

東京都立大学 大学院理学研究科

化学専攻

年次報告

2020

## はしがき

令和2年度(2020年度)から本学は「首都大学東京」から「東京都立大学」に名称を変更して新たなスタートを切ることになりました。東京都立大学理学部化学科/東京都立大学大学院理学研究科化学専攻として初めて発行する年次報告書を皆様にお届け致します。この報告書は本化学科/化学専攻における教育・研究・運営活動を、専攻や大学の内外へ伝えることを目的として、旧首都大学東京の頃から毎年発行されております。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2部では各研究室の活動や研究成果について報告しております。

2020年度には教員の移動が相次ぎました。三島正規先生、兒玉健先生、阿部穰里先生が本専攻から転出され、吉川聡一先生、Mohamed Mehawed Abdellatif Soliman 先生が着任されました。各々の先生方の今後のご活躍を祈念致します。今後も、高いレベルの研究活動を維持するため、また、学科運営活動を活性化するため、人材の澁みない流動性確保が期待されます。一方、本化学専攻は、定員を満たすことなく2021年度の教育・研究活動を開始せざるを得なくなりました。今後に向けて、早急な人員の補充が必要となっております。

新型コロナウイルスの感染拡大が2019年度では治まらず2020年度も続いた為、学内・学外の多くの社会・教育・研究活動が影響を受けました。2020年4月からの講義は基本的にはオンライン配信となり、多くの教員が新たな授業形態の対応に追われることになりました。また、国内外の学会や学術講演会の多くが中止となりました。このような状況の中でも、本報告書に記載されておりますように、化学専攻全体として高い水準での教育活動や研究活動を続けることができたことと自負しております。一時期は中断した化学科セミナーもオンライン開催の形で再開/継続され、教員・学生を含む化学科全構成メンバーの知的交流や相互理解の場になりました。今後もコロナ禍を克服する対策を考えて努力する所存です。

本報告書の作成にあたっては、化学専攻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ように心がけました。皆様からの忌憚のないご意見を頂ければ、化学科/化学専攻として今後の教育・研究活動の向上に生かすことができますので、何卒宜しく願い申し上げます。

最後になりますが、本報告書の編集・製版には化学事務室の職員のご尽力があったことを付記致します。

2020年度 専攻長 波田 雅彦

# 目次

はしがき

目次

化学教室 教室協議会規則	1
2020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	9
進路状況	10
学位授与	11
文部科学省・日本学術振興会科学研究費補助金	18
その他の研究助成	23
各賞受賞	27
国際会議の開催、および組織委員としての活動	28
海外研究(国際会議における学術講演・海外での講義等)	29
共同研究	31
海外からの訪問者	33
学会活動等	34
他大学非常勤講師	37
講演会・研究会等での講義・講演	39
非常勤講師(集中講義など)	42
教育改革推進事業(理工GP)	43
各研究分野活動状況 2020年度	45

# 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

## 2020年度化学科研究室別名簿 (前期)

	固体化学	環境・地球化学	無機化学	有機無機生物化学	有機化学	生物化学	物性物理化学	分子集合物理化学	反応物理化学	有機合成化学	理論・計算化学	四位体化学
教授	岩浦 龍一 (3574,3587)	竹川 輔之 (3448)	山崎 誠司 (3577)	伊藤 隆 (3538)	野村 明広 (3542)	原田 謙志 (3535)	岡地 研一 (3453)		藤野 令康 (3447)	清水 俊夫 (3585)	渡田 理彦 (3583)	
准教授	西長 亨 (3565)		大浦 啓嗣 (3576)	三島 正輝 (3538)	福岡 昭子 (3541)	田岡 万信 (3536)	児玉 健 (3442)	野村 雄行 (3455)			中谷 直輝 (3543)	久喜木 嘉郎 (3622)
助教		三浦 龍太郎 (3445)	白井 直樹 (3676)	酒谷 鉄兵 (3525)		阿部 拓也 (3523)			松本 康 (3451)	平林 一徳 (3573)	阿部 隆直 (3582)	秋山 和彦 (3587)
		芝本 幸平 (3445)										
D3 (既入学)	リウ アシタ アイマン (3575)										Ma.Zhiheng (3301)	アリ アブドゥル サラー アブデルカリーム (3582)
D3							和田 智也 (3452)	藤 勇 (3433)	安田 龍人 (3433)		宮本 優希 (3361)	飯島将仁 (3584)
D2 (既入学)	ISLAM MD Rafikul (3575)	RATUL MD Wahidul Islam (3575)	MD Saifur Raza									KHAN Irfan (3921)
D2						千住 賢史			保原 悠人 (3435)			
D1 (既入学)				PDOOPADI MAJUN, SAYEESH (3525)	RUPRATUN, Supriatna (3526)	SUPRIKARAN, Swecha (3526)						ZHANG, BOFAN (3921)
D1					松本 拓一							佐藤 有次留 (3582)
M2	池田 敬典 (3576) 田中 輝彦 (3575) 本多 理紗 (3576) 王 宇輝 (3678)	太田 寛之 (3584) 小林 俊也 (3584) 長崎 安梨 (3584)	船橋 一輝 (3561) 藤本 裕字 (3561) 松山 雄樹 (3561) CHUDATEMYA, Vorak (3561)	亀井 健 (3537) 小泉 太典 (3537) 徳木 拓巳 (3537) 田原 亮高 (3537) 田端 真彩子 (3537)	CHADROEN, Permpon (3531) 大山 運 (3531) 川本 雄太 (3532) 阿村 隼生 (3532) 小出 勇士 (3533) 瀧田 日向子 (3528)	藤又 雅貴子 森田 和信彦 手塚 真由	増倉 弘輝 (3452)	江島 啓智 (3435) 吉屋 智博 (3435)		高杉 水晶 (3572) 高橋 暁 (3572)	瀧野 武信 (3543) 伊藤 大地 (3584)	大川 義真 (3621)
M1	増井 和信彦 (3575) 和田 真知子 (3678) 小泉 智也 (3576)	内田 俊杜 (3584) 野崎 一真 (3584)	塚田 貴純 元本 和志	立石 森 深広 志織 中島 弘隆 坂邊 史輝	CHATCHADABOON, KANCHANA MENKHAM, SIRILAK 白部 正輝 高橋 あずか 中島 野乃香 青木 智志 上田 一哉	上原 美紀 小島 伸太 藤原 尊志 手塚 悠哉	藤田 直也 (3442) 駒島 研乃 (3442) 山岸 主輝 (3442) 山口 来紗子 (3452)	伊藤 啓 (3435) 菅田 智博 (3433) 別 芳典 (3433)		宮本 暁 (3572) 飯田 瑞希 (3572)	井上 悠貴 木下 皓史 富田 大樹	藤原 遼太 (3587) 深田 智也 (3587) 中野 聖士 (3921) 西村 峻 (3587)
D4	鈴木 隼夫 (3575) 山口 乃登 (3575) 樋口 龍人 (3676) 山内 真紗希 (3575)	佐藤 真太郎 梶 亮登 堀川 直樹 前田 隆博	長田 千陽 藤田 正次 片岡 真樹 宇野 太吾 杉崎 史郎	山下 康輝 中園 結 藤田 幸子 廣瀬 智之 安藤 孝史 佐野 桂太	藤原 暁香 小嶋 美華 吉地 大河 伏野 光尚 岩淵 直祐	佐田 隼人 谷口 宜佳 高尾 真鈴 島永 美雪 宿野 宗友	尾崎 友里恵 (3442) 黒田 拓真 (3442) 松本 翠々 (3442) 三上 航 (3452)	森井 遥 (3433) 小林 果 (3435)	相原 真由 学生 智也 増佐 久 幸 松尾 航輝	伊藤 望 (3572) 野口 隼介 (3572) 松元 吾介 (3572)	角田 信史 (3581) 野宮 海音 沼宮 舞典華 市川 結唯 木村 結太 大谷 優太郎 高橋 侑花 (3584)	池田 好輝 (3587) 土田 竜貴 長瀬 啓仁 坂邊 隼史 藤原 清
特任教員	{伊藤田研究室} (3651)		{客員教授}	{客員教授}	{特任教授}	{客員教授}	{客員教授}	{客員教授}	{客員教授}	{客員教授}		{客員教授}
客員教授	{客員教授}		堀老 康 究		伊安 正 恒 (3045)	小宮 三由起	森田 武彦	阿知波 洋次	加藤 直	森 龍 雅	多田 幸 (3571)	片田 元己 (3921)
特任研究員	伊藤田 正彦		{客員准教授}		Peter Guentert	{特任准教授}	{客員教授}	城久 春夫	{客員研究員}		{客員教授}	{客員准教授}
客員研究員	大谷 裕之		西田 悦子		Jonathan Hodde	竹島 尚子 (3541)	伊藤 太二		川端 理平		中辻 博	野村 貴典 (3921)
RA 等			{客員研究員}		{特任准教授}	Nor Wahida Bird Aweng					今村 謙	Libor Machala
			小林 貴之		{客員准教授}						牛尾 二郎	Lanka Vafava
			日高 龍也		{客員准教授}							Paul Adrian Bingham
			{客員研究員}		奥川 啓	宮本 龍孝						Adriana Lanock
			平山 隼 (3561)		{客員研究員}	宮ノ入 洋平						
					寺内 勉	長野 光司 (5023)						
					成田 光弘	藤原 宗雄 (5023)						
					大田 宏基	{RA}						
					三島 綾子 (3526)	岡口 麻衣						
					{RA}							
					菅原 結るか							
秘書		樋口 有紀 (3448)		倉光 千賀子 (3538)	立神 真弓 (3542)	中川 乃紀子 (3535)	杉山 隼子 (5023)	常定 研子 (3450)			西原 真由紀 (3583)	

【学科専攻員】  
高橋 綾子 (3410)  
大浦 久恵 (3411)  
田中 綾子 (3410)

【学生実研員】  
小林 嘉平 (3482)

【元典分析員】  
松本 陽子 (3463)

## 化学教室委員会委員

2020年度化学専攻内委員

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

## 全学・理学研究科等委員会委員

2020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

専攻長代理

理工学系人間関係相談チーム

研究費評価・配分委員会部会

理工学研究科研究推進室

理工学研究科広報委員会

教務委員会部会

グローバル副専攻WG

基礎教育部会

理工学系インターンシップ委員会

教員養成カリキュラム委員会

理工学系入試委員会（多様な入試）

理工学系入試委員会（入試制度）

理工学研究科大学院入試委員

自己点検・評価委員会部会

FD委員会

就職担当教員

理工学研究科図書委員会

環境安全部会

特別管理産業廃棄物管理責任者

保安管理部会

高圧ガス保安管理部会

放射線安全部会

毒物劇物関係

R I 施設委員会

国際規制物質管理委員会

理工人事制度WG

### 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 久富木 志郎

危険物保安監督者 清水 敏夫

R I 施設委員会 久富木 志郎

国際規制物質管理委員会 久富木 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

波田 雅彦

伊藤 隆

竹川 暢之

伊藤 隆

竹川 暢之

竹川 暢之

好村 滋行

兒玉 健

兒玉 健

大浦 泰嗣

山添 誠司

好村 滋行

山添 誠司

菊地 耕一

野村 翠広

稲垣 昭子

田岡 万悟

伊藤 隆

竹川 暢之

三島 正規

西長 亨

菊地 耕一

清水 敏夫

西長 亨

久富木 志郎

稲垣 昭子

大浦 泰嗣

久富木 志郎

菊地 耕一



## 人事異動 2020 年度

### <採用>

教授 歸家 令果 2020 年 4 月 1 日  
(東京大学 大学院 理学研究科 化学専攻 准教授から着任)

准教授 Abdellatif Mohamed Mehawed Soliman 2020 年 12 月 1 日  
(エジプト国立研究所 准教授から着任)

助教 吉川 聡一 2020 年 10 月 1 日  
(京都大学 触媒・電池元素戦略研究拠点 特定助教から着任)

### <退職>

准教授 三島 正規 2021 年 3 月 31 日  
(東京薬科大学 薬学部 分子生物物理学 研究室 教授として異動)

准教授 兒玉 健 2021 年 3 月 31 日  
(神奈川工科大学 基礎・教養教育センター 教授として異動)

助教 阿部 穰里 2021 年 3 月 31 日  
(広島大学 大学院 先進理工系科学研究科 准教授として異動)

