伏見 暁洋, 三澤 健太郎, 藤谷 雄二, 齊藤 勝美, 桜井 博, 航空機からのナノ粒子排出特性, 第 24 回大気化学討論会, 愛知県蒲郡市, 2019 年 11 月 5 日.

24. Takegawa, N., Seto, T., Moteki, N., Koike, M., Oshima, N., Adachi, K., Kita, K., Takami, A., and Kondo, Y., Enhanced new particle formation above the marine boundary layer over the Yellow Sea, Asian Chemical Congress, Taipei, Taiwan, December 9, 2019 (invited).

25. 坂部将仁, 佐藤総一, 7 配位スチボニウムカチオン$[14\text{–}Sb\text{–}7]^{+}$の合成とその構造, 優秀講演賞, Chemistry Letters Young Award 受賞, 第 46 回有機典型元素化学討論会, 愛媛県松山市, 2019 年 12 月 5－7 日.

Ⅳ.その他
なし

無機化学研究室

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．

<担持金属クラスター触媒の精密合成とその触媒作用解明>

100 原子以下の金属原子で構成される金属クラスターはバルクの金属からは予想できない幾何構造・電子状態を持つことから，元素の通念を覆す新しい機能性材料の開発が期待できる．当研究室では，原子レベルでサイズ・組成を制御した担持金属クラスター触媒を精密合成し，その触媒作用の原子レベル解明を進めている．担持金属クラスターの触媒作用はその幾何構造によっても左右されるが，その幾何構造を解明することが極めて困難である．当研究室では，担持金属クラスターの構造を解明するため，放射光施設を利用したX線吸収分光法や高エネルギーX線回折法を利用した構造解析も進めている．

<金属酸化物クラスターの酸・塩基発現原理解明>

近年，バルクでは酸触媒として機能する金属酸化物をクラスター化することで逆の塩基触媒として機能することを当研究室では見出している．そこで，サイズや幾何構造が原子レベルで均一な金属酸化物クラスターを合成し，その酸・塩基性を電子構造・幾何構造の観点から調べることで酸・塩基発現原理の解明を進めている．最近の研究で，表面の酸素原子の電子密度に加え，その周辺の幾何構造が塩基強度に寄与していることを突き止めている．

<金属酸化物クラスターによる二酸化炭素固定化反応>

環境問題の観点から，二酸化炭素を化成品に変換する技術の開発が望まれているが，従来の触媒反応系では高温高圧条件が必要である．当研究室では，地球温暖化物質である二酸化炭素を原料として，アミン化合物やニトリル化合物から有用な化成品を合成可能な新しい金属酸化物クラスター触媒の開発を目指している．目的を達成するために金属クラスターのサイズ・組成を原子レベルで緻密制御し，二酸化炭素を活性化可能な電子密度の高い表面酸素原子（活性点，ルイス塩基点）を持つクラスター触媒の設計と創製を進めている．また，開発したクラスター表面で活性化された二酸化炭素の高い求核性を利用してアミン化合物やニトリル化合物と反応させることでC–N結合の形成を伴う二酸化炭素変換反応系の開発を行っている．

<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が捕集されたろ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ルーチン的に定量を行なった．これまで詳細がわからなかった関東地方の3月末の放射性プルームの様子を明らかにした．

<大気微小粒子 PM2.5 の元素組成>

大気中に浮遊している粒子状物質には様々な粒子径のものが存在する．近年，特にPM2.5と呼ばれる非常に小さな粒子(空気力学動径 2.5μm 以下)の人間の健康に及ぼす影響が注目されている．これらの粒子中の有機化合物，特に有害だと考えられているや揮発性有機化合物や多環芳香族炭化水素が盛んに分析されているが，元素組成等無機分析も粒子のキャラクタリゼーションには欠かせない．我々は，2005年より5年間にわたりPM2.5粒子を八王子市と江東区において捕集し，中性子放射化分析法(INAA)で元素組成を調べ，これらの都市で特徴的な元素を明らかにした．この間，東京都ではディーゼル車規制等の施策が行なわれ、現在、PM2.5 の環境基準は毎年ほぼ達成されている．そこで，現在の PM2.5 の元素組成を INAA で調べ、約10年前とどのようにかわっているか調べた．

＜単一コンパレータ法の光量子放射化分析への適用＞

光量子放射化分析法(PAA)は、中性子放射化分析法(NAA)と同様に，高感度非破壊多元素同時分析法である．これまで，PAAユーザーが利用するための，光核反応収率の測定をおこなってきた．放射化分析は比較法を用いて定量が行なわれことが多いが，この方法は定量目的全元素の濃度が既知の試料を同時に照射する必要がある。一方，単一コンパレータ法はある一つの元素の濃度既知試料を照射するだけで，全元素が定量可能である。そこで，我々が定量してきた光核反応収率を用いた単一コンパレータ法をPAAに適用した．さまざまな標準物質を試料として，定量値の正確さを評価した．

＜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，その後の変成活動をほとんど，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．HED 隕石とはホワルダイト，ユークライト，ダイオジェナイトとよばれる隕石種を総称した名前で，小惑星4ベスタを起源とすると考えられている隕石グループで，代表的な分化隕石である．これらの隕石の主成分元素から極微量元素までの化学組成を放射化分析法で正確に求め，それらの隕石の生成した太陽系初期の環境を考察した．

I. 原著論文

01. S. Yamazoe, T. Tsukuda
″X-Ray Absorption Spectroscopy on Atomically Precise Metal Clusters″
Bull. Chem. Soc. Jpn., 92, 193-204 (2019).

02. H. Asakura, S. Yamazoe, T. Misumi, A. Fujita,T, Tsukada, T. Tanaka
″xTunes: A new XAS processing tool for detailed and on-the-fly analysis″
Rad. Phys. Chem., in press (2020).

03. W. Kurasige, R. Hayashi, K. Wakamatsu, Y. Kataoka, S. Hossain, A. Iwase, A. Kubo, S. Yamazoe, Y. Negishi
″Atomic-Level Understanding of Effect of Heteroatom Doping of the Cocatalyst on Water-Splitting Activity in AuPd or AuPt Alloy Cluster-Loaded $BaLa_4Ti_4O_{15}$″
ACS Appl. Energy Mater., 2, 4175-4187 (2019).

04. M. Miyazaki, S. Furukawa, T. Takayama, S. Yamazoe, T. Komatsu

"Surface Modification of PdZn Nanoparticles via Galvanic Replacement for the Selective Hydrogenation of Terminal Alkynes"
ACS Appl. Nano Mater., 2, 3307-3314 (2019).

05. K. Nomura, T. Mitsudome, S. Yamazoe
"Direct observation of catalytically active species in reaction solution by X-ray absorption spectroscopy (XAS)"
J. Appl. Phys., 58, 100502 (2019).

06. K. Beppu, S. Yamazoe, A. Yamada, K. Nitta, T. Uruga, T. Wada
"Structural analysis of $Cu(In,Ga)Se_2$ thin-films by depth-resolved XAFS"
Jpn. J. Appl. Phys., 58, 105502 (2019).

07. D. Guzmána, M. Isaacsb, T. Tsukuda, S. Yamazoe, R. Takahata, R. Schrebler, A. Burgos, I. Osorio-Román, F. Castillo
"CdTe quantum dots modified electrodes ITO-(Polycation/QDs) for carbon dioxide reduction to methanol"
Appl. Surf. Sci, 509, 145386 (2020).

08. K. Kimura, K. Yamamoto, K. Hayashi, S. Tsutsui, N. Happo, S. Yamazoe, H. Miyazaki, S. Nakagami, J. R. Stellhorn, S. Hosokawa, T. Matsushita, H. Tajiri, A. K. R. Ang Y. Nishino
"Local structure and atomic dynamics in Fe_2VAl Heusler-type thermoelectric material: The effect of heavy element doping"
Phys. Rev. B, 101, 024302 (2020).

09. Y. Negishi, N. Shimizu, K. Funai, R. Kaneko, K. Wakamatsu, A. Harasawa, S. Hossain, M. E. Schuster, D. Ozkaya, W. Kurashige, T. Kawawaki, S. Yamazoe, S. Nagaoka
"γ-Alumina-supported Pt_{17} cluster: controlled loading, geometrical structure, and size-specific catalytic activity for carbon monoxide and propylene oxidation"
Nanoscale Advances, 2, 669 (2020).

10. W. Kurashige, Y. Mori, S. Ozaki, M. Kawachi, S. Hossain, T. Kawawaki, C. J. Shearer, A. Iwase, G. F. Metha, S. Yamazoe, A. Kudo, Y. Negishi
"Activation of Water-Splitting Photocatalysts by Loading with Ultrafine Rh-Cr Mixed-Oxide Cocatalyst Nanoparticles"
Angew. Chem. Int. Ed., in press (2020).

11. R. Takahata, S. Yamazoe, Y. Maehara, K. Yamazaki, S. Takano, W. Kurashige, Y. Negishi, K. Gohara, T. Tsukuda
"Electron Microscopic Observation of an Icosahedral Au_{13} Core in $Au_{25}(SePh)_{18}$ and Reversible Isomerization between Icosahedral and Face-Centered Cubic Cores in $Au_{144}(SC_2H_4Ph)_{60}$"
J. Phys. Chem. C., in press (2020).

12. 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-speading due to the 2011 Fukushima Nuclear Accident by means of Measuring ^{129}I in Airbone Particulate Matter"
J. Environ. Radioact., 208-209, 106000 (2019).

13. Y. Hidaka, N. Shirai, A. Yamaguchi, and M. Ebihara
"Siderophile element characteristics of acaulcoite-lodranites and winonaites: Implications for the early differentiation processes of their parent bodies."
Meteorit. Planet. Sci. 54, 1153-1166 (2019).

14. S. Sekimoto, Y. Homura, V. D. Ho, M. Inagaki, N. Shirai and T. Ohtuski
"Neutron activation analysis of carbonate reference materials: coral (ICp-1) and giant clam (JCt-1)."
J. Radioanal. Nucl. Chem. 322, 1597-1583 (2019).

II. 著書、総説等

01. M.S.Reza, R.Taniguchi, J.Kaneko, and Y.Oura
"Application of Single Comparator Method to Instrumental Photon Activation Analysis"
ELPH ANNUAL REPORT 2018, 107-111 (2019)

III. 学会発表、講演等

01. Motoo Ito, Naotaka Tomioka, Masayuki Uesugi, Kentaro Uesugi, Takuji Ohigashi, Akira Yamaguchi, Naoya Imae, Yuzuru Karouji, Naoki Shirai, Toru Yada and Masanao Abe
「Phase 2 Curation "Team Kochi" for Hayabusa2 returned sample: in-depth analysis of a single grain utilizing linkage microanalytical instruments」
50th Lunar and Planetary Science Conference 2019 (2019.3, Woodlands)

02. Jisun Park, Keisuke Nagao, Laurence E. Nyquist, Gregory F. Herzog, Hyesun Choi, Min Kim Baek, C. Park, J. I. Lee, M. J. Lee, Michael. K. Weisberg, Denton S. Ebel, Brent D, Turrin, Akira Yamaguchi, Naoki Shirai, Mitsuru Ebihara
「Noble gas studies of lunar and enstatite meteorites」
50th Lunar and Planetary Science Conference 2019 (2019.3, Woodlands)

03. 藤木裕宇, 松山知樹, 高谷光, 安田伸広, 中谷直輝, 山添誠司
「カウンターアニオンによるホスフィン保護合金クラスターの構造異性化」
ナノ学会第17回大会 (2019.5, 鹿児島)

04. 松山知樹, Sakiat Hossain, 藏重亘, 朝倉博行, 河村直己, 根岸雄一, 中谷直輝, 山添誠司
「X線吸収分光法を用いた配位子保護合金クラスターの電子状態解析」

ナノ学会第17回大会（2019.5, 鹿児島）

05. Akira Yamaguchi, Naoki Shirai, Makiko Haba
「Bulk chemical analysis of iron meteorites by LA-ICP-MS」
日本地球惑星科学連合2019年大会(2019.5, 千葉)

06. Motoo Ito, Naotaka Tomioka, Masayuki Uesugi, Kentaro Uesugi, Takuji Ohigashi, Akira Yamaguchi, Naoya Imae, Yuzuru Karouji, Naoki Shirai, Toru Yada and Masanao Abe
「Analysis of the grain from the asteroid Ryugu proposed by the Phase 2 curation “Team KOCHI”」
日本地球惑星科学連合2019年大会(2019.5, 千葉)

07. Motoo Ito, Naotaka Tomioka, Masayuki Uesugi, Kentaro Uesugi, Takuji Ohigashi, Akira Yamaguchi, Naoya Imae, Yuzuru Karouji, Naoki Shirai, Toru Yada and Masanao Abe
「The Ryugu grain analysis: Approach by the Phase 2 curation “Team KOCHI”」
The 82nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (2019.7, 北海道)

08. Takashi Mikouchi, Akira Yamaguchi, Naoki Shirai, Junko Isa, Mutsumi Komatsu, Shinichi Kawakami, Nagayoshi Katsuta, Tooru. Kawamata, K.azumasa Sugiyama
「Nagara: A new Japanese IAB iron meteorite find」
The 82nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (2019.7, 北海道)

09. Yoshihiro Hidaka, Makiko Haba, Naoki Shirai, Akira Yamaguchi, Vinciane Debaille
「In-situ chemical analyses of winonaite metals: Implications for the origin of IAB non-magmatic iron meteorites」
The 82nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (2019.7, 北海道)

10. Masayuki Uesugi, Kentaro Uesugi, Motoo Ito, Naotaka Tomioka, Takuji Ohigashi, Akira Yamaguchi, Naoya Imae, Yuzuru Karouji, Naoki Shirai, Toru Yada and Masanao Abe
「Preparation for the analysis of Hayabusa2 returned samples.」
The 82nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (2019.7, 北海道)

11. Naoki Shirai and Mitsuru Ebihara
「Siderophile element fractionation in impact glass from the Wabar impact crater.」
The 82nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (2019.7, 北海道)

12. Akiko Nakato, Adrian J. Brearley, Tomoki Nakamura, Takaaki Noguchi, Yoko Kebukawa, Jong I. Lee, Megumi Matsuoka, Shou Sasaki and Naoki Shirai
「Thermal history of carbonaceous chondrite Pecore Escarpment 02012.」
The 82nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (2019.7, 北海道)

13. Genevieve. Hublet, Akira Yamaguchi, Vinciane Debaille, Naoki Shirai and Makoto Kimura
「Geochemical study of type 3 ordinary chondrites.」
The 82nd Annual Meeting of the Meteoritical Society (2019.7, 北海道)

14. Vorakit Chudatemiya, 松山知樹, 高谷光, 安田伸広, 山添誠司
「Synthesis of Phosphine-protected Gold Clusters Modified with Metal Ions」
第１３回分子科学討論会 (2019.9, 愛知)

15. 松山知樹, 藤木裕宇, 平山純, 高谷光, 安田伸広, 中谷直輝, 山添誠司
「ポリオキソメタレートによるホスフィン保護金属クラスターの構造異性化」
第１３回分子科学討論会 (2019.9, 愛知)

16. 山添誠司
「精密合成したクラスター材料の触媒特性」
第124回触媒討論会 (2019.9, 長崎) (依頼講演)

17. 藤木裕宇, 平山純, 山添誠司
「5族金属酸化物クラスターによる二酸化炭素固定化反応」
第124回触媒討論会 (2019.9, 長崎)

18. 澁澤一輝, 平山純, 根岸雄一, 佃達哉, 山添誠司
「金属酸化物に内包された金クラスター触媒の精密合成とその触媒特性」
第124回触媒討論会 (2019.9, 長崎)

19. 山口亮, 白井直樹, J.-A. Barrat
「鉄に富むダイオジェナイトの成因」
2019年度日本地球化学会年会 (2019.9, 東京)

20. 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, 末木啓介, 鶴田治雄, 森口祐一
「福島第一原発事故の初期段階に放出された放射性粒子の放射光X線分析および事故事象の考察」
第55回X線分析討論会 (2019.10, 福島)

21. 山添誠司
「Catalysis of Atomically Precise Metal/Metal Oxide Clusters」
Johnson Matthey Japan Academic Conference 2019 (2019.11, 栃木) (invited)

22. 山添誠司
「XAFSによる精密合成した金属クラスターの構造・物性解明」
PF研究会「XAFS・X線顕微鏡分光分析分野でのIMSS, PF戦略的利用に関する研究会」(2019.11, 茨城) (依頼講演)

23. Yasuji Oura
「Photon Activation Analysis: Applications at Linac in Tohoku University」

15th International Conference on Modern Trends in Activation Analysis (MTAA-15) (2019.11, Mumbai, India) (invited)

24. Yasuji Oura, Yuki Yamaguchi, Hiroshi Terasaki, M. Sultanur Reza
「Determination of Photonuclear Reaction Yield Ratios at E0 = 20, 25, and 30 MeV for Photon Activation Analysis」
15th International Conference on Modern Trends in Activation Analysis (MTAA-15) (2019.11, Mumbai, India)

25. M. Sultanur Reza. R. Taniguchi, Y. Oura
「Application of Single Comparator Method to Photon Activation Analysis」
15th International Conference on Modern Trends in Activation Analysis (MTAA-15) (2019.11, Mumbai, India)

26. 山添誠司
「放射光を用いた金属クラスターの構造・物性解明」
第8回SPring-8グリーンサスティナブルケミストリー研究会/第47回SPring-8先端利用技術ワークショップ触媒開発の最前線ー放射光を用いた触媒構造・活性発現因子の解明ー（2019.12, 東京）（依頼講演）

27. 藤木裕宇, 平山純, 山添誠司
「金属酸化物クラスター塩基触媒を用いた低濃度での二炭素固定反応」
第125回触媒討論会（2020.3, 東京）

28. Yu Fujiki, Jun Hirayama, Seiji Yamazoe
「Base Catalytic Properties of Polyanionic Metal Oxide Clusters」
Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (2020.2, Thailand)

29. 大浦泰嗣
「光核反応収率の放射化学的測定と放射化分析への応用」
ELPHシンポジウム2020（2020.3, 仙台）

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 測定の感度増大の 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. Takashi Tanaka, Teppei Ikeya, Hajime Kamoshida, Yusuke Suemoto, Masaki Mishima, Masahiro Shirakawa, Peter Güntert, Yutaka Ito "High-Resolution Protein 3D Structure Determination in Living Eukaryotic Cells." *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 59, 7284-7288 (2019) DOI: 10.1002/anie.201900840

02. Takuro Wakamoto, Teppei Ikeya, Soichiro Kitazawa, Nicola J. Baxter, Mike P. Williamson, Ryo Kitahara "Paramagnetic relaxation enhancement-assisted structural determination of a partially disordered conformation of ubiquitin", *Protein Sci.* 28(11),1993-2003 (2019) DOI: 10.1002/pro.3734

03. Takahiro Aizu, Takumi Suzuki, Akihiro Kido, Kan Nagai, Ayaho Kobayashi, R. Sugiura, Yutaka Ito, Masaki Mishima "Domain selective labeling for NMR studies of multidomain proteins by domain ligation using highly active sortase A." *Biochim. Biophys. Acta. Gen. Subj.* 1864, 129419 (2020) DOI: 10.1016/j.bbagen.2019.129419

04. Toshihiko Sugiki, Yoshihiro Yamaguchi, Toshimichi Fujiwara, Masayori Inouye, Yutaka Ito, Chojiro Kojima "In-cell NMR as a sensitive tool to monitor physiological condition of *Escherichia coli*" *Sci. Rep.* 10, 2466 (2020) DOI: 10.1038/s41598-020-59076-2.

II. 著書，総説等

01. Teppei Ikeya, Peter Güntert, Yutaka Ito "Protein Structure Determination in Living Cells." *Int. J. Mol. Sci.* 20, E2442 (2019) DOI: 10.3390/ijms20102442.

02. Noritaka Nishida, Yutaka Ito, Ichio Shimada "*In situ* structural biology using in-cell NMR." *Biochem. Biophys. Acta. Gen. Subj.* 1864, S0304-4165(19)30128-X (2020) DOI: 10.1016/j.bbagen.2019.05.007

03. Yutaka Ito, Volker Dötsch, Masahiro Shirakawa "In-Cell NMR Spectroscopy: From Molecular Sciences to Cell Biology", 共著，Royal Society of Chemistry (2019) ISBN-13: 978-1788012171

04. Teppei Ikeya, Peter Güntert, Yutaka Ito "Protein Structure Determination in Living Cells from NOE-derived Distance Restraints", 上記 3 の書籍の Chapter 5

05. 池谷鉄兵「NMR による生体高分子立体構造計算の基礎と最近の進展」，日本核磁気共鳴学会学会誌 10, 82-96 (2019)

III. 学会発表，講演等

01. Yutaka Ito, Teppei Ikeya "Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living eukaryotic cells" 33rd Annual Symposium of the Protein Society, Seattle, USA, 2019 年 6 月 30 日-7 月 3 日（招待講演）

02. Teppei Ikeya, Yutaka Ito "High resolution protein 3D structure determination in living eukaryotic cells", the 8th Asia Pacific NMR Symposium, Singapore, 2019 年 7 月 3-6 日（招待講演）

03. 池谷鉄兵 "MD シミュレーション vs　NMR 立体構造計算(multi-state 立体構造計算)", 第 20 回若手 NMR 研究会，愛知県蒲郡，2019 年 8 月 2-4 日　（招待講演）

04. 伊藤隆，池谷鉄兵　"溶液 NMR を用いた in situ 構造生物学" 第 13 回バイオ関連化学シンポジウム 2019　2019 年 9 月 5 日、仙台（招待講演）

05. Hisham Dokainish, Yusuke Suemoto, Teppei Ikeya, Takuma Kasai, Takanori Kigawa, Yutaka Ito, Yuji Sugita "Dynamics and interdomain interactions in a Drosophila adapter protein (Drk) and theircorrelation to the unfolding of the N-SH3 domain", 第 57 回日本生物物理学会年会，宮崎，2019 年 11 月 24-26 日

06. Takumi Suzuki, Takahiro Aizu, Yutaka Ito, Masaki Mishima "Robust synthesis

methods of various ubiquitin chains", 第57回日本生物物理学会年会, 宮崎, 2019年11月24-26日

07. Taiki Koizumi, Hiroki Nakajima, Yutaka Ito, Masaki Mishima "Direct observation of hydrogen bonds by solution NMR", 第57回日本生物物理学会年会, 宮崎, 2019年11月24-26日

08. 池谷鉄兵 "磁性効果による遠距離構造情報を利用したタンパク質multi-state立体構造解析", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日 (招待講演)

09. 高田夢人, 小泉大貴, 中島弘稀, 伊藤隆, 三島正規 "水素結合のNMRによる観測", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

10. 鈴木拓巳, 高田夢人, 伊藤隆, 三島正規 "多様なユビキチン鎖のロバストな合成法とNMR法への応用", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

11. 田岸亮馬, 田中孝, 三島正規, 池谷鉄兵, 伊藤隆 "分子クラウディング環境下の蛋白質の緩和解析", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

12. 田端真彩子, 池谷鉄兵, 彦根佑哉, 岡田真由, 田岸亮馬, 八木宏昌, 木川隆則, 三島正規, 伊藤隆 "PRE,PCSを用いた蛋白質立体構造解析のための常磁性金属タグの性能評価", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

13. 高田夢人, 伊藤隆, 三島正規 "NMRによる種々の水素結合の検", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

14. 小泉太貴, 会津貴大, 伊藤隆, 広瀬侑, 三島正規 "シアノバクテリア由来GAFドメインのNMRによる構造解析", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

15. 亀井駿, 池谷鉄兵, 田仲加代子, 伊藤隆 "分子混雑環境下のRas蛋白質の動態解析", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

16. 小泉太貴, 会津貴大, 伊藤隆, 広瀬侑, 三島正規 "シアノバクテリア由来GAFドメインのNMRによる構造解析", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

17. 立石泰, 池谷鉄兵, 岡田真由, 三島正規, 美川務, 八木宏昌, 河野俊之, 木川隆則, 伊藤隆 "常磁性NMRを用いたYeast Ubiquitin hydrolase 1 (YUH1) の構造決定及びダイナミクス解析", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