2020年度化学科時間割

曜日	学年	1時間 8:50~10:20	2時間 10:30~12:00	3時間 13:00~14:30	4時間 14:40~16:10	5時間 16:20~17:50
月	1	11-310 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)	8-211 基礎ゼミ 竹川(前)
	2		11-208 構造物理化学 中谷(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)	
	3	11-103 物性化学Ⅰ 菊地(前)	11-103 放射化学Ⅰ 大浦(前)	8-388, 387 化学専門実験Ⅰ 各教員(前) 8-388, 387 化学専門実験Ⅱ 各教員(後)		
	4	化学セミナー(後)(8-301-竹川, 8-307-新任, 8-304-好村, 8-302-菊地・見玉, 11-202-廣田・田岡, 12-208-杉浦)			化学セミナー(後)(8-302-清水)	
火	1	1-101 教養科目 伊藤(前)	1-210 教養科目 大浦(前)		1-301 一般化学Ⅰa 城丸(前) 1-203 化学概説Ⅰa 清水(前) 1-201 化学概説Ⅰb 佐藤(前) 1-310 化学概説Ⅱ 稲垣(前) 1-110 化学概説Ⅱ 西長(前) 1-202 化学概説Ⅱa 伊藤(後) 1-110 化学概説Ⅱb 山添(後)	
	2					
	3	11-103 物理化学演習(前) 各教員	11-103 化学熱力学Ⅱ 好村(前) 11-106 物性化学Ⅱ 見玉(後)	8-388, 387 化学専門実験Ⅰ 各教員(前) 8-388, 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)		8-213 総合ゼミナール 竹川/大橋/海老原(後)
	2	1-109 量子化学Ⅰ 波田(前) 1-204 生物物質化学Ⅱ 廣田(後)	1-206 生物物質化学Ⅰ 廣田(前) 1-309 化学熱力学Ⅰ 菊地(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)
	3		11-103 地球環境化学 竹川(前) 11-103 化学基礎測定Ⅰ 山添(後)	8-388, 387 化学専門実験Ⅰ 各教員(前) 8-388, 387 化学専門実験Ⅱ 各教員(後)		
木	1			1-208 一般化学Ⅱb 城丸(前) 1-209 一般化学Ⅱb 加藤(後) 8-385 化学実験 c / 自然科学実験 武蔵(前) 8-385 化学実験 a 各教員(後)	1-103 一般化学Ⅰa 波田(前)	
	2		12-101 無機化学各種Ⅱ 杉浦(前) 12-101 錯体化学 杉浦(後)	1-204 有機化学Ⅰ 野村(専)(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)	
	3		11-103 生物化学Ⅰ 田岡(前) 11-103 生物化学Ⅱ 田岡(後)	8-388, 387 化学専門実験Ⅰ 各教員(前) 8-388, 387 化学専門実験Ⅱ 各教員(後)		
金	1		1-103 教養科目 見玉(後)		1-104 物理化学初等演習Ⅱ(前) 1-201 一般化学Ⅱa 菊地(後)	8-205 基礎ゼミ 好村(前) 1-103 物理化学初等演習Ⅲ(後)
	2			8-385 化学実験 d / 自然科学実験 武蔵(後) 11-201 有機及生物化学演習 各教員(後)		
	3	11-103 化学基礎測定Ⅱ 大浦(前)	11-306 反応有機化学 野村(専)(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 新任(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)	11-103 化学熱力学Ⅲ 好村(後) 11-108 半田化学 大浦(前)[6限] 11-103 放射化学Ⅱ 大浦(後)[6限]
	4	化学セミナー(後) (8-305-久喜木)				化学セミナー(後)(8-306-山添・大浦)

2020年度 大学院授業時間割

東京理科大学 理工学研究科 分子物質化学専攻

( )内は授業番号

	① 8:00~10:00		② 10:00~12:00		③ 13:00~14:00		④ 14:40~16:10		⑤ 16:20~17:00		⑥ 18:00~19:00		⑦ 19:40~21:10		
	授業科目	教室	授業科目	教室	授業科目	教室	授業科目	教室	授業科目	教室	授業科目	教室	授業科目	教室	
月	(後期)化学特別ゼミナーⅡ (R236) KR931 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅡ (R236) KR931			8-302 黒崎・見玉	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R247) KR942 (後期)ゼミナーⅡ (R248) KR943 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R247) KR942 (後期)ゼミナーⅡ (R248) KR943			8-302 黒崎							
			化学特別演習Ⅱ (前期) (R233) (物性化学)	8-302 黒崎・見玉	物理化学特別演習Ⅰ (R159) ○ (物理化学特別演習)(後A) (R190)			8-301 中野							
	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R237) KR932 (後期)ゼミナーⅡ (R238) KR933 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R237) KR932 (後期)ゼミナーⅡ (R238) KR933			8-304 野村											
	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R239) KR934 (後期)ゼミナーⅡ (R240) KR935 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R239) KR934 (後期)ゼミナーⅡ (R240) KR935			8-301 竹川					(後期)化学特別ゼミナーⅠ (R244) KR941 ○ (後期)化学特別ゼミナーⅡ (R245) KR942		11-101 黒田・中野				
	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R241) KR940 (後期)ゼミナーⅡ (R242) KR941 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R241) KR940 (後期)ゼミナーⅡ (R242) KR941			11-102 黒田・田沼	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R243) KR942 (後期)化学特別ゼミナーⅡ (R244) KR943			8-307 黒家							
	(後期)化学特別ゼミナーⅠ (R244) KR940 ○ (後期)化学特別ゼミナーⅡ (R245) KR941			8-307 黒家	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R243) KR942 (後期)化学特別ゼミナーⅡ (R244) KR943			8-301 黒崎・見玉							
(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R251) KR946 (後期)ゼミナーⅡ (R252) KR947 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R251) KR946 (後期)ゼミナーⅡ (R252) KR947			12-108 杉浦					(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R253) KR948 (後期)ゼミナーⅡ (R254) KR949 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R253) KR948 (後期)ゼミナーⅡ (R254) KR949			11-101 黒田・中野				
火			化学特別Ⅱ (後期) (R222) (物理化学)	8-302 竹川・大塚				(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R243) KR940 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅡ (R244) KR941		8-302 黒田・中野					
			物理化学特別演習Ⅱ (R108) ○ (前期)(原子物理) (R205)	11-102 田沼											
			物理化学特別演習Ⅱ (後A) (アノ・カブリヤック性特論 (R0147) I) (R0148)	8-300 菅田											
			物理化学特別演習Ⅱ (化学特論Ⅱ(後期)) ○ (分子の電場と計算) (R167) (R168)	8-302 黒田・中野											
水	物理化学特別演習Ⅱ (化学特論Ⅱ(後期)) ○ (分子物理化学) (R183) (R184)	11-101 黒家	化学特論Ⅱ(前期) (R223) (有機化学特論)	11-101 黒田・中野					(後期)化学英語特論 (R234)	8-302 n.Alden Koo					
	物理化学特別演習Ⅱ (化学特論Ⅱ(前期)) ○ (基礎系の物理化学) (R185) (R186)	11-102 黒崎・見玉	物理化学特別演習Ⅱ (前期)(物性化学Ⅰ) (R189) (R206)	11-102 黒田											
			化学特論Ⅱ(後期) (現代生命科学) (R224)	11-102 黒田・中野	物理化学特別演習Ⅰ (R181) ○ (物理化学特別演習)(後A) (R182)	8-301 田沼									
木	化学特別演習Ⅱ (前期) (R231) (有機反応論)	11-102 野村	① 物理化学特別演習Ⅱ (前期) (R110) ② (物理化学特別演習Ⅱ) (R113)	8-301 黒家	① 物理化学特別演習Ⅰ (後A) (R151) ② (ソフトマター物理特論Ⅰ) (R152)	8-301 黒田									
金	化学特論Ⅰ (前期) (R221) (物理化学)	11-101 黒崎・久基木						(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R253) KR940 (後期)ゼミナーⅡ (R254) KR941 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R253) KR940 (後期)ゼミナーⅡ (R254) KR941		8-308 山田・大塚					
	(後期)化学特別ゼミナーⅡ (R239) KR945 ○ (後期)化学特別ゼミナーⅡ (R240) KR946		8-305 久基木	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R249) KR944 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅡ (R250) KR945		8-305 久基木	(前期)化学特別ゼミナーⅠ (R257) KR947 (後期)ゼミナーⅡ (R258) KR948 ○ (前期)化学特別ゼミナーⅠ (R257) KR947 (後期)ゼミナーⅡ (R258) KR948			8-303 伊藤・三島					
土															
集中授業	化学特別演習Ⅱ I A(前期) (R284) I B(前期) (R940)		I B(後期) (R285) I A(後期) (R941)	各教員	放射線物理Ⅰ (前期) (R005)	12-101	化学学外体験実習		物理化学特別演習Ⅰ-0						
	化学特別演習Ⅱ II A(前期) (R287) II B(前期) (R942)		II B(後期) (R288) II A(後期) (R943)	各教員	放射線物理Ⅱ I (前期) (R006)	久基木・他	化学学外体験実習	物理化学特別演習Ⅰ-0							
	○ II A(前期) (R290) II B(前期) (R944)		○ II B(後期) (R291) II A(後期) (R945)	各教員	放射線物理Ⅱ II (前期) (R007)	黒田	化学特別演習Ⅰ								
	○ IFA(前期) (R283) IFB(前期) (R946)		○ IFA(後期) (R294) IFB(後期) (R947)	各教員	放射線物理Ⅱ II (前期) (R008)	久基木	化学特別演習Ⅱ								

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ゼミナーⅠ-Ⅲについて、Ⅱを後期に履修し、Ⅲを前期に履修する。また、化学特別演習については1年次後期にⅡAを履修し、翌年度前期にⅡB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ゼミナーⅢ-Ⅳについて、Ⅲを後期に履修し、Ⅳを前期に履修する。また、化学特別演習については1年次後期にⅡAを履修し、翌年度前期にⅡB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ゼミナーⅢを履修し、前期にⅣを履修する。また、化学特別演習については2年次後期にⅡAを履修し、翌年度前期にⅡBを履修する。



## 在学者数 2020年度

2020年4月1日現在

学部	一年生	二年生	三年生	四年生	計
東京都立大学	49名	50名	47名	57名	203名
総計					203名

博士前期課程	一年生	二年生	計
東京都立大学	38名	33名	71名
総計			71名

博士後期課程	一年生	二年生	三年生	計
東京都立大学	7名	6名	9名	22名
総計				22名

## 進路状況 2020年度

2021年3月15日現在

1. 学部卒業生数：52 名

進路		
進学： 38名	東京都立大学	34 名
	他大学	4 名
就職その他：14 名	民間企業	11 名
	公務員等	0 名
	教員	0 名
	その他	3 名

2. 大学院博士前期課程修了者数：30 名

進路		
進学： 2名	東京都立大学	2 名
	他大学	0 名
就職その他：28名	民間企業	27 名
	公務員等	名
	教員	名
	その他	1 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	1 名
	教員	1 名
	PD・その他	2 名

## 学位授与 2020 年度

### <学士>

#### 錯体化学

- 橋口 兼人 オリゴチオフェン置換  $\pi$  拡張アミノトロポン配位子の合成と銅錯体の性質  
山口 乃愛 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  
山内 美沙希 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

- 佐藤 勇太郎 加熱サンプリング配管内における不揮発性粒子の透過率評価  
堀川 佳奈女 難揮発性硝酸塩エアロゾル粒子検出に関する研究  
前田 隆博 レーザー誘起蛍光法を用いたエアロゾル粒子の検出  
劉 兆豊 低圧インパクター・キャピラリ導入型ナノ粒子分析計の基礎開発

#### 無機化学

- 宇野 太喜 圧電材料を用いた低周波振動触媒反応系の開発  
片岡 実織 CO<sub>2</sub>吸収を志向したシクロヘキシルアミン修飾シリカの開発  
杉崎 史都 k<sub>0</sub>-IAEAソフトウェアを用いたk<sub>0</sub>標準化中性子放射化分析—評価と応用—  
長田 千朋 銅(I)を含む複合金属酸化物の合成とその触媒応用  
福田 正次 担持金属ナノ粒子への金属酸化物クラスターの修飾とその触媒応用