18. 中島弘稀, 小泉太貴, 伊藤隆, 海野昌喜, 三島正規 "フェレドキシンタンパク質の水素

結合の直接観", 第58回NMR討論会, 川崎, 2019年11月7-9日

19. Teppei Ikeya "Multi-state protein structure determination by integrated analysis of several NMR data sets", IPR seminar, Osaka, 2019年11月19-20日 (招待講演)

20. Takashi Tanaka, Teppei Ikeya, Masaki Mishima, Peter Güntert, Yutaka Ito "High-resolution protein 3D structure determination in living eukaryotic cells", The 12th Australian and New Zealand Society for Magnetic Resonance (ANZMAG), Australia Pullman Bunker Bay, 2019年11月25-28日 (招待講演)

21. Yutaka Ito, Teppei Ikeya "Solution NMR approaches to 3D structure determination of proteins in living eukaryotic cells", 日本分子生物学会年会, 神戸, 2019年12月3-6日

22. 岩戸将貴, 飯田高広, 三島正規, 池上貴久, 武藤 梨沙 "時計タンパク質Kai複合体の機能と構造解析", 第44回日本分子生物学会年会, 神戸, 2019年12月3-6日

23. 伊藤隆 「趣意説明」 日本化学会第100春季年会 中長期テーマシンポジウム「高度細胞機能を解析する分子動態計測と情報科学との融合」日本化学会第100春季年会, 千葉, 2020年3月22-25日

24. 池谷鉄兵, 田中孝, 立石泰, 岡田真由, Peter Güntert, 伊藤隆 "生細胞内のタンパク質立体構造解析", 日本化学会第100春季年会, 千葉, 2020年3月22-25日 (招待講演)

有機化学研究室

有機化学研究室では、有機金属化学や分子触媒化学を基盤に、環境調和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・合成と、その特徴を生かした有機高機能材料の創成に関する研究課題に取り組んでいる。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手法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共役系化合物の合成と特性解析に関する研究にも取り組んでいる。

（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
有機金属化学や分子触媒化学を基盤に、特にオレフィン系高分子機能材料やファインケミカルズ（医農薬や電子･光学材料などの精密化学品など）を、副生物をできる限り削減して、効率よく合成するための高性能分子（錯体）触媒の設計・合成、及び触媒の特徴を活かした有機高機能材料の精密合成と特性解析に関する研究に取り組んでいる。
（2）高反応性有機金属化学種の合成･同定と反応化学
合成化学における重要な素反応である炭素－炭素結合形成反応の重要な反応中間体である金属－炭素結合を有する化学種（有機金属錯体）の単離・同定・構造決定とその反応化学や反応機構解析を通じて、関連の有機金属化学の学理や高性能分子触媒の設計指針の確立に向けた基礎研究に取り組んでいる。
（3）新しい有機高機能材料の精密合成と特性解析
優れた光や電子機能を持つ有機半導体となるπ電子系化合物、特に独自の効率炭素－炭素結合形成を基盤とする精密合成手法の特徴を活かした、機能集積型の新規高機能材料の設計･合成と特性解析に関する基礎研究に取り組んでいる。

内容：有機金属化学、分子触媒化学、有機合成化学、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. H. Hayashibara, A. Ngamnithiporn, K. Nomura
"Reactions of (arylimido)vanadium(V)-trialkyl complexes with phenols: Effects of arylimido ligands and phenols for formation of the vanadium phenoxides"
ACS Omega, 4, 5818-5828 (2019).

02. M. Kuboki, K. Nomura
"(Arylimido)niobium(V) complexes containing 2-pyridylmethylanilido ligandas catalyst precursors for ethylene dimerization that proceeds via cationic Nb(V) species"
Organometallics, 38, 1544-1559 (2019).

03. D. Le, C. Samart, S. Kongparakul, K. Nomura
"Synthesis of new polyesters by acyclic diene metathesis polymerization of bio-based α,ω-dienes prepared from eugenol and castor oil (undecenoate)"
RSC Adv., 9, 10245-10252 (2019).

04. S. Shitaya, K. Nomura, A. Inagaki
"Light-driven catalytic hydrogenation of carbon dioxide at low-pressure by a trinuclear iridium polyhydride complex"
Chem. Commun., 55, 5087-5090 (2019).

05. K. Nomura, S. Pengoubol, W. Apisuk
"Synthesis of ultrahigh molecular weight polymers with low PDIs by polymerizations of 1-decene, 1-dodecene, and 1-tetradecene by $Cp^{*}TiMe_2(O\text{-}2,6\text{-}{}^{i}Pr_2C_6H_3)$–Borate Catalyst"
Molecules, 24, 1634 (2019). *Special Issue "Well-Defined Metal Complex Catalysts for Olefin Polymerization" Invited*

06. P. Unruean, W. Apisuk, Y. Kawabata, T Murayama, B. Kitiyanan, K. Nomura
"Effect of supported MAO cocatalysts in ethylene polymerization and ethylene/1-hexene copolymerization using $Cp^{*}TiCl_2(O\text{-}2,6\text{-}{}^{i}Pr_2C_6H_3)$ catalyst"
Molecular Catalysis, 475, 110490 (2019). *Special Issue dedicated to Prof. A. Fukuoka, Invited*

07. Y. Sofue, K. Nomura, A.Inagaki
"Synthesis and photocatalytic activities of dinuclear iridium poly-hydride complexes bearing BINAP ligands"
Organometallics 2019, 38, 2408-2411.

08. K. Nomura, G. Nagai, A. Nasr, K. Tsutsumi, Y. Kawamoto, K. Koide, M. Tamm
"Synthesis of half-titanocenes containing anionic *N*-heterocyclic carbenes that contain a weakly coordinating borate moiety (WCA-NHC), $Cp'TiX_2$(WCA-NHC), and their use as catalysts for ethylene (co)polymerization"
Organometallics, 38, 3233-3244 (2019).

09. K. Nomura, G. Nagai, I. Izawa, T. Mitsudome, M. Tamm, S. Yamazoe
"XAS Analysis for reactions of (arylimido)vanadium(V) dichloride complexes containing anionic NHC that contains weakly coordinating $B(C_6F_5)_3$ moiety (WCA-NHC) or phenoxide ligands with Al alkyls: A potential ethylene polymerization catalyst with WCA-NHC ligand"
ACS Omega, 4, 18833-18845 (2019). *Invited submission*

10. K. Nomura, I. Izawa, J. Yi, N. Nakatani, H. Aoki, T. Ina, T. Mitsudome, N. Tomotsu, S. Yamazoe
"Solution XAS analysis for exploring active species in syndiospecific styrene polymerization and 1-hexene polymerization using half-titanocene – MAO catalysts: Significant changes in the oxidation state in the presence of styrene"
Organometallics, 38, 4497-4507 (2019).

11. K. Nomura, S. Pengoubol, W. Apisuk
"Synthesis of ultrahigh molecular weight polymers containing reactive functionality with low PDIs by polymerizations of long-chain α-olefins in the presence of their nonconjugated dienes

by $Cp^*TiMe_2(O\text{-}2,6\text{-}{}^{i}Pr_2C_6H_3)$–borate catalyst"
Polymers, 12, 3 (2020). *Special issue "Catalytic Polymerization" dedicated to Prof. Tritto. Invited*

12. J. Yi, N. Nakatani, K. Nomura, M. Hada
"Time-dependent DFT study of the K-edge spectra of vanadium and titanium complexes: effects of chloride ligands on pre-edge features"
Phys. Chem. Chem. Phys, 22, 674-682 (2020).

II. 著書、総説等

1. 野村琴広
"環状オレフィンの開環メタセシス重合のための高性能分子触媒の設計・創製"
触媒, 61, 144-149 (2019). 特集号（依頼）：精密高分子合成に関する最近の研究動向
2. K. Nomura, S. Chaimongkolkunasin
"(Arylimido)vanadium(V)-alkylidene complexes as catalysts for ring-opening metathesis polymerization (ROMP) of cyclic olefins: Ligand design for exhibiting the high activity"
Chin. J. Polym. Soc., 87, 943-950 (2019). *Feature article for special issue of "The 100th Anniversary of the Birth of Prof. Shi-Lin Yang" Invited*
3. K. Nomura
"Well-defined end-functionalized conjugated polymers/oligomers exhibiting unique emission properties through the end-groups: The exclusive synthesis by combined olefin metathesis with Wittig-type coupling"
Macromol. Mater. Eng., 304, 1900307 (2019). *Feature article for special ICAPPP2018 issue (30th anniversary of the Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University). Invited*
4. K. Nomura, T. Mitsudome, S. Yamazoe
"Direct observation of catalytically active species In reaction solution by X-ray absorption spectroscopy (XAS)"
Jpn. J. Appl. Phys., 58, 100502 (2019). *Selected Topics in Applied Physics (STAP) Review. Invited*
5. K. Nomura
"Solution X-ray absorption spectroscopy (XAS) for analysis of catalytically active species in reactions with ethylene by homogeneous (imido)vanadium(V) complexes – Al cocatalyst systems"
Catalysts, 9, 1016 (2019). *Feature article, Invited*
6. 野村琴広
"オレフィンメタセシス重合"
（著書分担）基礎高分子科学, 高分子学会（編）, 東京化学同人 (2020).

7. 野村琴広
"アニオン性ボレート含有 N-ヘテロ環状カルベン（WCA-NHC）配位子を有するイミド配位バナジウム錯体：新しい高活性エチレン重合触媒"

「次世代ポリオレフィン総合研究」，郷 茂夫, 寺野 稔（編），13, 42-46 (2019).

8. K. Nomura
   "Vanadium catalysed olefin metathesis and related chemistry"
   Vanadium Catalysis, A. Pombeiro et al. (Eds.), RSC Publishing, submitted by invitation (2020).
9. K. Nomura
   "Vanadium"
   Comprehensive Coordination Chemistry III, Elsevier, submitted by invitation (2020).
   （著書分担）現代有機合成のための触媒反応, 有機合成化学協会(編), 東京化学同人 (2020)

学会発表、講演等

1. K. Nomura
   "Vanadium- and niobium-alkylidene complexes catalysts for olefin metathesis polymerization"
   102nd Canadian Chemistry Conference and Exhibition (ケベック, カナダ, 6 月, 2019).
   Keynote 講演
2. 野村琴広
   "精密重合と定量的な末端官能基化を基盤とする新しい集積型光機能材料の創製"
   高分子学会関東支部 第 60 回茨城地区活動講演会 (つくば, 6 月, 2019). 招待講演
3. K. Nomura
   "Olefin insertion copolymerization and ring opening metathesis polymerization with cyclic olefins"
   2019 US-Japan Polymer Symposium: -Macromolecules: Challenges and Opportunities for the 21 st Century- (スタンフォード大学, カリフォルニア, アメリカ, 6 月, 2019).
   招待講演
4. K. Nomura
   "Half-titanocene catalysts for synthesis of new polyolefins by ethylene copolymerizations, and solution XAS for analysis of active species"
   5th Blue Sky Conference on Catalytic Olefin Polymerization (ナポリ, ソレント, イタリア, 6 月, 2019). 招待講演
5. K. Nomura
   "Vanadium-, niobium-alkylidene catalysts for olefin metathesis polymerisation"
   23rd International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry (ISOM23) (バルセロナ, スペイン, 7 月, 2019). Keynote 講演
6. S. Chaimongkolkunasin, K. Nomura
   "(Arylimido)vanadium(V)-alkylidene complex catalysts for ring-opening metathesis polymerization of cyclic olefins"
   23rd International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry (ISOM23) (バルセロナ, スペイン, 7 月, 2019).

7. S. Kitphaitun, Q. Yan, K. Nomura
 “Aryloxo-modified half-titanocenes for efficient ethylene copolymerizations: Effect of para-substituent toward high activity with thermal resistance”
23rd International Symposium on Olefin Metathesis and Related Chemistry (ISOM23) (バルセロナ, スペイン, 7 月, 2019).
8. H. Hamaoka, S. Shiroma, K. Nomura, T. Nishinaga
“Oxidation reactions of dithienotiophene cyclic dimer including an antiaromatic ring”
18th International Symposium on Novel Aromatic Compounds(ISNA-18) (札幌, 北海道, 7 月, 2019).
9. K. Nomura
“Olefin metathesis: Efficient methods for precise synthesis of new advanced conjugated polymers by exclusive end-modification”
7th international symposium of Institute for Catalysis in Hokkaido University (札幌, 北海道, 7 月, 2019). Keynote 講演
10. K. Nomura
“(Imido)vanadium and niobium complexes as efficient catalysts for ethylene dimerization/polymerization and ring-opening metathesis polymerization of cyclic olefins”
8th Asia-Pacific Congress on Catalysis (APCAT8) (バンコク, タイ, 8 月, 2019).
招待講演
11. S. Kitphaitun, Q. Yan, K. Nomura
“Synthesis of aryloxo-modified half-titanocenes as highly active ethylene (co)polymerizatioin catalysts”
8th Asia-Pacific Congress on Catalysis (APCAT8) (バンコク, タイ, 8 月, 2019).
12. D. Le, C. Samart, K. Nomura, S. Kongparakul
“Preparation of thermoset polymer films via ring-opening metathesis polymerization (ROMP) of norbornene-functionalized plant oils”
8th Asia-Pacific Congress on Catalysis (APCAT8) (バンコク, タイ, 8 月, 2019).
13. 野村琴広
“溶液 X 線吸収法（XAS）によるエチレンやスチレン重合触媒の活性種解析”
第 14 回ポリオレフィン研究会（東京, 8 月, 2019). 招待講演
14. 井上健介, 稲垣昭子, 野村琴広
“キレート多座配位スカンジウム錯体の合成と触媒反応への適用に関する研究”
第 66 回有機金属化学討論会（東京, 9 月, 2019).
15. Kitphaitun Suphitchaya, Yan Qing, 野村琴広
“新規フェノキシ配位ハーフチタノセン錯体の合成とエチレン共重合”
第 66 回有機金属化学討論会（東京, 9 月, 2019).
16. 山添誠司, 伊澤樹, Yi Jun, 青木大峻, 伊奈稔哲, 満留敬人, 中谷直輝, 野村琴広
“XAFS によるスチレンの立体特異性重合に活性なフェノキシ配位ハーフチタノセン錯体触媒の電子状態・幾何構造解析”
第 66 回有機金属化学討論会（東京, 9 月, 2019).

17. 下屋庄司, 祖父江友希, 野村琴広, 稲垣昭子
"光応答性二核および三核イリジウムヒドリド錯体を用いた触媒的二酸化炭素還元反応"
第66回有機金属化学討論会（東京, 9月, 2019).
18. 野村琴広, 伊藤信之介, 國澤実希子
"非環式ジエンメタセシス重合とWittig型カップリング反応を組み合わせた末端修飾型の新しい光機能材料の創製"
第124回触媒討論会（長崎大学, 9月, 2019).
19. 川本雄太, 野村琴広
"イミド配位バナジウムアルキル、アルキリデン錯体の合成と反応性"
第124回触媒討論会（長崎大学, 9月, 2019).
20. 野村琴広
"オレフィンの精密重合・二量化に有効な高性能チタンおよびバナジウム分子触媒の設計"
第124回触媒討論会（長崎大学, 9月, 2019). 招待講演
21. 松尾一輝, 野村琴広, 西長 亨
"3,4-ジオキシチオフェン混合オリゴマーで保護された金微粒子の合成と性質"
第30回基礎有機化学討論会 (大阪, 9月, 2019).
22. 藤原知也, 野村琴広, 稲垣昭子
"光増感性Cu-Pd 二核錯体の合成とスチレン類重合特性の調査"
第69回錯体化学討論会（名古屋大学, 9月, 2019).
23. 祖父江友希, 野村琴広, 稲垣昭子
"BINAP配位子を含む二核イリジウムヒドリド錯体の合成と光触媒活性の調査"
第69回錯体化学討論会（名古屋大学, 9月, 2019).
24. 伊澤樹, 野村琴広
"イミド配位ニオブ-アルキリデン錯体による2置換アセチレンのメタセシス重合"
山形大会（第49回石油・石油化学討論会）（山形, 11月, 2019).
25. 青木大峻, 野村琴広
"ハーフチタノセン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"
山形大会（第49回石油・石油化学討論会）（山形, 11月, 2019).
26. 原川仁志, 野村琴広
"ハーフチタノセン錯体触媒によるエチレンと各種環状オレフィンとの共重合"
山形大会（第49回石油・石油化学討論会）（山形, 11月, 2019).
27. K. Nomura, M. Tamm
"Effect of anionic donor ligands and Al cocatalyst in ethylene (co)polymerization using (arylimido)vanadium complex catalysts"
Asian Polyolefin Workshop 2019 (APO2019) (広島, 12月 2019). 招待講演
28. S. Kitphaitun, Q. Yan, K. Nomura
"Aryloxo-modified half-titanocenes as highly active ethylene copolymerization catalysts: Effect of phenoxy para substituents"

Asian Polyolefin Workshop 2019 (APO2019) (広島, 12 月, 2019).

29. M. Okabe, H. Harawaka, K. Nomura
"Synthesis of new cyclic olefin copolymers (COCs) by ethylene copolymerizations with cyclic olefins using half-titanocene catalysts"
Asian Polyolefin Workshop 2019 (APO2019) (広島, 12 月, 2019).
30. K. Nomura
"Olefin metathesis polymerization by vanadium-, niobium-alkylidene catalysts"
The 16th pacific polymer conference （シンガポール, 12 月, 2019). 招待講演
31. K. Nomura, T. Mitsudome, S. Yamazoe
"Analysis of active species in molecular vanadium catalysis by solution XAS analysis"
Materials Research Meeting 2019 (横浜, 12 月, 2019).
32. K. Nomura
"Olefin metathesis: Efficient method for synthesis of functional polymers and fine chemicals"
Universiti Kebangsaan Malaysia (UKM) (クアラルンプール, マレーシア, 12 月, 2019). 招待講演
33. K. Nomura
"Polymerization/dimerization using (Imido)vanadium and niobium complex catalysts"
Mahidol University (バンコク, タイ, 12 月, 2019). 招待講演
34. 綿貫 栞奈, 橋本 祥, 浅野 素子, 山田 拓海, Abdellatif M. M., 野村 琴広
"キラル側鎖を有する共役ポリマーの凝集化によるキラリティ発現と時間分解発光スペクトル"
日本化学会関東支部群馬地区研究交流発表会（群馬大学理工学部, 12 月, 2019).
35. K. Nomura
"Olefin metathesis: efficient methods for synthesis of advanced polymers, and conversion of bio renewables"
アテネオ デ マニラ大学 招待講演 (マニラ, フィリピン, 1 月, 2020). 招待講演
36. K. Nomura
"Olefin metathesis: efficient methods for synthesis of advanced polymers, and conversion of bio renewables"
フィリピン大学 Diliman 校 (マニラ, フィリピン, 1 月, 2020). 招待講演
37. K. Nomura
"Metal catalyzed olefin polymerization: Efficient catalysts for synthesis of petroleum based polymers, and bio based polymers"
Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) (バンコク, タイ, 2 月, 2020). 招待講演
38. S. Kitphaitun, K. Nomura
"Efficient ethylene copolymerization using half-titanocene catalysts: Precise synthesis of amphiphilic graft copolymers by post-polymerization modification"
Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) (バンコク, タイ, 2 月, 2020).

39. P. Chaijaroen, M. M. Abdellatif, K. Nomura
"Synthesis of bio-based long-chain polyesters by tandem acyclic diene metathesis (ADMET) polymerization and hydrogenation using ruthenium catalysts"
Pure and Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020) (バンコク, タイ, 2 月, 2020). 招待講演

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や損傷した DNA を修復する機構の基礎科学的解明を行っている。

(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。

染色体恒常性維持機構の解明

DNA 損傷ストレスに細胞が応答し恒常性を維持する DNA 損傷応答機構と、外的環境変動（ストレスなど）で変化するクロマチンの制御維持機構の２点の研究を行った。

①　複製ポリメラーゼ ε の校正エキソヌクレアーゼ活性による安全な複製停止機構の解明

複製ポリメラーゼ ε は、ゲノム DNA の複製の際にヌクレオチドを鋳型鎖に対し正確に挿入する。この酵素は誤挿入したヌクレオチドを除去して校正する校正エキソヌクレアーゼ

活性をもっており、ゲノム DNA の正確な複製に不可欠な働きをしている。近年の癌ゲノム研究で、この活性がゲノム維持に必須の役割を果たすことが示唆されているが、どのような機構でゲノム維持に貢献しているのか不明であった。当研究室ではこの校正活性の働きの解明のために、ヒトリンパ球 TK6 細胞から複製ポリメラーゼεの校正活性を変異で潰した *POLE*$^{exo-}$細胞細胞を作製した。複製中に複製フォークが DNA 損傷に遭遇すると損傷部分で鋳型鎖が再アニールして巻き戻った構造を形成して、安全に複製フォークを停止させることが知られているが、*POLE*$^{exo-}$細胞細胞ではこの停止反応が不良となっていることを発見した（未発表）。さらに、ヒト複製ポリメラーゼεのホロ酵素を精製し、複製停止部分でこの酵素の校正エキソヌクレアーゼ活性に依存した末端の削り込み反応を行うことを示し、この酵素活性による鋳型鎖巻き戻しに関わる相同組換え反応の初期機構に関わることを示唆した（未発表）。

② 非コード RNA 転写に共役したクロマチン再編成機構の解明

タンパク質をコードしない転写物（非コード RNA）は、ゲノムの広範な領域において転写されている。非コード RNA の中で遺伝子プロモーター領域において発現する転写物は、プロモーター非コード RNA と呼ばれており、遺伝子制御において機能することが知られている。この様な RNA 転写は酵母からヒトにいたる広範な真核細胞に見られ、その重要性が注目されている。当研究室では、分裂酵母 *fbp1* 遺伝子の上流で発現するプロモーター非コード RNA を発見し、メタボリックストレス応答性非コード RNA(mlonRNA)と名付け、そのクロマチン制御における役割について研究を行っている(Hirota *et al.* 2008)。mlonRNA 転写開始に必須の新規シスエレメント mlonBOX を同定した。この配列と転写因子結合領域の距離を変化させることで、転写因子結合領域のヒストンアセチル化、クロマチン再編成、およびその後の転写因子結合は mlonBOX から 290bp の範囲において効果的に誘導されることを見出し、mlonRNA 転写開始複合体が開始領域の下流において限定的なクロマチン再編成を誘導することを発見した(Senmatsu *et al.*2019)。また、この新規エレメントによる mloRNA 転写が他の遺伝子の活性化や、減数分裂期組換え誘導にも貢献することを発見し、この機構が普遍的なゲノム調節に寄与することを明らかにした（未発表）。

上記研究では、スウェーデン、イタリア、スイス、米国などと国際共同研究し、2019 年度にはのべ 4 人が短期海外留学した。

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や擬ウリジン解析の新しい方法を考案している。開発した方法を利用して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に適用して転写後修飾を含む全化学構造と修飾率を決定した。現在も新たなエピトランスクリプトーム解析法の開発に取り組んでいる。

（３）I. 原著論文

1. Tsuda M, Ogawa S, Ooka M, Kobayashi K, Hirota K, Wakasugi M, Matsunaga T, Sakuma T, Yamamoto T, Chikuma S, Sasanuma H, Debatisse M, Doherty AJ, Fuchs RP, Takeda S. PDIP38/PolDIP2 controls the DNA damage tolerance pathways by increasing the relative usage of translesion DNA synthesis over template switching. *PLoS One* 6;14(3) (2019)

2. Senmatsu S, Asada R, Abe T, Hoffman CS, Ohta K, *Hirota K lncRNA transcriptional initiation induces chromatin remodeling within a limited range in the fission yeast *fbp1* promoter. *Sci Rep* 9: 299 (2019)

3. "A method for direct mass spectrometry-based identification of mono-methylated RNA nucleoside positional isomers and its application to the analysis of Leishmania ribosomal RNA." Nakayama H, Yamauchi Y, Nobe Y, Sato K, Takahashi N, Shalev-Benami M, Isobe T, Taoka M. *Anal Chem.* 2019;91(24):15634-15643.

4. "An Ionic Liquid-Based Sample Preparation Method for Next-Stage Aggregate Proteomic Analysis" Taoka M, Horita K, Takekiyo T, Uekita T, Yoshimura Y, Ichimura T. *Anal Chem.* 2019;91(21):13494-13500.