#### 有機構造生物化学

- 福田 華子 In-cell NMR による Sam68 蛋白質の機能解析  
廣瀬 智之 Solvent PRE を用いた蛋白質の NMR 解析  
中原 航 SpyTag/SpyCatcher システムの構築  
山下 康輝 NMR による SARS-CoV-2 main protease の立体構造解析および Drug との相互作用  
館野 桂太 ヒト GRB2 と SOS1 および EGFR 由来ペプチドとの相互作用解析  
安藤 考史 異種核多次元 NMR によるヒト・アダプター蛋白質 GRB2 の解析

## 有機化学

- 岩瀬 龍祐 非架橋ハーフチタノセン触媒によるオレフィン重合の機構解析  
小嶋 美華 オレフィンメタセシス重合による新規バイオベースポリマーの精密合成  
牧野 亮司 ハーフチタノセン触媒による水酸基含有ポリオレフィンの精密合成と特性解析  
吉池 大河 BINAP を含む二核イリジウムヒドリド錯体上における光を駆動力とする  
アルコール類との反応  
渡部 楓音 単座 Guanidine 配位子を有するイミド配位ニオブ錯体の合成と反応性

## 生物化学

- 海老澤 真於 HSV-TK-HIS マーカー遺伝子を用いた Y 染色体喪失細胞の作製  
佐伯 隼人 RAS タンパク質の活性型変異によるゲノムストレスに関する研究  
谷口 友哉 DT40 を用いた Pole 校正エクソヌクレアーゼ活性の機能解析  
森永 美雪 複製停止を防止する DNA ダメージトレランス経路の機能解明  
猪飼 茉友 tRNA の 5-methylcytidine 修飾が他の転写後修飾に及ぼす影響の解明

## 物性物理化学

- 尾身 友里亜 理論計算による未発見 La<sub>2</sub>@C<sub>80</sub> の存在可能性の検討  
黒田 拓真 Sm を含む二核金属内包フラーレン合成の試み  
松本 奈々 Dy 二核金属内包フラーレンアニオンの単分子磁石特性の再測定  
三上 航 β-(MTDT-TTP)2BF<sub>4</sub> の一軸圧下における電気物性

## 反応物理化学

- 相原 真由 レーザーアシステッド電子回折用高電圧電子銃の開発  
芋生 郁也 多光子イオン化によって生成した SF<sub>5</sub><sup>+</sup> の質量選択的捕捉  
晴佐久 隼 散乱遅延時間測定のための波長板制御システムの開発と数値シミュレーション  
松尾 航輔 走査電子顕微鏡の移設と電子銃部分へ光導入システムの構築

## 有機合成化学

- 伊藤 望 硫黄二座配位子により安定化された金クラスターの合成研究  
野口 駿介 ナフタレ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研究  
松元 香介 15 員環及び 18 員環チアクラウンエーテルのメチル化反応



## 理論・計算化学

野宮 海音	Ni(II)キノノイド錯体のベイポクロミズムに関する理論的研究
岩室 寿美果	アクチノイド化合物計算に向けた相対論的電子相関プログラムの開発
市川 絵里	非生物性還元で生成するウラン結晶の同位体分別に関する理論的研究
木村 祐太	ルテニウム色素増感分子に含まれる疎水基の分子動力学法による解析
大谷 優太郎	2 電子占有 DMRG 法の開発
高橋 侑花	テトラアリアルジフルオロパーテルランとチエニルボロキシンの反応
糸井 遥	循環的な反応を伴う三成分系の相分離シミュレーション
小林 果	自己駆動粒子を用いた感染症流行のシミュレーション

## 同位体化学

池田 好輝	ピレニル固定相と高次フラーレンの相互作用に関する研究
齋藤 滉	模擬家庭ごみ焼却スラグの光触媒効果と構造の相関
土田 竜貴	家庭ごみ焼却スラグに含まれる有価金属の湿式化学分離の開発
長瀬 泰仁	スズをドーピングしたゲーサイトナノ粒子の合成と構造解析
渡邊 聡史	ホスホバナジン酸ナトリウムセラミックスの Na イオン電池正極材としての評価

## <修士>

### 錯体化学

- オウ ウテイ 不斉ビナフチル骨格に導入した蛍光標識色素の分光学的挙動  
田中 惇彦 ビピレノールのキロプティカル特性の向上を目指した多量反応と官能基化  
本多 理沙 ジナフトフランの反応挙動解明とそれを用いた光機能性材料の合成研究

### 環境・地球化学

- 小林 優也 熱分解特性に基づくエアロゾル化学種のオンライン測定方法の開発  
長崎 安奈 航空機ジェットエンジンオイル粒子の揮発特性に関する研究

### 無機化学

- 澁澤 一輝 金属酸化物担持Au<sub>25</sub>クラスター触媒の精密合成法の開発  
藤木 裕字 Lindqvist型構造を持つ金属酸化物クラスターの機能とその応用  
松山 知樹 配位子保護金クラスターの電子・幾何構造の解明

### 有機構造生物化学

- 亀井 駿 NMRによるKRASとRGL2の相互作用の解析  
小泉 太貴 緑赤色光吸収タンパク質GAFドメインの構造及び発色団のプロトン化状態の解析  
鈴木 拓巳 マルチドメインタンパク質の構造解析に資するタンパク質連結法の開発とその応用  
田岸 亮馬 常磁性NMRを用いたマルチドメイン蛋白質 linear diubiquitinの立体構造解析  
田端 真彩子 NMRを用いたマルチドメイン蛋白質 Grb2の立体構造解析

## 有機化学

- 大山 遼 バイクロモフォア Ir シクロメタレート を光増感ユニットとして含む二核錯体の合成と反応
- 河村 倅生 ハーフチタノセン触媒によるエチレンとリモネンやピネンとの共重合
- 川本 雄太 NHC 配位子を有するイミド配合バナジウム-アルキル、アルキリデン錯体の合成と反応性
- 小出 晃士 単座アニオン性配位子を有するイミド配位ニオブ錯体の合成と反応性
- 濱岡 日向子 架橋ジチオフェンが縮環した平面 [4 n] アヌレン類の合成と性質

Chaijaroen Permpoon

Synthesis of Bio Based Long Chain Polyesters by Acyclic Diene Metathesis (ADMET) Polymerization and Tandem Hydrogenation, and Depolymerization with Ethylene

## 生物化学

- 猪又 侑里子 細胞内における Y ファミリーポリメラーゼ Pol  $\eta$ 、Pol  $\iota$ 、Pol  $\kappa$  の機能解明
- 幸田 和佳奈 転写因子群の協調的結合およびクロマチン制御によるゲノム上でのシグナル伝達経路統合機構の解明
- 手塚 真由 安定同位体による代謝標識を用いた tRNA の転写後修飾の定量法の開発と応用

## 物性物理化学

- 津金 弘輝 三量体を成す TTP ラジカル塩の研究

## 有機合成化学

- 高杉 水晶 ベンゼン環とシス二重結合を交互に導入した不飽和ベンゾチアクラウンエーテルによるフラレンの包接
- 高橋 蓮 複数のスルホニウム部位を有するベンゼン誘導体の合成と性質

### 理論・計算化学

- 道明 武信 星間空間における炭素原子及びリン原子の化学進化に関する理論的研究
- 伊藤 大地 ペンダントアーム型配位子を有する新規 p-ブロック化合物の合成とその配位子の開発
- 江良 勝智 自律的に速度を選択する弾性スイマー
- 古屋 智博 細胞シートにおける亀裂進展の理論モデル

### 同位体化学

- 大川 義晃 ゼル-ゲル法により合成したスズリン酸ガラスの局所構造と導電性の相関

<博士>

錯体化学

リザ ウンメ アイマン

Studies on Chemical Modifications of Bipyrenols and Their Application

物性物理化学

和田 智也

Studies of Physical and Structural Properties in Radical Salts of  
MTDT-TTP with Bis(methylthio) Group

理論化学

宮本 優弥

「自然摂動軌道の開発と電磁気物性の解析への応用」

“Development of Natural Perturbation Orbitals and Application to  
Quantum-Chemical Analysis of Electromagnetic Properties”

サルマハミナチ

“DFT Study of Ruthenium(II) and Iridium(III) Complexes as  
Photosensitizer and Photocatalysis”

(光増感剤および光触媒としてのルテニウム(II)およびイリジウム(III)錯体の  
密度汎関数法の研究)

坂部 将仁

Studies on Synthesis and Characterization of Hypercoordinated Pnictogen  
Compounds Having Pendant-arm Ligands

(ペンダントアーム型配位子を有する高配位ニクトゲン化合物の合成と性質  
の研究 (英文) )

曹 勇

熱的に駆動されるマイクロマシンの非平衡統計力学 (英文)

安田 健人

マイクロマシンの自己推進と状態遷移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 2020年度

### <新学術領域研究>

- 伊藤 隆 新学術領域研究（計画研究）継続  
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
- 中谷 直輝 新学術公募研究 代表 新規  
周期的 QM/MM 法によるソフトクリスタルの構造と電子状態制御に関する理論研究
- 好村 滋行 新学術領域研究（研究領域提案型）代表 新規  
粗視化モデルで解明する生体ナノマシンの自律的な運動機構

### <基盤研究>

- 竹川 暢之 基盤研究 B（一般）代表 新規  
難揮発性成分を含む硫酸塩・有機エアロゾルのオンライン分析法の開発
- 伊藤 隆 基盤研究 S 分担者 継続  
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
- 基盤研究 C 分担者 新規  
Use of contact prediction-based restraints for protein structure determination from sparse NMR data
- 野村 琴広 基盤研究 B 代表 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 B 代表 新規  
放射線などで生じる末端に付加体が付く単鎖DNA切断における複製停止機構の解明

基盤研究 S 分担者 継続

ヒトゲノム編集細胞を使った、化学物質の薬理作用・有害性を解析するシステムの構築

歸家 令果

基盤研究 B (一般) 代表 継続

テラヘルツ波アシステッド電子散乱を用いたフェムト秒気体電子回折

三島 正規

基盤研究 B 代表 継続

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

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 新規

難揮発性成分を含む硫酸塩・有機エアロゾルのオンライン分析法の開発

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 継続

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  
Use of contact prediction-based restraints for protein structure determination from sparse NMR data
- 基盤研究 C 分担者 新規  
高分子量蛋白質の NMR 構造解析を目指したスパーズ選択標識と NMR 自動解析法の開発
- 阿部 拓也 基盤研究 C 代表 新規  
遺伝学による BLM-TOP3 $\alpha$ -RMI1-RMI2 複合体の作用機序の解明
- 阿部 稜里 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 新規  
レーザー光会合による冷却分子 EDM 探索

### <挑戦的研究>

- 竹川 暢之 挑戦的研究 (萌芽) 代表 新規  
広域エアロゾル粒子維持機構の鍵となる核生成・遅い成長過程の検出法の探索
- 山添 誠司 挑戦的研究 (萌芽) 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 挑戦的研究 (萌芽) 代表 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
- 歸家 令果 挑戦的研究 (萌芽) 継続  
捕捉イオン電子回折法による分子イオン・分子錯合体イオンの構造変化ダイナミクス
- 波田 雅彦 挑戦的研究 (萌芽) 代表 継続  
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



阿部 穰里 挑戦的研究(萌芽) 分担者 継続  
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

<研究活動スタート支援>

吉川 総一 代表 新規  
ボトムアップアロイングによる協奏型活性点の設計

<国際共同研究加速基金>

山添 誠司 国際共同研究強化(B) 分担者 継続  
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 国際共同研究強化(B) 代表 継続  
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 国際共同研究強化(B) 代表 継続  
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 国際共同研究強化(B) 分担者 継続  
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

吉川 総一 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 国際共同研究強化(B) 分担者 継続  
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

<二国間交流事業>

廣田 耕志

共同研究・セミナー 代表 新規

革新的がんゲノム医療に向けた遺伝子シナジーの解明

## その他の研究助成 2020 年度

### <東京都立大学>

- 伊藤 隆 傾斜的研究費（全学分） 学長裁量枠（戦略的研究プロジェクト） 新規  
医薬に資する in situ NMR 生命科学
- 廣田 耕志 傾斜的研究費（全学分） 学長裁量枠 研究環 新規  
革新的癌治療薬品スクリーニング法開発に向けた国際共同研究環
- 波田 雅彦 傾斜的研究費（部局競争）  
高精度相対論的量子化学計算の種々の化学反応や化学現象への実践的応用
- 西長 亨 傾斜的研究費(部局競争的経費) 新規  
導電性超分子ポリマーの合成と熱電変換への応用
- 阿部 拓也 傾斜的研究費（全学分） 学長裁量枠 研究環 新規  
多彩なモデル生物系を用いた DNA 複製・修復機構の解明
- 理学研究科若手奨励研究費 新規  
ヒトが Y 染色体を失う原因の解明