5. "Sequential two-step chromatographic purification of infectious poliovirus using ceramic fluoroapatite and ceramic hydroxyapatite columns" Kurosawa Y, Sato S, Okuyama T, Taoka M. *PLOS ONE.* 2019;14(9):e0222199.

6. "Low-fluence blue light-induced phosphorylation of Zmphot1 mediates the first positive phototropism" Suzuki H, Koshiba T, Fujita C, Yamauchi Y, Kimura T, Isobe T, Sakai T, Taoka M, Okamoto T. *J Exp Bot.* 2019;70(20):5929-5941..

7. "TDP-43 regulates site-specific 2'-O-methylation of U1 and U2 snRNAs via controlling the Cajal body localization of a subset of C/D scaRNAs." Izumikawa K, Nobe Y, Ishikawa H, Yamauchi Y, Taoka M, Sato K, Nakayama H, Simpson RJ, Isobe T, Takahashi N. *Nucleic Acids Res.* 2019;47(5):2487-2505.

（4）II. 著書、総説等

なし

（5）III. 学会発表、講演等

1. Masataka Tsuda, Takuya Abe, Toshiki Tsurimoto, Takehiko Shibata, Shunichi Takeda, and Kouji Hirota、 Role of proofreading exonuclease activity of replicative polymerase ε in replication fork slowing at DNA damage 分子生物学会 12 月 福岡

2. Kouji Hirota、複製ポリメラーゼεの校正活性はカンプトテシンによる DNA 損傷における安全なフォーク停止に寄与する 核酸医薬学会 10 月 場所

3. 阿部拓也，津田雅貴，釣本俊樹，柴田武彦，武田俊一，廣田耕志、複製ポリメラーゼεの校正活性はカンプトテシンによる DNA 損傷における安全な複製停止に寄与する 染色体ワークショップ 12 月 新潟

4. 幸田和佳奈、千松賢史、廣田耕志 分裂酵母 fbp1 遺伝子上流領域における転写因子結合機構の解明 酵母遺伝学フォーラム 2019 年 9 月 静岡

5. 幸田和佳奈、千松賢史、廣田耕志 分裂酵母 fbp1 遺伝子上流領域における転写因子結合機構の解明 バイオコンファレンス 2019 年 11 月 東京

6. 幸田和佳奈、千松賢史、廣田耕志 分裂酵母 fbp1 遺伝子上流領域における転写因子結合機構の解明 分子生物学会 2019 年 12 月 福岡

7. 猪又侑里子、阿部拓也、廣田耕志　細胞内におけるY Family TLS Polymerasesの機能解明　バイオコンファレンス2019年11月　東京

8. 猪又侑里子、阿部拓也、廣田耕志　細胞内におけるY Family TLS Polymerasesの機能解明　分子生物学会2019年12月　福岡

9. 此村直人、新井直人、廣田耕志、美川務、柴田武彦「大腸菌におけるDNA 二本鎖切断の非相同末端結合修復」第 36 回 染色体ワークショップ/第 17 回 核ダイナミクス研究会 2019 年 1 月　兵庫

10. 新井直人、廣田耕志、美川務、柴田武彦「RecA に見つかった二重鎖特異的 DNA 結合活性と相同的対合機構」第 36 回 染色体ワークショップ/第 17 回 核ダイナミクス研究会 2019 年 1 月　兵庫

11. 柴田武彦、新井直人、美川務、岩崎わかな、廣田耕志「Deoxyribose の 2' CH2 の相同的組換えでの役割：何故、染色体はDNAなのか 」第37 回 染色体ワークショップ/第18 回 核ダイナミクス研究会　2019年　12月 新潟県

12. 阿部拓也　ネガティブセレクションマーカーを用いた染色体改変技術の構築　第8回DNA損傷応答ワークショップ　2019年4月　群馬

13. 阿部拓也、吉本侑依、廣田耕志　DNA 複製因子 TIPIN と相同組み換え因子 BRCA1 の遺伝学的相互作用の解析　分子生物学会　2019 12月　福岡

14. 吉本侑依、阿部拓也、廣田耕志　Synthetic lethal mechanism between TIPIN and hereditary breast cancer causative gene BRCA1、バイオコンファレンス2019年11月　東京

15. 中山洋、小池仁美、延優子、田岡万悟　ナノフロー液体クロマトグラフィー―タンデム質量分析プラットフォームによる長鎖修飾RNAの解析　日本核酸医薬学会　2019年7月　大阪

16. 手塚 真由、八巻 優佳、延 優子、田岡 万悟　LC-MS による安定同位体標識を用いたtRNAの転写後修飾の定量　分子生物学会　2019 12月　福岡

17. Hiroshi Nakayama; Yoshio Yamauchi; Yuko Nobe; Masami Koike; Nobuhiro Takahashi;

Moran Shalev-Benami; Toshiaki Isobe; Masato Taoka "Mass spectrometry-based identification of mono-methylated RNA nucleoside positional isomers: Application for structural analysis of RNA modifications in the Leishmania ribosome" 67th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, Atlanta, GA, USA 6/2019

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アニオン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を合成・単離し、その磁気的性質を SQUID や ESR により調べたり、発光スペクトルを測定することによって、その電子状態を明らかにすることを目的としている。

（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. N. Takizawa, T. Kodama, H. Shiromaru, T. Wakabayashi, S. Al-Tuairqi, Qi Wang, H. Zhang, J.H. Sanderson
"Efficient polyyne formation by ns and fs laser-induced breakdown in ethylene and acetylene gas flow"
Carbon, **152**, 372-375 (2019).

II. 著書、総説等

III. 学会発表、講演等

01. 和田智也、二階堂峻、吉野治一、山田順一、兒玉健、菊地耕一
「新規有機超伝導体(MTDT-TTP)$_2$BF$_4$における物性」
日本化学会第 99 回春季年会（2019. 3、神戸）

02. 吉田俊、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「ESR study of Sc-dimetallofullerene anions: $(Sc_2C_n)^-$(n=76, 78, 80)」
第 56 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（2019. 3、東京）

03. 西本真也、平山貴晟、西留比呂幸、宮田耕充、柳和宏、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Near infrared emission of dimetallofullerene anions encapsulating Nd or Er」
第 56 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（2019. 3、東京）

04. 山下祐典、小林和博、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Attempt to produce dimetallofullerenes containing Yb with Ta」
第 56 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（2019. 3、東京）

05. 降矢裕輔、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Attempt to produce dimetallofullerenes containing Eu」
第 56 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（2019. 3、東京）

06. 小林和博、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「What controls whether [M2@Cn]- (n=78, 80) is stably formed or not?」
第 56 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（2019. 3、東京）

07. 西川智裕、佐藤徹、春田直毅、兒玉健、阿知波洋次
「Growth Mechanism of (6,5) Carbon Nanotube: Edge Structures and their Regioselectivities」
第 56 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（2019. 3、東京）

08. 二階堂峻、吉野治一、和田智也、兒玉健、菊地耕一、山田順一
「有機伝導体(MTDT-TTP)$_2$BF$_4$の磁気抵抗と温度−圧力相図の再検討」
日本物理学会 2019 秋季年会（2019. 9、岐阜）

09. 西川智裕、佐藤徹、春田直毅、兒玉健、阿知波洋次
「(6,5)カーボンナノチューブの成長機構：エッジ構造と領域選択性」

第 13 回分子科学討論会（2019. 9、福岡）

10. 吉田俊、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「[Sc_2C_n(n=76, 78, 80)]$^-$の単離とキャラクタリゼーション」
第 13 回分子科学討論会（2019. 9、福岡）

11. 髙井良也、東中隆二、松田達磨、青木勇二、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健
「Dy 内包フラーレンアニオンの単離と磁気的性質の研究」
第 13 回分子科学討論会（2019. 9、福岡）

分子集合系物理化学研究室

高分子やゲル、液晶、コロイドなどの柔らかい物質は「ソフトマター」と呼ばれており、特に今世紀になってから世界中で研究が進展しました。また、食品や化粧品、パーソナルケア製品、インクなどは全てソフトマターで作られており、我々の日常生活において欠かすことができない重要な物質です。

ソフトマターの特徴は多数の分子がゆるやかに集まって構成されていることであり、分子の集団としての振る舞いがソフトマターの様々な性質に反映されます。例えば、ソフトマターは小さな刺激で大きな変化や応答を示し、外部からその性質を制御しやすいため、とても応用範囲の広い材料であることが知られています。

さらに、我々人間も含めた生物は、多様なソフトマターの複合体とみなすことができます。最近では、ソフトマターの研究で得られた知見を用いて、生体物質（バイオマター）や生命現象を理解しようとする研究が新しく始まりつつあります。このように、分子集合系物理化学研究室では物質科学と生命科学をつなぐための基礎研究を行っています。

そもそも、単なる物質と生物を分け隔てているものは一体何でしょうか？これについては色々な考え方がありますが、我々は「非平衡」という概念をキーワードとして、生命現象を理解しようとしています。例えば、ある化学反応において化学平衡が成り立っていると、順方向の反応速度と逆方向の反応速度が等しくなり、見かけ上反応が停止してしまいます。一方、化学平衡が破れた非平衡状態では、反応物と生成物の組成比が時間とともに変化します。

生物は外界からエネルギーを取り込んで、それを自分自身の変形や運動のために積極的に使っています。また、新たに誕生した生命は大きな変化を伴いながら成長していきます。このようなダイナミックな現象を理解するためには、ソフトマターの非平衡現象を調べる必要があり、さらにその先に生命現象の本質が潜んでいると考えられます。

Ⅰ. 原著論文

01. T. Hoshino, M.-W. Liu, K.-A. Wu, H.-Y. Chen, T. Tsuruyama, and S. Komura,
“Pattern formation of skin cancers: Effects of cancer proliferation and hydrodynamic interactions”,
Phys. Rev. E 99, 032416 (13pp) (2019).

02. M. Kuroda, K. Yasuda, S. Komura,
“Hydrodynamic interaction between two elastic microswimmers”,
J. Phys. Soc. Jpn. 88, 054804 (6pp) (2019).

03. I. Sou, Y. Hosaka, K. Yasuda, and S. Komura,
“Non-equilibrium probability flux of a thermally driven micromachine”,
Phys. Rev. E 100, 022607 (10pp) (2019).

04. Y. Hosaka, S. Komura, and D. Andelman,

“Shear viscosity of two-state enzyme solutions” ,
Phys. Rev. E 101, 012610 (11pp) (2020).