### <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
- JST/CREST 新規  
円偏光発光材料の開発に向けた革新的基盤技術の創成

- 竹川 暢之 環境省環境研究総合推進費 代表 新規  
国際民間航空機関の規制に対応した航空機排出粒子状物質の健康リスク評価  
と対策提案
- 学術相談料：日本製鉄株式会社 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 継続  
PM2.5 評価技術の確立および適用
- 山添 誠司 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) 継続  
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 継続  
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 東京都高度研究 新規  
高性能分子触媒が先導する高分子機能材料の合成と効率合成手法開発
- e-ASIA 共同研究プログラム (e-ASIA JRP) : 科学技術振興機構 (JST) 新規  
触媒的効率炭素-炭素結合形成を基盤とする植物油由来の高分子機能材料の  
開発
- 公益財団法人スズキ財団 新規  
植物由来モノマーを原料とする新規オレフィン系高分子機能材料の創製
- 学術相談：日本ポリケム株式会社 新規  
研究助成
- 学術相談：ポリプラスチック株式会社 継続  
研究助成

学術相談：AGC 株式会社 継続  
研究助成

歸家 令果 戦略的創造研究推進事業 さきがけ研究 代表 新規  
光ドレスト高速電子線散乱によるzeptosecond遅延時間測定  
  
光・量子飛躍フラッグシッププログラム (Q-LEAP) 分担 継続  
先端レーザーイノベーション拠点

分子科学研究奨励森野基金 研究助成金 代表 継続  
レーザーアシステッド電子散乱による超高速分子イメージング

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

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 計る紙の核種分析によるブルーム動態の解析

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)

佐藤 総一 共同研究 株式会社フラスク  
(内容の開示不可)

久富木 志郎 2020 年度 物質・デバイス領域共同研究拠点 一般研究課題 継続  
リン酸濃度を変化させた導電性ホスホバナジン酸ナトリウムガラスの  
Na イオン電池正極材としての評価

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

- 池谷 鉄兵 公益財団法人精密測定技術振興財団 新規  
より自然な溶液・細胞内環境下での蛋白質のアンサンプル立体構造解析
- 阿部 拓也 千里ライフサイエンス振興財団 岸本基金研究助成 新規  
ヒトが Y 染色体を失う原因、及びその影響の解明
- 清野 淳司 国立研究開発法人科学技術振興機構 提案公募型研究費  
量子化学と情報学との融合による次世代密度汎関数理論と均一系触媒における  
反応予測システムの開発

**各賞受賞 2020年度**

**Chatchaipaiboon Kanchana**

第50回石油・石油化学討論会 熊本大会

2020年11月12日

**Synthesis of (arylimido)niobium(V)-alkylidene complexes as olefin  
metathesis catalysts**

優秀講演による特集号への依頼投稿

## 国際会議の開催、および組織委員としての活動 2020年度

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

- ・ The 9th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology (TOCAT9)  
福岡 2022年7月 国内組織委員
- ・ International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2021 (C&FC2021)  
東京都立大学 2021年12月 International Board Member
- ・ Asian Polyolefin Workshop 2021 (APO2021)  
Bangkok, Thailand 2021年12月 International Advisory Board
- ・ 第51回石油・石油化学討論会 熊本大会  
熊本 2020年11月 ポリマー・オリゴマーセッション企画担当

歸家 令果

- ・ 第36回化学反応討論会  
オンライン 2021年6月2日～4日 (準備中) 実行委員

三島 正規

- ・ ISMAR-APNMR-NMRSJ-SEST2021合同会議 組織委員会 委員



**海外研究 [国際会議における学術講演・海外での講義等] 2020年度**

伊藤 隆

**29th International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems**

2020年8月23日～28日 (2年延期)

Boston, USA

(講演タイトル 未定)

**The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2020**

2020年12月15・16日 (1年延期)

Honolulu, USA

**Solution NMR approaches to investigating protein behaviours under intracellular crowding environments**

野村 琴広

**Thammasat University, Online seminar series in Bioenergy and Catalysis**

2020年8月10日

オンライン開催

**Synthesis of New Bio-Based Functional Polymers by Efficient Molecular Catalysis: A Survey of Recent Research**

**Virtual Symposium on Sciences 2020 (VSoS) On-line symposium**

2020年11月2・3日

オンライン開催

**Synthesis of Bio-Based Polyesters by Tandem Olefin Metathesis Polymerization and Hydrogenation**

歸家 令果

**The 6th Quantum Science Symposium 招待講演**

2020年9月27日～11月8日

オンライン

**Determination of collision times in laser-assisted electron scattering for ultrafast imaging of atoms and molecules**

Symposium on Recent Development in Ultrafast Intense Laser Science 2 招待講演

2021年3月29日

東京大学とオンラインのハイブリッド

Development of a pulsed electron gun for scanning electron microscope

中谷 直輝

Japan-Norway Bilateral Symposium from Fundamental Chemistry to Porous Materials:  
Theory and Experiment

Aug. 20-21, 2020, Online

Naoki Nakatani, Jun Yi, and Masahiko Hada

“TDDFT studies on the XANES spectra of Ti and V complex catalysts” (invited)

好村 滋行

Biological and soft-matter physics

Dec.2020, Israel, Online

S. Komura

A three-sphere microswimmer in a structured fluid.

阿部 穰里

Fundamental Sciences & Quantum Technologies using Atomic Systems, (FSQT2020),  
Sep.28-Oct.1, 2020, Online conference.

Minori Abe

“Reconsideration of the electronic term of the Schiff moment in closed-shell molecules”

Yamada Conference LXXII: The 8th Asia-Pacific Conference on Few-Body Problems in  
Physics (APFB2020),

1-5 March 2021, Kanazawa, JAPAN (hybrid of onsite and online participation)

Minori Abe

“Diatomic molecular electronic wavefunction inside a nucleus for measurement of nuclear  
Schiff moment”

## 共同研究 2020年度

- 竹川 暢之
- ・2009年～ 産業技術総合研究所
  - ・2014年～ 日本製鉄株式会社
  - ・2017年～ 国立環境研究所
- 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 中国科学院過程工程研究所（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 Istituto di Scienze e Tecnologie Chimiche “G. Natta”, CNR・イタリア
  - ・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 アテネオ・デ・マニラ大学・フィリピン
  - ・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
- 歸家 令果
- ・通年 東京大学
  - ・通年 モスクワ大学・ロシア
  - ・2021年1月～現在 グラーツ工科大学・オーストリア
  - ・2021年1月～現在 ウィーン工科大学・オーストリア
- 清水 敏夫
- ・通年 電気通信大学
- 波田 雅彦
- ・通年 埼玉大学
  - ・通年 奈良女子大学
- 西長 亨
- ・平成26年1月～ 北里大学理学部化学科

- 三島 正規
- ・豊橋技術科学大学
  - ・大阪大学
  - ・佐賀大学
  - ・名古屋大学
- 稲垣 昭子
- ・2020年4月1日～2021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
  - 東京都立大学、東京工業大学資源化学研究所
- 中谷 直輝
- ・通年 フランス・ストラスブール大学
  - ・通年 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 新潟大学
  - ・通年 九州大学・先導物質化学研究所
- 久富木 志郎
- ・不定期 ルジェルボスコヴィッチ研究所・クロアチア
  - ・不定期 エトボシュローランド大学・ハンガリー
  - ・不定期 九州大学先導物質化学研究所
  - ・不定期 東京工業大学 物質理工学院
- 三澤 健太郎
- ・2016年4月～ 国立環境研究所
- 芝本 幸平
- ・2020年～ (2020年はメール会議のみ)
  - 東京工科大学 藤田助教
- 松本 淳
- ・通年 ウォータールー大学・カナダ
  - ・通年 リヨン大学・フランス
  - ・通年 理化学研究所
- 阿部 穰里
- ・通年 スイス連邦工科大学ローザンヌ校
  - ・通年 東京工業大学

海外からの訪問者 2020年度

有機化学研究室

Zelin Sun

香港理工大学深圳研究院

2020年1月14日～9月30日 共同研究

学会活動等（学協会等での委員等） 2020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～
  - ・ 日本大気化学会 運営委員 2019～2021年
  - ・ 京都大学 生存圏研究所 生存圏学際萌芽研究センター運営会議委員 2020～2021年
  - ・ 日本学術会議 International Association of Meteorology and Atmospheric Sciences (IAMAS) 小委員会委員 幹事 2020～2023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
- 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11期正会員
  - ・ 石油学会 石油学会誌編集委員会 委員長
  - ・ 石油学会 研究技術企画委員会 委員
  - ・ 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 Member

・ Scientific Research Publishing, Inc. (Irvine, CA, USA) *Green Sustainable Chemistry*, Editorial Board

- 歸家 令果
- ・ 原子衝突学会 運営委員 2019年～2020年
  - ・ 原子衝突学会 広報渉外委員 2020年～2021年
- 清水 敏夫
- ・ *Journal of Sulfur Chemistry* 編集委員 2006年～
  - ・ 有機合成化学協会 関東支部常任幹事 2020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～
- 西長 亨
- ・ 有機合成化学協会 代議員
- 大浦 泰嗣
- ・ 放射化分析研究会 幹事 2000年～
  - ・ 東北大学電子光物理学研究センター 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～
  - ・ 日本放射化学会 理事 2020年～
- 三島 正規
- ・ 日本核磁気共鳴学会 評議員 2019年～2020年
- 稲垣 昭子
- ・ 複合系の光機能研究会 世話人
  - ・ 日本化学会「化学と教育」 編集幹事会委員
- 好村 滋行
- ・ 日本液晶学会 ソフトマターフォーラム委員 2020年度
- 久富木 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～
- 白井 直樹
- ・ 放射化分析研究会 幹事 平成30年度～
- 吉川 聡一
- ・ 触媒学会若手会 委員 平成30年度～
- 阿部 穰里
- ・ 同位体科学会 執行役員 2017年～
  - ・ REHE2020 国際委員 2018年～

秋山 和彦

・放射線安全部会関東支部委員会 支部委員 令和2年度～



## 他大学非常勤講師（講演・集中講義など）

2020 年度

- 山添 誠司 立教大学  
2020 年 10 月～2021 年 3 月  
特別講義 7 「X 線吸収分光法の基礎と応用/機能性材料の構造解析」
- 京都大学  
2021 年 1 月 21 日～2021 年 1 月 22 日  
集中講義 「X 線吸収分光法を用いた機能性材料の構造・機能解明」
- 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
- 三澤 健太郎 早稲田大学  
後期  
大気環境計測論
- 芝本 幸平 中央大学 工学部応用化学科 後楽園キャンパス  
前期(2020 年度はオンライン)  
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(2020 年度はオンライン)  
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 (コロナのためオンライン)  
2020年4月、10月  
最近の遺伝子生命工学

阿部 穰里 東京農工大学  
前期  
化学基礎

**講演会・研究会等での講義・講演 2020年度**

- 山添 誠司 日本セラミックス協会第33回秋季シンポジウム  
XAFSによる機能性材料の局所構造解析 (招待講演)  
2020.9, オンライン
- 第132回フロンティア材料研究所講演会  
金属酸化物クラスターによる材料合成・触媒開発 (招待講演)  
2020.12, オンライン
- 京都大学分子工学特論第三  
金属・金属酸化物クラスターの触媒作用 (招待講演)  
2021.1, オンライン
- 第58回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ  
HERFD-XASによる配位子保護金クラスターの電子状態解析 (招待講演)  
2021.3, オンライン
- 廣田 耕志 都立科学技術高校  
ゲノム編集技術を用いた医科学研究の最前線  
2021年3月24日
- 波田 雅彦 IQCE量子化学探索講演会2020 「量子化学で探る化学の最先端」  
NMR化学シフトの精密計算と電子EDM探査を目指した相対論的量子化学計算  
2020年11月2日 (オンライン)
- 中谷 直輝 第10回量子化学スクール  
電子相関とpost-HF法  
2020年12月1・2日 (オンライン)
- 好村 滋行 アクティブマター研究会2021  
Non-reciprocity in active matter  
2021年1月22・23日(オンライン)

- 久富木 志郎 2020 年度オンライン施策提案発表会  
家庭ごみ焼却スラグを原料とした環境浄化触媒の開発  
2021 年 1 月(動画配信による)
- 吉川 聡一 第 127 回触媒討論会 (オンライン)  
超強塩基性を示す金属酸化物クラスターによる CO<sub>2</sub> の活性  
2021 年 3 月 16 日
- 次世代 ESICB セミナー2021-1 (オンライン)  
In situ/オペランド分光を利用した高選択 CO<sub>2</sub> 変換の活性点設計  
2021 年 3 月 26 日
- 池谷 鉄兵 第 58 回日本生物物理学会 最先端計測技術で拓く「生命金属科学」の新たな  
フロンティア  
複数の異なる NMR データの統合解析によるタンパク質 multi-state 立体構造  
解析
- 阿部 穰里 2020 年度日本地球化学会第 67 回年会  
微生物によるウラン還元同位体効果の理論的考察  
2020 年 11 月 12 日~26 日 (オンライン)
- 第 18 回同位体化学研究会  
化学反応経路中のウラン同位体効果に関する理論的研究  
2021 年 3 月 12 日 (オンライン)
- 秋山 和彦 第 64 回放射化学討論会 (オンライン)  
プロメチウムを含む二金属内包フラーレンの性質  
2020 年 9 月 9 日~9 月 11 日
- 第 64 回放射化学討論会 (オンライン)  
光量子放射化法による家庭ごみ焼却スラグの組成分析 2  
2020 年 9 月 9 日~9 月 11 日
- 第 64 回放射化学討論会 (オンライン)  
家庭ごみ焼却スラグ中の有価金属の組成変動と分離  
2020 年 9 月 9 日~9 月 11 日

ELPH Symposium 2021 (宮城・オンライン)

家庭ごみ焼却スラグに含まれる有価金属元素回収の試み

2021年3月5日

非常勤講師（集中講義など） 2020年度

有機構造生物化学

伊藤拓宏・理化学研究所 生命機能科学研究センター・チームリーダー  
後期  
化学特別講義 I 「タンパク質翻訳機構の構造基盤」

有機化学

平野 寛・大阪産業技術研究所  
2021年1月21・22日  
集中講義、講演会

理論・計算化学

江原 正博 分子科学研究所・計算科学研究センター長、教授  
2020年12月16・17日  
大学院集中講義 物理化学特別講義 I  
「量子化学の基礎と応用：物質科学・材料科学への展開」

藤崎 弘士 日本医科大学・教授  
後期  
物理化学特別講義 I 「生体分子ダイナミクス入門」

## 2020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

歸家令果

田岡万悟

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、2020年度には以下の(1)大学院生の海外派遣支援、および(2)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試みた。

### (1) 大学院生の国際化:

2020年度の大学院生の国際化支援活動は、新型コロナウイルス感染症の世界的流行の影響を大きく受けることとなった。大学院生の海外派遣事業、国内派遣事業、研修事業について2回に分けて募集を行ったが、海外渡航や国内移動が制限された状況の中であったため、どの応募件数も0件であった。また、2020年度前半は、新型コロナウイルスの感染拡大によって大半の対面方式の学会が中止され、大学院生の研究発表の機会が失われることとなった。2020年度半ばくらいから、多くの学会が対面方式からオンライン方式へと転換されたことを踏まえ、オンライン学会への参加支援事業を新たに開始した。はじめに、オンライン学会参加支援制度の募集要綱を策定し、2回にわたって募集を行ったところ、いずれも応募件数は0件であった。学生の負担を軽減すべく、応募書類や報告書の見直しを実施して3回目の募集を行ったが、大学院生からの応募は0件であった。

### (2) 留学体験学生との懇談会の準備:

本学科で留学体験をした学生2名(修士1年)に演者として懇談会への協力を要請した。両者とも新型コロナウイルスの感染拡大によって就職活動の予定が立たないために、次年度就職活動終了後であれば参加可能との内諾を得た。こうした状況のため年度内に懇談会をもうけることができなかった。

## 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
- 3、ポルフィリン保護—金微粒子の合成と機能開発

### I. 原著論文

- 1 Functionalization of Bipyrenol: Potential Precursors for Advanced Chiral Molecules  
Umme Aiman Liza, Ken-ichi Sugiura  
Synthesis 52(22) 3452 - 3460 2020年 査読有り
- 2 [2.2]Paracyclophane-Based Chiral Platforms for Circularly Polarized Luminescence Fluorophores and Their Chiroptical Properties: Past and Future  
Ken-ichi Sugiura  
Frontiers in Chemistry 8 2296 - 2646 2020年 査読有り
- 3 Synthesis of Porphyrinquinone and Doubly - Fused Diporphyrin Quinone Through Oxidation of Diarylporphyrins Using a Hypervalent Iodine Compound  
Ken - ichi Yamashita, Daisuke Hirano, Keisuke Fujimaki, Ken - ichi Sugiura  
Chemistry - An Asian Journal 15(19) 3037 - 3043 2020年 査読有り
- 4 Metal complexes of 5,15-porphyrinquinones: Systematic study of crystal structure, electronic structure, and Lewis acidity  
Ken-ichi Yamashita, Daisuke Hirano, Ken-ichi Sugiura  
European Journal of Inorganic Chemistry 3507 - 3516 2020年 査読有り
- 5 Crystal Structure Refinement of 1,4,5,8-Tetrabromonaphthalene: A Twisted Chiral Naphthalene Induced by Steric Repulsion  
Md Awlad HOSSAIN, Kazunori HIRABAYASHI, Tohru NISHINAGA, Toshio SHIMIZU, Ken-ichi SUGIURA  
X-ray Structure Analysis Online 35 - 37 2020年 査読有り

- 6 Preparation, Spectroscopic Characterization and Theoretical Study of a Three-Dimensional Conjugated 70  $\pi$ -Electron Thiophene 6-mer Radical Cation  $\pi$ -Dimer  
Toshihiro FUJIWARA, Atsuya MURANAKA, Tohru NISHINAGA, Shinobu AOYAGI, Nagao KOBAYASHI, Masanobu UCHIYAMA, Hiroyuki OTANI, Masahiko IYODA  
J. Am. Chem. Soc. 142, 5933–5937 2020年 査読有り
- 7 Selenacalix[4]selenophene: Synthesis, Structure, and Gel Formation of Cyclic Selenoether of Selenophene  
Masashi HASEGAWA, Shiori HAGA, Tohru NISHINAGA, Yasuhiro MAZAKI  
Org. Lett., 22, 3755–3758 2020年

II. 著書、総説等  
なし

III. 学会発表、講演等

- 1 ジナフトフランを基本骨格として用いた新規蛍光色素の合成研究  
本多理沙, 平林一徳, 西長亨, 清水敏夫, 杉浦健一  
第117回有機合成シンポジウム2020年 2020年10月29日
- 2 1,8-ビス[(2-ドデシルアミノトロポン-5-イル)エチニル]-10-ドデシルアントラセン環状二核錯体の合成と酸化挙動  
山田 大雅・松原 康太・西長 亨・伊與田 正彦・大谷 裕之  
日本化学会 第101春季年会 (2021) 2021年3月19日

## 環境・地球化学研究室

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  $\mu\text{m}$  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<sub>2.5</sub> 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。当研究室では、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。当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。オンラインの化学組成分析とオフラインの電子顕微鏡解析と組み合わせることにより、アジア大陸から輸送される汚染空気塊中に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。また、汚染空気が海洋境界層の上を輸送される過程において新粒子生成により高濃度のナノ粒子が生成し、それらが雲凝結核 (CCN) の大きさにまで成長しう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、化石燃料の燃焼に伴うナノ粒子の排出が重要であるが、大気中におけるナノ粒子の質量濃度は極微量であり、またブラウン拡散に伴う粒子損失も大きいことから、その化学組成をオンラインで分析できる方法は確立されていない。当研究室では、低圧インパクトを用いて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。さらに、ナノ粒子分析計の校正に用いるための粒子発生技術の探索、およびその解釈のための理論モデル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新規開発

硫酸塩と有機物は微小エアロゾルの主成分であり、グローバルな対流圏に普遍的に存在する。現在、硫酸塩・有機エアロゾルのオンライン分析法として、熱脱離型エアロゾル質量分析計が広く用いられている。しかしながら、従来法では硫酸塩・有機エアロゾルの化学種のうち難揮発性成分 (分解温度 400°C 以上) は効率的に測ることができないため、それらの全体像を正しく捉えられていない可能性がある。当研究室では、難揮発性成分を含む硫酸塩・有機エアロゾル濃度を揮発性に依じてオンラインで分類定量できる方法の開発を行っている。グラフィイト粒子捕集体と炭酸ガスレーザーを組み合わせた加熱機構を開発し、加熱時間 30 秒で 1000°C 程度までの昇温を可能にした。この装置により、従来オンライン測定が困難であった難揮発性硫酸塩 ( $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{K}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{MgSO}_4$ ) の定量が可能であることを示した。

#### (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の環境影響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。離陸時の航空機排気に含まれる不揮発性粒子 (煤) の数濃度粒径分布の特徴を解析し、先行研究の報告に比べて粒径 10 nm 以下の寄与が大きいことを明らかにした。また、航空機排気の揮発性粒子として重要であるジェットエンジンオイル由来のナノ粒子の熱化学特性の評価にも取り組んでいる。

#### (5) 光散乱および蛍光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。また、蛍光強度の粒径依存性の評価を行った。今後は散乱光および蛍光を利用した定量分析法の開発も進める。

### I. 原著論文

1. Saitoh, K., A. Fushimi, K. Sera, and N. Takegawa, Quantification of major and trace elements contained in aircraft JET A-1 fuel by PIXE analysis, *International Journal of PIXE*, in press.
2. Shibamoto, K., D. Furuya, and T. Fujita, Ablation controlled laser desorption/ionization mass spectrometry by using improved transmission geometry, *Chemical Physics Letters*, 738, 136892, 2020.
3. Sun, C., K. Adachi, K. Misawa, H. C. Cheung, C. C.-K. Chou, and N. Takegawa, Mixing state of black carbon particles in Asian outflow observed at a remote site in Taiwan in the spring of 2017, *J. Geophys. Res. Atmos.*, 125, e2020JD032526, 2020.
4. Takegawa, N., T. Seto, N. Moteki, M. Koike, N. Oshima, K. Adachi, K. Kita, A. Takami, and Y. Kondo, Enhanced new particle formation above the marine boundary layer over the Yellow Sea: Potential impacts on cloud condensation nuclei, *J. Geophys. Res. Atmos.*, 125, e2019JD031448, 2020.

### II. 著書、総説等

1. 竹川 暢之, エアロゾルと飛沫感染・空気感染, *エアロゾル研究*, 36, 65-74, 2021.

### III. 学会発表、講演等

1. Takegawa, N., T. Seto, N. Moteki, M. Koike, N. Oshima, K. Adachi, K. Kita, A. Takami, and Y. Kondo, Enhanced new particle formation above the marine boundary layer over the Yellow Sea: Potential impacts on cloud condensation nuclei, *JpGU-AGU Joint Meeting 2020*, July 12-16, 2020 (virtual).

2. Kobayashi, Y., Y. Ide, and N. Takegawa, Development of a novel particle mass spectrometer for online measurements of refractory sulfate aerosols, JpGU-AGU Joint Meeting 2020, July 12-16, 2020 (virtual).
3. Misawa, K., Y. Fujitani, A. Fushimi, Y. Murashima, H. Sakurai, and N. Takegawa, Estimation of effective particle mass emission indices from in-use commercial aircraft based on field observations, 38th American Association for Aerosol Research Annual Conference, October 5-9, 2020 (virtual).
4. 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, 航空機排ガス中の不揮発性ナノ粒子の粒径分布, 第25回大気化学討論会 2020年11月12日 (オンライン開催).