Ⅱ. 著書、総説等

Ⅲ. 学会発表、講演等

01. S. Komura
“Thermally driven elastic micromachines”
Workshop at Kanazawa University (2019.3, 金沢)

02. S. Komura
“A three-sphere microswimmer in a structured fluid”
Seminar at Lund University (2019.3, Lund)

03. 安田健人, 岡本隆一, 好村滋行
「構造流体中の三つ玉スイマーの遊泳」
日本物理学会 第74回年次大会 (2019.3, 福岡)

04. 安田健人, D. Andelman, 好村滋行
「酵素溶液のずり粘性率」
日本物理学会 第74回年次大会 (2019.3, 福岡)

05. S. Komura
“Thermally driven elastic micromachines”
Soft Matter Out of Equilibrium: from driven to active systems (2019. 5, Beijing)

06. Y. Hosaka, S. Komura
“Shear viscosity of two-state enzyme solutions”
Soft Matter Out of Equilibrium: from driven to active systems (2019. 5, Beijing)

07. K. Yasuda, S. Komura
“Swimmer-microrheology”
Soft Matter Out of Equilibrium: from driven to active systems (2019. 5, Beijing)

08. 好村滋行
「海外で活躍する理系学生のための English Laboratory」
首都大学東京 教育改革推進事業 (学内提案分) 成果発表会 (2019.5, 東京)

09. 好村滋行

「ソフトマター東京」
首都大学東京 第11回施策提案発表会（2019.7, 東京）

10. 好村滋行
「柔らかい物質の話」
いなぎICカレッジ 企画講座（2019.8, 東京）

11. 山下晃史, M. Turner, 好村滋行
"Simulation of self-propelled particles in the homeostatic state"
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

12. 曹勇, 好村滋行
「熱的に駆動するマイクロマシンの非平衡確率流」
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

13. 安田健人, 好村滋行
「マイクロマシンの内部状態の非平衡ダイナミクス」
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

14. 保阪悠人, 好村滋行
"Shear viscosity of catalytic enzyme solutions"
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

15. 黒田瑞季, 好村滋行
"Hydrodynamic interaction between two elastic microswimmers"
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

16. 古屋智博, 作道直幸, 好村滋行
「細胞シートにおける亀裂進展のダイナミクス」
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

17. 江良勝智, 好村滋行
「自律的に速度を選択する弾性スイマー」
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

18. 劉芳美, 好村滋行
「不均一な輸送係数を持つ系のミクロ相分離」
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

19. 伊藤碧, 好村滋行
「自己推進粒子を用いた捕食者・被食者系のシミュレーション」
第18回関東ソフトマター研究会（2019.8, 東京）

20. 安田健人, 好村滋行
「生体ナノマシンの状態サイクルモデル」
第9回ソフトマター研究会（2019.11, 名古屋）

21. 保阪悠人, 好村滋行
“Shear viscosity of two-state enzyme solutions”
第9回ソフトマター研究会（2019.11, 名古屋）

22. S. Komura
“Non-equilibrium probability flux of a thermally driven micromachine”
Active Matter Workshop 2020（2020.1, Tokyo）

23. K. Era, S. Komura
“Autonomous three-sphere microswimmers driven by coupled internal oscillations”
Active Matter Workshop 2020（2020.1, Tokyo）

24. K. Yasuda, S. Komura
“State cycle model of biological nanomachines”
Active Matter Workshop 2020（2020.1, Tokyo）

25. S. Komura
“A three-sphere microswimmer in a structured fluid”
Fluid-Structure Interactions: From Engineering to Biomimetic Systems
(2020.1, Okinawa)

26. 好村滋行
「生体ナノマシンの状態サイクルモデル」
山田研究会 「動的過程における右と左」 -非平衡、非対称、非線形が紡ぐ学際研究-
(2020.2, 東京)

27. 好村滋行, 曹勇, 保阪悠人, 安田健人
「熱的に駆動するマイクロマシンの非平衡確率流」
日本物理学会 第75回年次大会（2020.3, 名古屋）

28. 保阪悠人, 好村滋行
「オッド粘性率を持つ膜ドメインの流体力学」
日本物理学会 第75回年次大会（2020.3, 名古屋）

29. 安田健人, 好村滋行
「生体ナノマシンの状態サイクルモデル」

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. イオン蓄積による輻射冷却の観測と断面積測定
   超高真空のイオン蓄積リングリング（TMU E-ring）や卓上型イオン蓄積リング（μE-ring）を用いて，炭素クラスターをはじめとする種々のイオンの輻射冷却や原子多価イオンの反応断面積測定を行っている。

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。

Ⅰ. 原著論文

01. FQ. Chen, N. Kono, R. Suzuki, T. Furukawa, H. Tanuma, P. Ferrari, T. Azuma, J. Matsumoto, H. Shiromaru, V. Zhaunerchyk, K. Hansen
"Radiative cooling of cationic carbon clusters, Cn+, n = 8, 10, 13 – 16"
Phys. Chem. Chem. Phys. 21, 1587-1596 (2019).

02. J. Matsumoto, R. Saiba, K. Gouda, E. Makino, K. Fueta, N. Kondo, H. Shiromaru
"Construction of a table-top ion storage ring and its application to cross section measurements"
Nucl. Instr. and Meth. B 454, 23–27 (2019).

03. N. Takizawa, T. Kodama, H. Shiromaru, T. Wakabayashi, S. Al-Tuairqi, Qi Wang, H. Zhang, J. H. Sanderson
"Efficient polyyne formation by ns and fs laser-induced breakdown in ethylene and acetylene gas flow"
Carbon 152, 372-375 (2019).

Ⅱ. 総説等

Ⅲ. 学会発表

01. 栗山みさき, 古川武, 松本淳, 飯田進平, 田沼肇, 東俊行, 城丸春夫
TMU E-ring における多環芳香族炭化水素負イオンの冷却過程
日本物理学会第 74 回年次大会（2019 年 3 月福岡市）

02. J. Matsumoto
Symmetric charge transfer cross section measurements of Ar^{+} and Ar^{2+} by using a table-top ion storage ring
8th International Workshop on Electrostatic Storage Devices (Tianjin, August 26-30, 2019)

03. 松本淳
卓上型静電イオン蓄積リング（μE-ring）による Ar^{+}，Ar^{2+}イオンの対称電荷移行断面積の測定
原子衝突学会第 44 回年会（2019 年 9 月 調布市）

04. 牧野恵里香，斉場隆二朗，相田莉那，松本淳，城丸春夫
卓上型イオン蓄積リング(μE-ring)による負イオン蓄積実験
原子衝突学会第 44 回年会（2019 年 9 月 調布市）

05. 松本陸，鈴木遥，田口裕貴，阿知波洋次，兒玉健，若林知成，城丸春夫
温度依存性によるフラーレン生成過程の分類
原子衝突学会第 44 回年会（2019 年 9 月 調布市）

06. 滝沢信行, S. Al-Tuairqi, Q. Wang, Joseph. H. Sanderson, 若林知成, 兒玉健, 城丸春夫
アセチレン、エチレンガス流中のレーザー誘起ブレークダウンによるポリイン分子生成
原子衝突学会第 44 回年会（2019 年 9 月 調布市）

07. 松本淳, 齋場隆二朗, 牧野恵里香, 城丸春夫

卓上静電型イオン蓄積リングを用いたアルゴンの対称電荷移行断面積測定
日本物理学会 2019 年秋季大会（2019 年 9 月、岐阜市）

08. 飯田進平, 久間晋, 松本淳, 古川武, 田沼肇, 城丸春夫, 東俊行, V Zhaunerchyk, K Hansen
Si_2^-の振動・回転励起状態を経由した遅延電子脱離
日本物理学会 2019 年秋季大会（2019 年 9 月、岐阜市）

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) ＜パラ置換ベンゼン環を有するチアクラウンエーテルによるフラーレンの包接に関する研究＞　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とフラーレンとの錯形成を検討した。錯形成を滴定実験により調べたところ、C_{60} および C_{70} と弱いながら相互作用することを見出した。また、金属内包フラーレンとの錯形成を検討したところ、金属を内包することによって金属を内包していないフラーレンよりもこの大環状チアクラウンエーテルと強く相互作用することがわかった。

(2) ＜ベンゼン環上にスルフィド部位とスルホニウム部位を有する化合物の合成＞　ベンゼン環上にスルフィド部位を有する化合物に対して、用いるメチルトリフラートの調整しメチル化することにより、スルフィド部位とスルホニウム部位を有する化合物を合成した。それらのUVスペクトルを測定したところ、スルホニウム部位の数が多いほど吸収極大が長波長側にシフトすることがわかった。また、得られた化合物はX線結晶構造解析によりその結晶構造を明らかにした。

(3) ＜9員環チアクラウンエーテル12S3のポリメチル化反応＞　メチル化剤としてメチルトリフラートを用いて12S3のポリメチ化反応を行い、モノ、ジ、トリメチル化体を良好な収率で合成した。モノ、ジメチル化体はX線結晶構造解析により結晶構造を明らかにした。ＣＶ法を用いて還元挙動を調べたところ、スルホニウム部位の数の増加に伴い還元されやすく、また還元波の数が増加することがわかった。

I.　原著論文

01.　Ko, F.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.; Sugiura, K.
"Molecular Structure of 9,10-Bis[bis(4-*tert*-butylphenyl)methylene)-9,10-dihydroanthracene: A butterfly-shaped Thiele's hydrocarbon derivative"
Tetrahedron 2019, *75*, 357-362.

02.　Rahman, M. M.; Hassan, K.; Hirabayashi, K.; Sato, S.; Shimizu, T.; Sugiura, K.

"Syntheses and Characterization of 1- and 2-Hydroxypyren-Coordinated Sn(IV) Porphyrins: *Transmission-like Motion* of Alcoholato-Coordinated Sn(IV) Porphyrin"
Polyhedron 2019, *171*, 128-136.

03. Ikeda, A.; Rana, S.; Sato, S.; Hirabayashi, K.; Hada, M.; Shimizu, T.; Sugiura, K.
"Molecular Structure and Basic Spectroscopic Properties of 3-Selenocyanatoindole: An Important Reference Compound in Organoselenium Research"
Tetrahedron 2019, *75*, 130551.

04. Honda, R.; Tanaka, A.; Hirabayashi, K.; Akiyama, K.; Shimizu, T.; Sugiura, K.
"Crystal Structure of Dinaphtho[2,1,1',2']furan Picrate"
X-ray Structure Analysis Online 2019, *35*, 69-71.

II. 著書、総説等
なし

III. 学会発表、講演等
01. 三井達雄, 佐藤大, 平林一徳, 清水敏夫
「ビス(トリアルキルスルホニウム)塩の合成と物性」
日本化学会第99春季年会 (2019, 3, 神戸)

02. 渡辺理紗, 平林一徳, 清水敏夫, 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
「2-,2'-位に発色団を導入した光学活性なビナフチルの合成とキロプティカル特性」
日本化学会第99春季年会 (2019, 3, 神戸)

03. 池田敦貴, シャヘッド・ラナ, 平林一徳, 佐藤聡一, 清水敏夫, 杉浦健一
「白金ポルフィリンによって極性転換されたセレノシアナート基の反応挙動」
第77回有機合成化学協会関東支部シンポジウム(横浜シンポジウム) (2019, 5, 東京)

04. 池田敦貴, シャヘッド・ラナ, 平林一徳, 佐藤総一, 清水敏夫, 杉浦健一
「白金ポルフィリンを用いたセレノシアン酸の極性転換と芳香族求電子反応性」
第115回有機合成シンポジウム (2019, 6, 仙台)

05. 髙橋蓮，平林一徳，清水敏夫
「ベンゼン環上に複数のスルホニウム部位を有する化合物の合成」
第9回CSJ化学フェスタ（2019，10，東京）

06. 本多理沙，平林一徳，清水敏夫，西川浩之，杉浦健一
「ジナフトフラン多量体の合成及びその性質」
第78回有機合成化学協会関東支部シンポジウム（2019，11，新潟）

07. 髙橋蓮，平林一徳，清水敏夫
「ベンゼン環上に複数のスルホニウム部位を有する化合物の合成と性質」
第46回有機典型元素化学討論会（2019，12，松山）

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気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探査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. A. Velloth, Y. Imamura, and M. Hada
"Functionalization of Endohedral Metallofullerenes toward Improving Barrier Height for the Relaxation of Magnetization for $Dy_2@C_{80}$-X (X = CF_3, $C_3N_3Ph_2$)"
Inorganic Chemistry, **58**, 1208-1215 (2019). **DOI:** 10.1021/acs.inorgchem.8b02652

02. A. Sunaga, V. S. Prasannaa, M. Abe, M. Hada, and B. P. Das
"Ultracold mercury-alkali-metal molecules for electron-electric-dipole-moment searches"
Phys. Rev. A **99**(4), 040501(6pages) (2019). **DOI**: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.99.040501

03. Shohei Kanno, Yutaka Imamura, and Masahiko Hada
"Alternative materials for perovskite solar cells from materials informatics"
Phys. Rev. Materials **3**, 075403(1-8) (2019). **DOI**: 10.1103/PhysRevMaterials.3.075403

04. Zhifeng Ma, Kasumi Ukaji, Naoki Nakatani, Hiroshi Fujii, and Masahiko Hada
"Substitution Effects on Olefin Epoxidation Catalyzed by Oxoiron(IV) Porphyrin p-Cation Radical Complexes: A DFT study"
J. Comp. Chem., **40**(19), 1780-1788 (2019). **DOI:** http://dx.doi.org/10.1002/jcc.25831

05. I. Purnama, Salmahaminati, M. Abe, M. Hada, Y. Kubo, and J. Y. Mulyana,
"Factors influencing the photoelectrochemical device performance sensitized by ruthenium polypyridyl dyes"
Dalton Trans., **48**, 688-695 (2019). **DOI:** 10.1039/C8DT03502D