#### 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。

### <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、ブレンステッド塩基点とルイス塩基点が異なること、水存在中でもルイス塩基点として機能することを見出しており、クラスター化による特異な塩基性が明らかになりつつある。

### <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。本年度は担持金属クラスターの水素化触媒作用に対する担体効果を検討し、塩基性担体にすることで担持金属クラスターの電子密度が減少し、水素化触媒作用が向上することを明らかにした。

### <新しい二酸化炭素固定化回収技術の開発>

地球温暖化現象を解決するため、大気中や排気ガス中の二酸化炭素の回収・再利用技術の開発が急務である。当研究室では、相の違いを利用して、効率良く二酸化炭素を吸収・回収できる新しいシステムの開発や材料開発を進めている。本年度は、二酸化炭素と室温で反応することで固体を生成する化合物の探索とその性能を評価した。ある官能基をもつ化合物が特異的に二酸化炭素を吸収し、固体を生成すること、一般的に二酸化炭素固定化回収に用いられているモノエタノールアミンと比べ、倍以上の吸収性能を示すことを見出した。また、吸収した二酸化炭素は60℃で回収できることも見出しており、新しい二酸化炭素固定化・回収技術となると考えている。

### <振動エネルギーを利用した新しい触媒反応系の開発>

未使用エネルギーの1つに振動エネルギーがあり、その有効利用技術開発が望まれている。当研究室では、圧電材料を利用して振動エネルギーを触媒反応に応用する新しい反応系の開発を進めている。本年度は、振動エネルギーを加えることで水素酸化反応が進行することを見出し、振動触媒反応系の構築に成功した。

### <福島原発事故により環境中に放出された放射性核種に関する研究>

福島原発事故により大量の放射性核種が環境中に放出された。多くの自治体、研究者により様々の環境試料中のこれら放射性核種濃度が報告されているが、事故当時の特に福島県内の大気中放射性核種濃度は測定されなかった。我々は、自治体が運用している自動大気浮遊粒子(SPM)測定装置に着目し、事故当時のSPMが捕集されたる紙の分析を続けている。 $^{134}\text{Cs}$  と  $^{137}\text{Cs}$  をガンマ線スペクトロメトリーでルーチンのように定量を行なった。原発から約

400 km の遠方に輸送された放射性プルームの動態を明らかにした。

#### <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  $2.5\mu\text{m}$  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応用>

光量子放射化分析法(PAA)は、中性子放射化分析法(INAA)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われることが多いが、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て単一コンパレータ法を PAA に適用した。本法と NAA を用いて日本各地のしじみ貝殻の元素組成を求めて比較した。

#### <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。現在鉄隕石の化学的特徴を詳細に調べている。鉄隕石は、主に鉄ニッケル合金からなる隕石であり、ほとんどの鉄隕石は小さな惑星の核であると考えられている。これまでの研究では、NAA が用いられてきたが、より簡単に鉄隕石の元素組成を求めることができるように、レーザーアブレーション誘導結合プラズマ質量分析法を用いた分析方法の開発を行った。NAA では定量の難しい元素を含め 19 元素同時に定量することが可能になった。開発した分析方法を用いて、南極大陸で発見された鉄隕石の化学的分類を行った。

#### I. 原著論文

01. R. Takahata, S. Yamazoe, Y. Maehara, K. Yamazaki, S. Takano, W. Kurashige, Y. Negishi, K. Gohara, T. Tsukuda  
"Electron Microscopic Observation of an Icosahedral  $\text{Au}_{13}$  Core in  $\text{Au}_{25}(\text{SePh})_{18}$  and Reversible Isomerization between Icosahedral and Face-Centered Cubic Cores in  $\text{Au}_{144}(\text{SC}_2\text{H}_4\text{Ph})_{60}$ "  
*J. Phys. Chem. C.*, **124**, 6907-6912 (2020).
02. Y. Nakaya, J. Hirayama, S. Yamazoe, K. Shimizu, S. Furukawa  
"Single-atom Pt in intermetallics as an ultrastable and selective catalyst for propane dehydrogenation"  
*Nat. Commun.*, **11**, 2838 (2020).

03. S. Hayashi, S. Yamazoe, T. Tsukuda  
 "Base Catalytic Activity of  $[\text{Nb}_{10}\text{O}_{28}]^{6-}$ : Effect of Counter Cation"  
*J. Phys. Chem. C*, **124**, 10975–10980 (2020).
04. S. Fujita, S. Yamaguchi, S. Yamazoe, J. Yamasaki, T. Mizugakia, T. Mitsudome  
 "Nickel Phosphide Nanoalloy Catalyst for Selective Deoxygenation of Sulfoxides to Sulfides under an Ambient  $\text{H}_2$  Pressure"  
*Org. Biomol. Chem.*, **18**, 8827–8833 (2020).
05. T. Nishino, M. Saruyama, Z. Li, Y. Nagatsuma, M. Nakabayashi, N. Shibata, T. Yamada, R. Takahata, S. Yamazoe, T. Hisatomi, K. Domen, T. Teranishi  
 "Self-activated Rh-Zr mixed oxide as a nonhazardous cocatalyst for photocatalytic hydrogen evolution"  
*Chem. Sci.*, **11**, 6862–6867 (2020).
06. K. Koide, J. Yi, M. Kuboki, S. Yamazoe, N. Nakatani, K. Nomura  
 "Synthesis and Structural Analysis of Four Coordinate (Arylimido)niobium(V) Dimethyl Complexes Containing Phenoxide Ligand: MAO-Free Ethylene Polymerization by the Cationic Nb(V)-Methyl Complex"  
*Organometallics*, **39**, 3742–3758 (2020).
07. Y. Nakaya, M. Miyazaki, S. Yamazoe, K. Shimizu, S. Furukawa  
 "Active, Selective, and Durable Catalyst for Alkane Dehydrogenation Based on a Well-Designed Trimetallic Alloy"  
*ACS Catal.*, **10**, 5163–5172 (2020).
08. 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.*, **59**, 7076–7082 (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  
 " $\gamma$ -Alumina-supported  $\text{Pt}_{17}$  cluster: controlled loading, geometrical structure, and size-specific catalytic activity for carbon monoxide and propylene oxidation"  
*Nanoscale Advances*, **2**, 669 (2020).
10. K. Kimura, K. Yamamoto, K. Hayashi, S. Tsutsui, N. Happo, S. Yamazoe, H. Miyazaki, S. Nakagami, J. R. Stellanor, S. Hosokawa, T. Matsushita, H. Tajiri, A. K. R. Ang Y. Nishino  
 "Local structure and atomic dynamics in  $\text{Fe}_2\text{VAl}$  Heusler-type thermoelectric material: The effect of heavy element doping"  
*Phys. Rev. B*, **101**, 024302 (2020).
11. 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).
12. M. Ishida, S. Kikkawa, K. Hori, K. Teramura, H. Asakura, S. Hosokawa, T. Tanaka  
"Effect of surface reforming via O<sub>3</sub> treatment on the electrochemical CO<sub>2</sub> reduction activity of a Ag cathode"  
*ACS Appl. Energy Matter.*, **13**, 6552 (2020).
13. S. Kikkawa, K. Teramura, H. Asakura, S. Hosokawa, T. Tanaka  
"Ni-Pt alloy nanoparticles with isolated Pt atoms and their cooperative neighboring Ni atoms for selective hydrogenation of CO<sub>2</sub> toward CH<sub>4</sub> evolution: in situ and transient Fourier transform infrared studies"  
*ACS Appl. Nano Matter.*, **3**, 9633 (2020).
14. 大浦泰嗣, 鶴田治雄, 海老原充, 大原利眞, 中島映至  
"浮遊粒子状物質自動測定機で使用されたテープろ紙を利用する大気中放射性セシウムの定量"  
*分析化学*, **69**, 1-9 (2020).
15. M. Takagi, T. Ohara, D. Goto, Y. Morino, J. Uchida, T. T. Sekiyama, S. F. Nakayama, M. Ebihara, Y. Oura, T. Nakajima, H. Tsuruta, Y. Moriguchi.  
"Reassessment of early <sup>131</sup>I inhalation doses by the Fukushima nuclear accident based on atmospheric <sup>137</sup>Cs and <sup>131</sup>I/<sup>137</sup>Cs observation data and multi-ensemble of atmospheric transport and deposition models"  
*J. Environ. Radioact.* **218**, 106233 (2020).
16. S. A. Latif, Y. Oura, M. Katada, I. M. Amirul, K. M. Uddin, I. M. Mehedi  
"Neutron-induced prompt gamma-ray analysis of standard reference materials of international atomic energy agency and tannery sediment of Bangladesh"  
*J. Technol. Sci. and Engineer.* **1**, 7-13 (2020).
17. M. Ebihara, K. Hayano, N. Shirai  
"Determination of trace rare earth elements in rock samples including meteorites by ICP-MS coupled with isotope dilution and comparison methods"  
*Anal. Chim. Acta.* **1101**, 81-89 (2020).
18. M. Ito, N. Tomioka, K. Uesugi, M. Uesugi, Y. Kodama, I. Sakurai, I. Okada, T. Ohigashi, H. Yuzawa, A. Yamaguchi, N. Imae, Y. Karouji, N. Shirai, T. Yada, M. Abe  
"The universal sample holders of microanalytical instruments of FIB, TEM, NanoSIMS, and STXM-NEXAFS for the coordinated analysis of extraterrestrial materials"  
*Earth Planets Space.* **72**, 133 (2020).

19. N. Shirai, Y. Karouji, K. Kumagai, M. Uesugi, K. Hirahara, M. Ito, N. Tomioka, K. Uesugi, A. Yamaguchi, N. Imae, T. Ohigashi, T. Yada, M. Abe  
 "The effects of possible contamination by sample holders on samples to be returned by Hayabusa2"  
*Meteorit. Planet. Sci.* **55**, 1665-1680 (2020).
20. N. Shirai, T. Hozumi, Y. Toh, M. Ebihara  
 "Comparison of PGAA and wet chemical analysis for determining major elements contents in eucritic meteorites"  
*J. Radioanal. Nucl. Chem.* **325**, 949-957 (2020).
21. M. Uesugi, K. Hirahara, K. Uesugi, A. Takeuchi, Y. Karouji, N. Shirai, M. Ito, N. Tomioka, T. Ohigashi, A. Yamaguchi, N. Imae, T. Yada, M. Abe  
 "Development of a sample holder for synchrotron radiation-based computed tomography and diffraction analysis of extraterrestrial materials"  
*Rev. Sci. Instrum.* **91**, 03517 (2019).

## II. 著書、総説等

なし

## III. 学会発表、講演等

01. 平山純, 柴田香菜子, 塚田実緒, 藤木裕宇, 山添誠司  
 「ニオブ酸化物クラスターアルカリ塩の塩基触媒特性評価」  
 ナノ学会第18回大会 (2020.5, 発表成立)
02. 塚田実緒, 平山純, 山本隆文, 山添誠司, 開催中止  
 「Ta<sub>6-x</sub>Nb<sub>x</sub>O<sub>19</sub>】<sub>8</sub>-の合成とその塩基触媒特性」  
 ナノ学会第18回大会 (2020.5, 発表成立)
03. A. Yamaguchi, N. Shirai, J.-A. Barrat  
 「Petrology of ferroan diogenites and cumulate eucrites and their genetic relationship」  
 日本地球惑星科学連合2020年大会 (2020.5, オンライン)
04. 松山知樹, 平山純, 山添誠司  
 「低周波振動をエネルギー源とする“振動触媒”反応系の開発」  
 第126回触媒討論会 (2020.9, オンライン)
05. 平山純, 柴田香菜子, 塚田実緒, 藤木裕宇, 山添誠司  
 「ニオブ酸化物クラスターアルカリ塩の塩基触媒作用」  
 第126回触媒討論会 (2020.9, オンライン)
06. 藤木裕宇, 塚田実緒, 柴田香奈子, 平山純, 山添誠司  
 「金属酸化物クラスター触媒の塩基強度評価」

第 126 回触媒討論会 (2020. 9, オンライン)

07. 遊澤一輝, 平山純, 根岸雄一, 佃達哉, 山添誠司  
「担持 Au25 クラスター触媒の水素化反応における担体効果」  
第 126 回触媒討論会 (2020. 9, オンライン)
08. 塚田実緒, 平山純, 山本隆文, 山添誠司  
「[Ta<sub>6-x</sub>Nb<sub>x</sub>O<sub>19</sub>]<sub>8-</sub>の塩基触媒作用に対する Nb 置換効果」  
第 126 回触媒討論会 (2020. 9, オンライン)
09. 松山知樹, 平山純, Sakiat Hossain, 藏重亘, 朝倉博行, 河村直己, 根岸雄一, 中谷直輝, 畑田圭介, 太田薔子, 山添誠司  
「HERFD-XAS による配位子保護金クラスターの電子状態解明」  
第 23 回 XAFS 討論会 (2020. 9, オンライン)
10. 山添誠司  
「XAFS による機能性材料の局所構造解析」  
日本セラミックス協会第 33 回秋季シンポジウム (2020. 9, オンライン)
11. 鶴田治雄, 大浦泰嗣, 海老原充, 森口祐一, 大原利眞, 中島映至  
「SPM テープろ紙の分析による福島原発事故後初期における放射性物質の関東地方から中部地方への輸送過程の解明」  
第61回大気環境学会年会 (2020. 9, オンライン)
12. 鶴田治雄, 大浦泰嗣, 海老原充, 森口祐一, 大原利眞, 中島映至  
「SPM テープろ紙の分析からわかった事故後初期の大気中放射性物質の時空間分布」  
第61回大気環境学会年会放射性物質動態分科会 (2020. 9, オンライン)
13. 大原利眞, 高木麻衣, 森口祐一, 森野悠, 五藤大輔, 大浦泰嗣, 海老原充, 鶴田治雄, 中島映至  
「大気輸送沈着モデルを用いた事故後初期の甲状腺被ばく線量推計と課題」  
第61回大気環境学会年会放射性物質動態分科会 (2020. 9, オンライン)
14. Md. S. Reza and Y. Oura  
「Activation analysis of shells of Japanese basket clams (shijimi)」  
日本放射化学会第 64 回討論会 (2020. 9, オンライン)
15. 阿部善也, 小野崎晴佳, 石川真帆, 中井泉, 北和之, 五十嵐康人, 大浦泰嗣, 鶴田治雄, 森口祐一  
「福島第一原発事故由来の放射性Cs微粒子の蛍光特性」  
日本放射化学会第 64 回討論会 (2020. 9, オンライン)
16. 伊藤元雄, 富岡尚敬, 上杉健太郎, 上相真之, 児玉優, 桜井郁也, 岡田育夫, 大東琢治, 湯澤湯勇人, 山口亮, 今柴直也, 唐牛譲, 白井直樹, 矢田達, 安部正真

「The universal sample holders of microanalytical instruments of FIB, TEM, NanoSIMS, and STXM-NEXAFS for the coordinated analysis of extraterrestrial materials」

2020年度日本地球化学会第67回オンライン年会 (2020.9, オンライン)

17. 山口亮, J.-A. Barrat, 白井直樹  
「ユレイライトの熱史と衝突史について」  
日本鉱物科学会2020年オンライン年会 (2020.9, オンライン)
18. Mitsuru Ebihara, Naoki Shirai, Jin Kuwayama, Yosuke Toh  
「High sensitivity determination of iridium contents in ultra-basic rocks by INAA using multiple Ge detector system」  
4th Conference on Nuclear Analytical Techniques (2020.11, オンライン)
19. 山添誠司  
「金属酸化物クラスターによる材料合成・触媒開発」  
第132回フロンティア材料研究所講演会 (2020.12, オンライン)
20. Naoki Shirai, Steven Goderis, Mehmet Yesiltas, Hamed Pourkhorsandi, Manu Poudalet, Martian Leitl, Akirai Yamaguchi, Vinciane Debaile, Philippe Clayes  
「The BELARE 2019-2020 meteorite recovery expedition on the Nansen Ice Field, East Antarctica」  
The 11th Symposium on Polar Science (2020.12, オンライン)
21. Akira Yamaguchi, J.-A. Barrat, Naoki Shirai  
「Shock and thermal history of ureilites and implications of Zn depletion」  
The 11th Symposium on Polar Science (2020.12, オンライン)
22. Motoo Ito, Akira Yamaguchi, Naoya Imae, Makoto Kimura, Naotaka Tomioka, Masayuki Uesugi, Kentaro Uesugi, Takuji Ohigashi, Yuzuru Karouji, Yu Kodama, Hayato Yuzawa, Kaori Hirahara, Ikuya Sakurai, Ikuo Okada, Toru Yada, Masanao Abe  
「Bulk analysis of a small fragment of the Hayabusa2 returned sample: A plan proposed by Phase2 Kochi」  
The 11th Symposium on Polar Science (2020.12, オンライン)
23. 山添誠司  
「金属・金属酸化物クラスターの触媒作用」  
分子工学特論第三 (2021.1, オンライン, 特別講演会)
24. 吉川聡一  
「In situ/オペランド分光を利用した高選択CO<sub>2</sub>変換の活性点設計」  
次世代ESICBセミナー2021-1 (2021.3, オンライン)
25. 山添誠司  
「HERFD-XASによる配位子保護金クラスターの電子状態解析」  
第58回SPRING-8先端利用技術ワークショップ (2021.3, オンライン)

26. Chudatemiya Vorakit, 平山純, 吉川聡一, 山添誠司  
「CO<sub>2</sub> fixation using metal oxide cluster catalysts」  
第127回触媒討論会 (2021.3, オンライン)
27. 松山知樹, 宇野太喜, 平山純, 吉川聡一, 山添誠司  
「200 Hz 以下の振動を利用した振動触媒反応」  
第127回触媒討論会 (2021.3, オンライン)
28. 塚田実緒, 吉川聡一, 澁澤一輝, 平山純, 中谷直輝, 山本隆文, 山添誠司  
「アニオン性金属酸化物クラスター[Ta<sub>6-x</sub>Nb<sub>x</sub>O<sub>19</sub>]<sub>8-</sub>の塩基性評価」  
第127回触媒討論会 (2021.3, オンライン)
29. 吉川聡一, 藤木裕宇, 塚田実緒, 澁澤一輝, 平山純, 山添誠司  
「超強塩基性を示す金属酸化物クラスターによるCO<sub>2</sub>の活性化」  
第127回触媒討論会 (2021.3, オンライン)
30. H. Tsuruta, Y. Oura, M. Ebihara, T. Ohara, Y. Moriguchi, T. Nakajima  
「Retrieval of hourly atmospheric radiocesium in the early period of the TEPCO Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident by analyzing used filter-tapes of operational air pollution monitoring stations.」  
International Workshop on "Fukushima Dai-ichi and the oceans-10 years of study and insights (2021.3, オンライン)
31. 鶴田治雄, 大浦泰嗣, 海老原充, 大原利眞, 森口祐一, 山澤弘実, 中島映至  
「東電福島第一原子力発電所事故後初期(2011年3月12-31日)の放射性セシウムのブルームの全体像」  
第22回環境放射能研究会 (2021.3, オンライン)
32. Tsuruta, H., Y. Oura, M. Ebihara, T. Ohara, Y. Moriguchi, H. Yamazawa, T. Nakajima  
「Overview of these three years' analysis of hourly atmospheric radiocesium collected on used SPM filter-tapes in the early period of the Fukushima accident on March 11, 2011」  
International Workshop on " Model Intercomparison Project for Better Understandings of Present Status of Meso-scale Atmospheric Transport Models" (2021.3, オンライン)

## 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 線結晶解析や電子顕微鏡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 法はいつその手法的改良が希求されている。当研究室では、これらの溶液 NMR 法のフロンティア領域に挑戦し、21 世紀の生命科学研究、環境研究、あるいは高分子化合物の物性研究に貢献できる研究を進めていく。

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

以下に主な研究テーマを記す。

### （1）NMR を用いた高分子量蛋白質、蛋白質複合体の解析法の研究

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

### （2）in-cell NMR を用いた蛋白質の細胞内動態の解析

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

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

### (3) 動的な生体高分子複合体の構造解析

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

### (4) 蛋白質立体構造決定の自動化手法と構造最適化手法の開発

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

## I. 原著論文

01. Kohji Murase, Yoshitaka Moriwaki, Tomoyuki Mori, Xiao Liu, Chiho Masaka, Yoshinobu Takada, Ryoko Maesaki, Masaki Mishima, Sota Fujii, Yoshinori Hirano, Zen Kawabe, Koji Nagata, Tohru Terada, Go Suzuki, Masao Watanabe, Kentaro Shimizu, Toshio Hakoshima & Seiji Takayama, “Mechanism of self/nonself-discrimination in Brassica self-incompatibility” *Nat. Commun.* 11, 4916 (2020)  
DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18698-w>

## II. 著書, 総説等

01. T. Nagae, M. Unno, T. Koizumi, Y. Miyanoiri, T. Fujisawa, K. Masui, T. Kamo, K. Wada, T. Eki, Y. Ito, Y. Hirose & M. Mishima “Structural basis of the protochromic green/red photocycle of the chromatic acclimation sensor RcaE” *bioRxiv* (2020).
02. 伊藤隆, 猪股晃介, 三島正規 & 池谷鉄兵 「第 7 章 方法論 第 8 節 溶液 NMR および in cell NMR による金属結合タンパク質の動態解析」生命金属ダイナミクス: 生体内における金属の挙動と制御 城 宜嗣、津本浩平 監修 (エヌ・ティー・エス出版) 2021 年

## III. 学会発表, 講演等

01. 池谷鉄兵 & 伊藤隆 「複数の異なる NMR データの統合解析によるタンパク質 multi-state 立体構造解析」第 58 回日本生物物理学会 最先端計測技術で拓く「生命金属科学」の新たなフロンティア, 2020 年 9 月 16 日 [オンライン開催]
02. Hiroki Nakajima, Taiki Koizumi, Masaki Uno & Masaki Mishima “Quantitative analysis of J value via hydrogen bonds”第 58 回日本生物物理学会 2020 年 9 月 16-18 日 [オンライン開催]
03. Taiki Koizumi, Takahiro Aizu, Takatoshi Nagae, Yuu Hirose & Masaki Mishima “Structural study of a GAF domain of photosensor protein from Cyanobacteria” 第 58 回日本生物物理学会 2020 年 9 月 16-18 日 [オンライン開催]
04. 三島正規 「NMR studies on the protonation state of cyanobacteriochrome」第 59 回 NMR 討論会, 2020 年 11 月 17 日, G メッセ群馬
05. 森岡太一, 岩橋晴香, 池谷鉄兵, 伊藤隆, 片山秀和, 降旗一夫, 永田宏次 & 鈴木道生 「アコヤガイ靱帯の石灰化に関わる有機物の機能・構造解析」第 15 回バイオミネラリゼーションワークショップ, 2020 年 11 月 13 日 [オンライン開催]
06. 鈴木拓巳, 田島佳寿, 川原裕之, 伊藤隆 & 三島正規 「Rab32 の NMR による解析」第 59 回 NMR 討論会, 2020 年 11 月 17-19 日, G メッセ
07. 小泉太貴, 会津貴大, 宮ノ入洋平, 伊藤隆, 広瀬侑 & 三島正規 「光受容タンパク質 GAF ドメインにおける発色団のプロトン化状態の解析」第 59 回 NMR 討論会, 2020 年 11 月 17-19 日, G メッセ群馬
08. 渡邊吏輝, プバティ マキシシ サイーシュ, 末元雄介, 木川隆則, 三島正規, 猪股晃介, 池谷鉄兵 & 伊藤隆 「NMR を用いたアダプター蛋白質 Drk の動態解析」第 59 回 NMR 討論会, 2020 年 11 月 17-19 日, G メッセ群馬
09. 中島弘稀, 若松馨, 伊藤隆 & 三島正規 「NDSB の添加によるユビキチン分子内の水素結合への影響」第 59 回 NMR 討論会, 2020 年 11 月 17-19 日, G メッセ群馬
10. 田端真彩子, 池谷鉄兵, 美川務, 川端庸平, 安藤考史, 館野桂太, 三島正規 & 伊藤隆 「PRE, PCS を用いたマルチドメイン蛋白質 Grb2 の立体構造解析」第 59 回 NMR 討論会, 2020 年 11 月 17-19 日, G メッセ群馬
11. Yutaka Ito, 29th International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Boston MA, USA, 2020 年 8 月 23-28 日 [2 年延期] (招待講演)



12. Yutaka Ito & Teppey Ikeya, “Solution NMR approaches to investigating protein behaviours under intracellular crowding environments” . The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2020, Honolulu, HA, USA, 2020年8月15-16日 [1年延期] (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、新しいバイオベース高分子機能材料の設計・創製、優れた光・電子機能を発現する新しい $\pi$ 共役系化合物の合成と特性解析に関する研究、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（医薬品や電子・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 $\pi$ 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、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、有機金属光触媒

### I. 原著論文

#### 01. Y. Sofue, K. Nomura, A. Inagaki

“On-demand hydrogen production from formic acid by light-active dinuclear iridium catalysts”  
*Chem. Commun.*, **56**, 4519-4522 (2020). Front Cover

#### 02. I. Izawa, K. Nomura

“(Arylimido)niobium(V)-alkylidenes, Nb(CHSiMe<sub>3</sub>)(NAr)[OC(CF<sub>3</sub>)<sub>3</sub>](PMe<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, that enable to proceed living metathesis polymerization of internal alkynes”  
*Macromolecules*, **53**, 5266-5279 (2020).