06. V. S. Prasannaa, A. Sunaga, M. Abe, M. Hada, N. Shitara, A. Sakurai, and B. P. Das
"The Role of Relativistic Many-Body Theory in Electron Electric Dipole Moment Searches Using Cold Molecules"
Atoms, **7**, 58-58(20) (2019). **DOI:** 10.3390/atoms70200
07. A. Sunaga, M. Abe, M. Hada and B. P. Das
"Merits of heavy-heavy diatomic molecules for electron electric dipole-moment searches"
Phys. Rev. A, **99**(6), 062506(1-7) (2019). **DOI:** 10.1103/PhysRevA.99.062506
08. Masaichi Saito, Marisa Nakada, Takuya Kuwabara, Ryota Owada, Shunsuke, Furukawa, Radhika Narayanan, Minori Abe, Masahiko Hada, Ken Tanaka, and Yoshihiko Yamamoto
"Inverted Sandwich Rh Complex Bearing a Plumbole Ligand and its Catalytic Activity"
Organometallics, **38**, 3099-3103 (2019). **DOI:** 10.1021/acs.organomet.9b00339
09. Yutaka Imamura, Marina Suganuma, and Masahiko Hada
"Computational Study on Search for Non-Fullerene Acceptors, Examination on Interface Geometry and Investigation on Electron Transfer"
J. Phys. Chem. C, **123**(29), 17678-17685 (2019). **DOI:** 10.1021/acs.jpcc.9b02933
10. Yuri Ishimizu, Zhifeng Ma, Masahiko Hada, and Hiroshi Fujii
"Experimental and theoretical studies of the porphyrin ligand effect on the electronic structure and reactivity of oxoiron(iv) porphyrin π-cation-radical complexes"
J. Biological and Inorganic Chemistry, **24**, 483-494 (2019). **DOI:**10.1007/s00775-019-01664-3
11. Atsuki Ikeda, Shahed Ranaa, Soichi Sato, Kazunori Hirabayashi, Masahiko Hada, Toshio Shimizu, and Ken-ichi Sugiura
"Molecular structure and basic spectroscopic properties of 3-selenocyanatoindole: An important reference compound in organoselenium research"
Tetrahedron, **75**, 130551(1-7), (2019). **DOI:** 10.1016/j.tet.2019.130551
12. Radhika Narayanan, Marisa Nakada, Minori Abe, Masaichi Saito, and Masahiko Hada
"^{13}C- and ^{207}Pb-NMR Chemical Shifts of Dirhodio- and Dilithioplumbole Complexes: A Quantum Chemical Assessment"
Inorganic Chemistry, **58**(21), 14708-14719 (2019). **DOI:** 10.1021/acs.inorgchem.9b02367
13. J. Yi, N. Nakatani, K. Nomura, and M. Hada
"Time-dependent DFT study of K-edge spectra for vanadium and titanium complexes: Effects of chloride ligands on pre-edge feature"
Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 674-683 (2020). **DOI:** 10.1039/C9CP05891E
14. Z. Ma, H. Fujii, N. Nakatani, and M. Hada
"Effect of External Electric Fields on the Oxidation Reaction of Olefins by Fe(IV)OCl-Porphyrin Complexes"
Bulletin of Chemical Society of Japan, **93**(2), 187-192 (2020). **DOI:**10.1246/bcsj.20190293
15. Ayaki Sunaga, Minori Abe, Srinivasa Prasannaa, Takatoshi Aoki, and Masahiko Hada
"Relativistic Coupled-Cluster Study of Diatomic Metal--Alkali-metal Molecules for Electron Electric Dipole Moment Searches"
Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, **53**(1) 015102(20) (2019).

DOI: 10.1088/1361-6455/ab5255.

16. R. Agata, H. Takaya, H. Matsuda, N. Nakatani, K. Takeuchi, T. Iwamoto, T. Hatakeyama, and M. Nakamura
"Iron-Catalyzed Cross Coupling of Aryl Chlorides with Alkyl Grignard Reagents: Synthetic Scope and Fe-II/Fe-IV Mechanism Supported by X-ray Absorption Spectroscopy and Density Functional Theory Calculations"
Bull. Chem. Soc. Jpn., **92**, 381-390 (2019). **DOI:** 10.1246/bcsj.20180333
17. R. Miyazaki, N. Nakatani, S. V. Levchenko, T. Yokoya, K. Nakajima, K. Hara, A. Fukuoka, and J. Hasegawa
"DFT Mechanistic Study on the Complete Oxidation of Ethylene by the Silica-Supported Pt Catalyst: C=C Activation via the Ethylene Dioxide Intermediate"
J. Phys. Chem. C, **123**, 12706-12715 (2019). DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b00158
18. V. S. Prasannaa, N. Shitara, A. Sakurai, M. Abe, B. P. Das "Enhanced sensitivity of the electron electric dipole moment from YbOH: The role of theory"
Phys. Rev. A, **99**, 062502, 2019. DOI: 10.1103/PhysRevA.99.062502
19. N. M. Fazil, V. S. Prasannaa, K. V. P. Latha, M. Abe, and B. P. Das, "RaH as a potential candidate for electron electric dipole moment searches",
Phys. Rev. A, **99**, 052502, 2019.DOI: 10.1103/PhysRevA.99.052502

II　著書、総説等

III　学会発表、講演等

【国内】

01. 宮本優弥、波田雅彦
「表面増強ラマン散乱の化学的増強効果における汎関数依存性：自然摂動軌道による解析」
第22回理論化学討論会、2019年5月27-29日、北海道大学　学術交流会館
02. 宮本優弥、波田雅彦
「局在化自然摂動軌道を用いたNMR化学シフトの解析」
日本コンピュータ化学会2019年春季年会、2019年6月6-7日、東京工業大学　大岡山キャンパス
03. 阿部　穣里、佐藤　有汰留、波田　雅彦
「化学反応経路中のウラン同位体効果」
量子化学探索研究所シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2019」
2019年9月16日、名古屋大学東山キャンパス野依記念学術交流館
04. 吉田　玲、阿部　穣里、波田　雅彦
「^{7}Beにおける原子核上の電子密度と軌道電子捕獲壊変の相関に関する理論的研究」

第13回分子科学討論会名古屋、2019年9月17日-20日、名古屋大学東山キャンパス

05. 菅沼　麻莉奈、中谷　直輝、波田　雅彦

「星間塵表面におけるH^2Sの反応性脱離に関する第一原理シュミレーション」

第13回分子科学討論会名古屋、2019年9月17日-20日、名古屋大学東山キャンパス

06. 道明　武信、中谷　直輝、波田　雅彦

「星間塵表面におけるメタノール生成経路に関する理論的研究」

第13回分子科学討論会名古屋、2019年9月17日-20日、名古屋大学東山キャンパス

07. 冨山　尚大、藤田　武瑠、阿部　穣里、波田　雅彦

「核の電気双極子モーメントに関する電子状態項の理論式の再考」

第13回分子科学討論会名古屋、2019年9月17日-20日、名古屋大学東山キャンパス

08. 佐藤　有汰留、阿部　穣里、波田　雅彦

「生物性・非生物性U(VI)－U(IV)還元におけるウラン同位体分別の機構解明」

日本地球化学会第66回年会、2019年9月17日-19日、東京大学本郷キャンパス

09. 菅野　翔平、今村　穣、波田　雅彦

「マテリアルズインフォマティクスに基づく材料探索スキームの提案：鉛フリーペロブスカイト太陽電池材料の探索に向けて

第80回応用物理学会秋季学術講演会、2019年9月18日-21日、北海道大学札幌キャンパス

10. Naoki Nakatani, Jun Yi, Masahiko Hada , Zhao Liming, Jun-ya Hasegawa, Yusuke Sunada, Hideo Nagashima

「Computational analyses on hydrosilylation reactions catalyzed by 4d and 5d Metal complexes」

錯体化学会第69回討論会、2019年9月21日-23日、名古屋大学東山キャンパス

11. 佐藤　有汰留、阿部　穣里、波田　雅彦

「相対論的量子化学計算を用いた生物性ウラン還元に伴う同位体分別の機構解明」

第9回CSJ化学フェスタ、2019年10月15日-17日、タワーホール船堀

12. 道明　武信

「星間塵表面におけるメタノール生成経路に関する理論的研究」

第20回大つくば物理化学セミナー、2019年12月14日-15日、東京理科大学セミナーハウス

【国際学会】

01. Ayaki.Sunaga, Srinivasa Prasannaa, Minori Abe, Masahiko Hada, and Bhanu Pratap Das

"Enhancement factors of parity-and time-reversal-violating effects for monofluorides"

International Summit on OPTICS, PHOTONICS AND LASER TECHNOLOGIES, Jun.3-5,2019, Crown Plaza Hotel San Francisco Airport, CA, U.S.

02. Ayaki Sunaga and Trond Saue

"Using effective QED potentials in molecular calculations"

10th Congress of the International Society of Theoretical Chemical Physics, Jul.11-17,2019, Clarion Hotel The Edge, Tromso, Norway.

03. Jun Yi and Masahiko Hada

"51V-NMR Chemical Shifts and Analyses of Vanadium Complex Catalysts: A Cooperation of QC calculation and MLR Analysis"

5th Edition on Global Conference on Catalysis, Chemical Engineering&Technology.

(CAT 2019), Sep16-18,2019, Park Inn by Radison Hotel & Conference Center, London, UK.

04. Ataru Sato, Minori Abe and Masahiko Hada

"Theoretical study of uranium isotope fractionation by bacteria"

Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019), Sep.30-Oct.3, 2019, The University of Sydney Abercrombie Business School, New South Wales, Australia

05. Zhifeng Ma, Hiroshi Fujii, and Masahiko Hada

"Effect of Factors on Ethylene Epoxidation by Oxirion (IV) Porphyrin π-Cation Radical Complex in High Spin States : A DFT Study"

Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019), Sep.30-Oct.3, 2019, The University of Sydney Abercrombie Business School, New South Wales, Australia

06. Ataru Sato, Minori Abe, and Masahiko Hada

"Mechanistic Elucidation of Uranium Isotope Fractionation in Biotic Reduction using Ab-initio Calculations"

American Geophysical Union Fall meeting 2019, Dec.9-13,2019, Moscone Center, San Francisco, U.S.

07. Naohiro Tomiyama

"Reconsideration of the electronic term of the Schiff moment in diamagnetic molecules"

The 12th International Workshop on Fundamental Physics Using Atoms (FPUA2020), Jan.9-10.2020, Okochi Hall, RIKEN Wako campus, Wako, Saitama, Japan.

08. Shohei Kanno, Yutaka Imamura, and Masahiko Hada

"A suggestion of Novel Materials for Perovskite Solar Cells from Materials Informatics"

Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020), Feb.13-14,2020, IMPACT Forum, Bangkok, Thailand.

09. Ataru Sato, Minori Abe, and Masahiko Hada

"Relativistic Quantum-Chemical Calculation on Uranium Isotope Fractionation in Biotic Reduction"

Pure And Applied Chemistry International Conference 2020 (PACCON 2020), Feb.13-14,2020, IMPACT Forum, Bangkok, Thailand.

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. T. Nishida, Y. Fujita, S. Shiba, S. Masuda, N. Yamaguchi, T. Izumi, S. Kubuki, N. Oka, ^{119}Sn and ^{57}Fe Mössbauer study of highly conductive vanadate glasses, *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, 30 (9), 8847-8854 (2019).

2. H. Nakajima. A. Okazawa, S. Kubuki, Q. Shen, K. Itoh, Determination of iron species, including biomineralized jarosite, in the iron-hyperaccumulator moss Scopelophila ligulata by Mössbauer, X-ray diffraction, and elemental analyses, *BioMetals*, 32(1), 171-184(2019).

3. Y. Fujita, S. Masuda, H. Miyamoto, S. Kubuki, T. Nishida, N. Oka, Effect of Substitutional Doping of Tin in Highly Conductive Barium Iron Vanadate Glass, *Physica Status Solidi (A) Application and Material Science*, 216(5-6), 1800157(2019).

4. A. S. A. Ali, K. Nomura, Z. Homonnay, E. Kuzmann, A. Scrimshire, P. Bingham, S.Krehula, M. Ristić, S. Musić, S. Kubuki, The relationship between local structure and photo-Fenton catalytic ability of glasses and glass-ceramics prepared from Japanese slag, *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 322(2), 751-761(2019).

5. A. S. A. Ali, S. Ishikawa, K. Nomura, E. Kuzmann, Z. Homonnay, A. Scrimshire, P. Bingham, S. Krehula, M. Ristić, S. Musić, S. Kubuki, Mössbauer and Photocatalytic Studies of $CaFe_2O_4$ Nanoparticles-Contaning Aluminosilicate prepared from Domestic Waste Simulted Slag, *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 322(3), 1469-1476 (2019).

6. K. Nomura, S. Yamakawa, M. Kasari, Y. Koike, A. Nakanishi, S. Kubuki, A. Okazawa, Magnetic property and ^{57}Fe Mössbauer analysisof dilute Fe and Nb codoped $SrTiO_{3-d}$(STO) perovskites, *Hyperfine Interact.*, 241(1), 15 (2019).

7. K. Nomura, M. Sasaki, R. Saito, Y. Koike, S. Kubuki, A. Nakanishi, State analysis of Fluonine-doped SnO_2 (FTO) by ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy, *Hyperfine Interact.*, 240(1), 118 (2019).

8. I. Khan, K. Nomura, E. Kuzmann, Z. Homonnay, K. Sinkó, M. Ristić, S. Krehula, S. Musić, S. Kubuki, The relationship between structure and Photo-Fenton catalytic ability of iron-containing Aluminosilicate glass prepared by sol-gel method, *J. Alloys. Compounds*, 816, 153227 (2019).

9. K. Nomura, S. Yamakawa, M. Kasari, Y. Koike, A. Nakanishi, S. Kubuki, A.

Okazawa, Magnetic property and ^{57}Fe Mössbauer analysis of dilute Fe and Nb codoped $SrTiO_{3-d}$(STO) perovskites, *Hyperfine Interact.*, 241(1), 15 (Dec. 2019).

10. S. Ohara, T. Naka, K. Sunakawa, S. Kubuki, M. Senna, T. Hashishin, Emergence of ferromagnetism due to charge transfer in compressed ilmenite powder using super-high-energy ball milling, *Scientific Reports*, Accepted.

11. R. Honda, A. Tanaka, K. Hirabayashi, K. Akiyama, T. Shimizu, and K. Sugiura, Crystal Structure of Dinaphtho[2,1,1',2']furan Picrate, *X-ray Stract. Anal. Online*, 35, 69-71 (2019).

II. 著書、総説等

1. 久冨木 志郎, アーマド サラー アブデルカリーム アリ, 家庭ゴミ焼却スラグを原料とするガラスセラミックスにおける鉄イオンの局所構造と光フェントン効果の相関, 光アライアンス, (2020年5月号掲載予定)

III. 学会発表、講演等

<国際学会>

1. S. Kubuki, Mössbauer Study of Electrically Conductive Sodium Phosphovanadate and Photocatalytic Iron Silicate Glasses, *Seminar in the University of Zagreb 2019*, Zagreb (Croatia) (Mar. 28, 2019).

2. S. Kubuki, A. S. A Ali, S. Ishikawa, K. Nomura, Z. Homonnay, E. Kuzmann, A. Ascrimshire, P. A. Bingham, S. Krehula, M. Ristić, S. Musić, Mössbauer Study of Iron-Containing Aluminosilicate Glass Exhibiting Visible-Light Activated Catalytic Ability, *2nd International Conference on Radioanalytical and Nuclear Chemistry 2019 (RANC-2019)*, Budapest (Hungary) (May. 5-10, 2019).

3. A. S. A Ali, S. Ishikawa, K. Nomura, Z. Homonnay, E. Kuzmann, A. Scrimshire, P. A. Bingham, S. Krehula, M. Ristić, S. Musić, S. Kubuki, Mössbauer and Photocatalytic Studies of Nitric Acid treated Domestic Waste Slag for Methylene Blue Decomposition, *5th Mediterranean Conference on the Application of the Mössbauer Effect (MECAME2019)*, Montpellier (France) (May 19 - 23, 2019).

4. I. Khan, K. Nomura, Z. Homonnay, K. Sinkó, M. Ristić, S. Krehula, S. Musić, S. Kubuki, The Relationship between Structure and Photo-Fenton Catalytic Ability of Iron-containing Aluminosilicate Glass prepared by Sol-gel method, *5th Mediterranean Conference on the Application of the Mössbauer Effect (MECAME2019)*, Montpellier (France) (May 19 - 23, 2019).

5. S. Kubuki, S. Shiba, K. Nomura, A. Kitajou, E. Kuzmann, L. Pavić, A. Santić, A. Mogoš-Milanković, Mössbauer Study of Iron- and Tin- Containing Vanadate Glass Applying as a Cathode Active Material for Sodium Ion Battery, *5th Mediterranean Conference on the Application of the Mössbauer Effect (MECAME2019),* Montpellier (France) (May 19 - 23, 2019).

6. S. Kubuki, A. Ali, S. Ishikawa, K. Nomura, A. Scrimshire, P. A. Bingham, S. Krehula, M. Ristić, S. Musić, Z. Homonnay, E. Kuzmann, Mössbauer Study of Iron-Silicate Glass-Ceramics prepared from Domestic Waste Slag Exhibiting Visible-light Activated Photocatalytic Effect, *The 35th International Conference on the Application of the Mössbauer Effect (ICAME2019)*, Dalian (China) (Sep. 1-6, 2019).

7. T. Nakane, T. Naka, S. Kubuki, K. Sato, T. Uchikoshi and H. Abe, Low Dimensional Organic-Inorganic Hybrid Nanomaterial Synthesized in Solvothermal condition, *The 57th European High Pressure Research Group Meeting on High Pressure Science and Technology(EHPRG2019)*, Praha(Czech Republic) (Sep.1-6, 2019).

8. S. Kubuki, Mössbauer Study of Iron-silicate Glass-Ceramics Prepared from Domestic Waste Slag Exhibiting Visible-light Activated Photocatalytic Effect, *Magyar Mössbauer Laboratóriumok Hálózata*, Budapest(Hungary) (Oct. 3, 2019).

9. Y. Okawa, K. Akiyama, K. Nomura, L. Pavić, A. Moguš-Milanković, S. Kubuki, Electirical Properties of Tin Phosphate Glass Synthesized by Sol-Gel Method, *The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13)*, Okinawa Convention Center, Okinawa (Japan)(Oct.27-Nov.1, 2019).

10. S. Kubuki, S. Shiba, K. Osouda, A. Kitajou, S. Okada, Mössbauer Study of Conductive Vanadate Glass and its Application for A Cathode Active Material of Na-ion Battery, *Pre-Solid State Symposium in IMCE Kyushu University*, Kasuga (Japan) (Nov. 25, 2019).

<国内学会>

1. 大川　義晃，秋山　和彦，野村　貴美，久冨木 志郎，ルカ　パヴィッチ，アンドレア モグス　ミランコヴィッチ，スズリン酸ガラスのゾルゲル法による合成と構造解析，*第 20 回メスバウアー分光研究会,* 東京大学駒場キャンパス（東京都目黒区）(Mar.13-14, 2019).

2. 長　達也，秋山　和彦，野村　貴美，久冨木 志郎，ルカ　パヴィッチ，アンドレア モグス　ミランコヴィッチ，鉄−バナジウム系酸化物の構造解析と物性の評価，*第20*

回メスバウアー分光研究会, 東京大学駒場キャンパス（東京都目黒区）(Mar. 13-14, 2019).

3. A. S. A. Ali, S. Kubuki, S. Ishikawa, K. Nomura, K. Akiyama, E. Kuzmann, Z. Homonnay, ^{57}Fe Mössbauer Study of Iron Silicate Glass Prepared from Domestic Waste Slag as an Efficient PhotoCatalyst, *第20回メスバウアー分光研究会,* 東京大学駒場キャンパス（東京都目黒区）(Mar. 13-14, 2019).

4. 小林 祐太, 柴 祥矢, 秋山 和彦, 野村 貴美, 久冨木 志郎, スズリン酸ガラスを添加したバナジン酸ナトリウムガラスセラミックスの構造と電気特性, *第20回メスバウアー分光研究会,* 東京大学駒場キャンパス（東京都目黒区）(Mar. 13-14, 2019).

5. 西田 哲明, 藤田 裕樹, 増田 彩花, 柴 祥矢, 久冨木 志郎, 岡 伸人, 導電性バナジン酸塩ガラスの局所構造と導電機構, *第20回メスバウアー分光研究会,* 東京大学駒場キャンパス（東京都目黒区）(Mar. 13-14, 2019).

6. S. Morishita, T. Naka, T. Nakane, L. Machala, K. Akiyama, R. Higashinaka, T. D. Matsuda, Y. Aoki, K. Nomura, S. Kubuki, The Effects of Heating Condition on Iron Oxide Nanoparticles Prepared in Amorphous Silica Matrix, *第20回メスバウアー分光研究会,* 東京大学駒場キャンパス（東京都目黒区）(Mar. 13-14, 2019).

7. Y. Katayama, S. Ishikawa, K. Akiyama, K. Nomura, S. Kubuki, The Origin of Visible-light Activated Photo-catalytic Effect and Chemical Structure of Iron-containing Glass ceramics Prepared from Slag, *第20回メスバウアー分光研究会,* 東京大学駒場キャンパス（東京都目黒区）(Mar. 13-14, 2019).

8. 久冨木 志郎, 家庭ごみ焼却スラグを原料とする環境浄化光触媒ガラスの開発, *第11回東京都施策提案研究発表会,* 東京都庁第二本庁舎 （東京都新宿区）(Jul. 4-5, 2019).

9. 増田 彩花, 藤田 裕樹, 山口 奈穂美, 杉本 亮弥, 久冨木 志郎, 西田 哲明, 岡 伸人, メスバウアー分光法による導電性バナジン酸塩ガラスの局所構造、および第5周期元素(Sn, In) の添加効果, *第56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. 3-5, 2019).

10. 久冨木 志郎, 廃棄物を有効活用でき、高い光フェントン効果を示す触媒, 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. 30, 2019).

11. 久冨木 志郎, 柴 祥矢, 岡田 重人, 喜多條 鮎子, 岡林 潤, Z. Homonnay, E. Kuzmann, K. Sinkó, L. Pavić, A. Santić, A. Mogus-Milanković, *バナジン酸塩ガラスを正極材として用いたナトリウムイオン電池の評価, 第 45 回固体イオニクス討論*

会, 九州大学(福岡県伊都市) (Nov. 26-28, 2019).

12. A. Ali, K. Nomura, S. Kubuki, Z. Homonnay, E. Kuzmann, A. Scrimshire, P. A. Bingham, S. Krehula, S. Musić, Effect of Fe_2O_3 content and Basicity on Photocatalytic Ability of Soda Lime Aluminosilicate Simultating Domestic Slag, *日本セラミックス協会 2020 年年会,* 明治大学(東京都千代田区)(Mar. 18-20, 2020).

13. I. Khan, K. Nomura, S. Kubuki, Z. Homonnay, E. Kuzmann, K. Sinkó, S. Krehula, S. Musić, The Relationship between Structure and Photo-Fenton Catalytic Ability of Iron-containing Aluminosilicate glass prepared by Sol-gel method, *日本セラミックス協会 2020 年年会,* 明治大学(東京都千代田区)(Mar. 18-20, 2020).

14. 秋山　和彦, 高野　和希, 杉山　陽菜, 齋藤　涼太, 諏訪　智也, Ali Ahmed, 菊永　英寿, 久冨木　志郎, 光量子放射化法による家庭ごみ焼却スラグの組成分析, *第 63 回放射化学討論会,* いわき産業創造館 (福島県いわき市) (Sep. 24-26, 2019).

15. 雨倉　啓, 秋山　和彦, 羽場　宏光, 久冨木　志郎, ランタノイド内包フラーレン(Ln3+@C823-)における内包金属原子が炭素ケージに及ぼす摂動的影響, *第 63 回放射化学討論会,* いわき産業創造館 (福島県いわき市) (Sep. 24-26, 2019).

16. 古田　悦子, 秋山　和彦, 井上　浩義, 片岡　賢英, 泉水　征昭, プラスチックシンチレータを用いた放射性水溶液の放射能測定法の開発, *第 63 回放射化学討論会,* いわき産業創造館 (福島県いわき市) (Sep. 24-26, 2019).