#### 03. T. Fujiwara, K. Nomura, A. Inagaki

- “Cu–Pd Dinuclear complexes with earth-abundant Cu photosensitizer: Synthesis and photopolymerization”  
*Organometallics*, **39**, 2464-2469 (2020). Cover article
04. K. Nomura, S. Chaimongkolkunasin  
 “Cis-Specific ring opening metathesis polymerisation (ROMP) of cyclic olefins by (pentafluorophenylimido)vanadium(V)-alkylidene,  $V(CHSiMe_3)(NC_6F_5)[OC(CF_3)_3](PMe_3)_2$ ”  
*Catal. Sci. Tech.*, **10**, 5840-5846 (2020). Inside back cover article
05. K. Nomura, P. Chaijaroen, M. M. Abdellatif  
 “Synthesis of bio-based long chain polyesters by acyclic diene metathesis (ADMET) polymerization and tandem hydrogenation, and depolymerization with ethylene”  
*ACS Omega*, **5**, 18301-18312 (2020).
06. Z. Sun, P. Unruean, H. Aoki, B. Kitiyanan, K. Nomura  
 “Phenoxide-modified half-titanocenes supported on star-shaped ROMP polymers as efficient catalyst precursors for ethylene copolymerization”  
*Organometallics*, **39**, 2998-3009 (2020). Front cover article (Editor invitation)
07. H. Harakawa, M. Okabe, K. Nomura  
 “Synthesis of cyclic olefin copolymers (COCs) by ethylene copolymerisations with cyclooctene, cycloheptene, and with tricyclo[6.2.1.0(2,7)]undeca-4-ene: Effect of cyclic monomer structures on thermal properties”  
*Polymer Chemistry*, **11**, 5590-5600 (2020). Backside cover article
08. S. Kitphaitun, Q. Yan, K. Nomura  
 “Effect of  $SiMe_3$ ,  $SiEt_3$  *para*-substituents for exhibiting high activity, introduction of hydroxy group in ethylene copolymerization catalyzed by phenoxide-modified half-titanocenes”  
*Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**, 23072-23076 (2020).
09. K. Koide, J. Yi, M. Kuboki, S. Yamazoe, N. Nakatani, K. Nomura  
 “Synthesis, structural analysis of four coordinate (arylimido)Niobium(V) dimethyl complexes containing phenoxide ligand: MAO-Free ethylene polymerization by the cationic Nb(V)-methyl complex”  
*Organometallics*, **39**, 3742-3758 (2020).
10. D. Le, C. Samart, J.-T. Lee, K. Nomura, S. Kongparakul, S. Kiatkamjornwong  
 “Norbornene-functionalized plant oils for bio-based thermoset films and binders of silicon-graphite composite electrodes”  
*ACS Omega*, **5**, 29678-29687 (2020).
11. M. Asano, T. Morita, T. Miwata, K. Nomura  
 “Observation of intramolecular interaction in fluorescent star-shaped polymers: Evidence for energy hopping between branch chains”  
*J. Phys. Chem. B*, **124**, 11510-11518 (2020).
12. H. Aoki, K. Nomura  
 “Synthesis of amorphous ethylene copolymers with 2-vinylnaphthalene, 4-vinylbiphenyl and 1-(4-vinylphenyl)naphthalene”

- Macromolecules*, **54**, 83-93 (2021).
13. A. Takahashi, M. Mishima, K. Nomura, A. Inagaki  
“Light-assisted catalytic hydrogenation of carbon dioxide at a low pressure by a dinuclear iridium polyhydride complex”  
*Organometallics*, **40**, 98-101 (2021).
  14. J. Yi, N. Nakatani, N. Tomotsu, K. Nomura, M. Hada  
“Theoretical study of reaction mechanism for half-titanocene-catalyzed styrene polymerization, ethylene polymerization, and styrene-ethylene copolymerization: Roles of the neutral Ti(III) and the cationic Ti(IV) species”  
*Organometallics*, **40**, 643-653 (2021).

## II. 著書、総説等

1. J. Yi, N. Nakatani, K. Nomura  
“Solution XANES and EXAFS analysis of active species of titanium, vanadium complex catalysts in ethylene polymerisation/dimerisation and syndiospecific styrene polymerisation”  
*Dalton Trans.*, **49**, 8008-8028 (2020). Perspective (Invited) Backside cover
2. K. Nomura  
“Vanadium catalysed olefin metathesis and related chemistry”  
*Vanadium Catalysis*, A. Pombeiro et al. (Eds.), RSC Publishing, 417-445 (2020). Invited
3. K. Dawood, K. Nomura  
“Recent developments in Z-selective olefin metathesis reactions by molybdenum, tungsten, ruthenium, and vanadium catalysts”  
*Adv. Synth. Catal.*, **363**, 1970-1997 (2021). Introduced as VIP (Very Important Paper), cover
4. 野村琴広  
“JPI 誌の活用を”  
ペトロテック, **44**, 73 (2021). 巻頭言

## 学会発表、講演等

1. P. Chaijaroen, M. M. Abdellatif, 野村琴広  
“Synthesis of bio-based long-chain polyesters by tandem acyclic diene metathesis (ADMET) polymerization and hydrogenation”  
高分子研究発表会（神戸）（神戸, 7月, 2020). 紙上開催
2. 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環状オレフィンの開環メタセシス重合”  
高分子研究発表会（神戸）（神戸, 7月, 2020). 紙上開催
3. K. Nomura  
“Synthesis of new bio-based functional polymers by efficient molecular catalysis: A survey of recent research”

Online seminar series in Bioenergy and Catalysis, Thammasat University (8 月, 2020). On-line seminar

4. 浅野素子, 森田宗嗣, 三輪田知宏, 野村琴広  
“三分岐発光性ポリマーにおける分子鎖間エネルギーホッピング”  
2020 年 web 光化学討論会 (9 月, 2020). Web 開催
5. 野村琴広  
“環状オレフィンや 2 置換アセチレンのリビング重合を可能とするバナジウム及びニオブ-アルキリデン錯体触媒”  
第 69 回高分子討論会 (盛岡, 9 月, 2020). Web 開催 依頼講演
6. 小出晃士, 野村琴広  
“フェノキシ配位子を有するイミド配位ニオブ錯体の合成・同定とエチレン重合”  
第 126 回触媒討論会 (浜松, 9 月, 2020). Web 開催
7. S. Kitphaitun, 野村琴広  
“非架橋ハーフチタノセン触媒による極性官能基含有エチレン共重合体の合成と精密グラフト化”  
第 126 回触媒討論会 (浜松, 9 月, 2020). Web 開催
8. 野村琴広, P. Chaijaroen, M. M. Abdellatif  
“非環式ジエンメタセシス重合とタンデム水素化反応によるバイオベースポリマーの精密合成”  
第 126 回触媒討論会 (浜松, 9 月, 2020). Web 開催
9. 大山 遼, 野村琴広, 稲垣昭子  
“バイクロモフォア Ir シクロメタレート光増感ユニットとして含む Pd 錯体の反応制御および様々な二核錯体への展開”  
第 70 回錯体化学討論会 (茨城大学, 9 月, 2020). Web 開催
10. 高橋あすか, 野村琴広, 稲垣昭子  
“ジホスフィン配位子を光吸収ユニットとした二核イリジウムヒドリド錯体による触媒的二酸化炭素水素化反応”  
第 70 回錯体化学討論会 (茨城大学, 9 月, 2020). Web 開催
11. K. Nomura, P. Chaijaroen, M. Kojima, N. W. B. Awang  
“Synthesis of Bio-Based Polyesters by tandem olefin metathesis polymerization and hydrogenation”  
Virtual Symposium on Sciences 2020 (VSoS) (11 月, 2020). On-line symposium
12. S. Kitphaitun, 野村琴広  
“Effect of para-substituent in ethylene copolymerizations catalyzed by phenoxy-modified half-titanocene catalysts”  
第 50 回石油・石油化学討論会 (熊本, 11 月, 2020).
13. K. Chatchaipaboon, 伊澤 樹, 野村琴広  
“Synthesis of (arylimido)niobium(V)-alkylidene complexes as olefin metathesis catalysts”  
第 50 回石油・石油化学討論会 (熊本, 11 月, 2020).
14. S. Mekcham, S. Chaimongkolkunasin, 野村琴広

“Ring-opening metathesis polymerization of cyclic olefins by (arylimido)vanadium(V)-alkylidene catalysts”

第 50 回石油・石油化学討論会 (熊本, 11 月, 2020).

15. 岡部正暉, 原川仁志, 野村琴広

“ハーフチタノセン触媒による環状オレフィン共重合体の合成と特性解析”

第 50 回石油・石油化学討論会 (熊本, 11 月, 2020).

16. 小嶋美華, P. Chaijaroen, 松本佑一, 野村琴広

“非環式ジエンメタセシス重合によるバイオベースポリマーの合成と特性解析”

第 50 回石油・石油化学討論会 (熊本, 11 月, 2020).

17. 吉池大河, 野村琴広, 稲垣昭子

“BINAP を含む二核イリジウムヒドリド錯体上における光を駆動力とするアルコール類との反応”

日本化学会 第 101 回春季年会 (オンライン, 3 月, 2021)

18. 上田一哉, 野村琴広, 稲垣昭子

“可視光増感性ジイミン銅ユニットを含む二核錯体の合成・物性および反応性”

日本化学会 第 101 回春季年会 (オンライン, 3 月, 2021)

## 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、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  $\epsilon$  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  $\epsilon$  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  $\epsilon$  の校正活性を変異で潰した *POLE<sup>exo</sup>*-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<sup>exo</sup>*-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  $\epsilon$  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見出した (Senmatsu *et al.* 2019)。また、この新規エレメントによる *mlonRNA* 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見出し、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 (Senmatsu *et al.* 2021)。

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た。コロナウイルス感染症拡大による渡航制限のため、2020 年度に予定していた 4 件の学生・教員派



遣は全て中止した。

### 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た。本年度は擬ウリジン解析やメチル化ヌクレオチド解析の新しい方法を考案した。これらの方法をユージェナと耐熱性細菌のリボソーム RNA やヒトの核内小 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。

### (3) I. 原著論文

1. Senmatsu S, Asada R, Oda A, Hoffman CS, Ohta K, Hirota K. (2021) lncRNA transcription induces meiotic recombination through chromatin remodelling in fission yeast. *Commun Biol.* 4(1):295.
2. Kojima K, Ooka M, Abe T, Hirota K. (2021) Pold4, the fourth subunit of replicative polymerase  $\delta$ , suppresses gene conversion in the immunoglobulin-variable gene in avian DT40 cells. *DNA Repair (Amst)*. 2021 Apr;100:103056.
3. Shibata T, Iwasaki W, Hirota K. (2020) The intrinsic ability of double-stranded DNA to carry out D-loop and R-loop formation *Comput Struct Biotechnol J.* 18:3350-3360.
4. Asada R, Senmatsu S, Montpetit B, Hirota K. (2020) Topoisomerase activity is linked to altered nucleosome positioning and transcriptional regulation in the fission yeast *fbp1* gene. *PLoS One.* 15(11):e0242348.
5. Senmatsu S, Hirota K. (2020) Roles of lncRNA transcription as a novel regulator of chromosomal function. *Genes Genet Syst.* 95(5):213-223.
6. Nakano T, Shoukamy MI, Tsuda M, Sasanuma H, Hirota K, Takata M, Masunaga SI, Takeda S, Ide H, Bessho T, Tano K. (2020) Participation of TDP1 in the repair of formaldehyde-induced DNA-protein cross-links in chicken DT40 cells *PLoS One.* 15(6):e0234859.
7. Saha LK, Wakasugi M, Akter S, Prasad R, Wilson SH, Shimizu N, Sasanuma H, Huang SN, Agama K, Pommier Y, Matsunaga T, Hirota K, Iwai S, Nakazawa Y, Ogi T, Takeda S. (2020) Topoisomerase I-driven repair of UV-induced damage in NER-deficient cells. *Proc Natl Acad Sci U S A.* 117(25):14412-14420. doi: 10.1073/pnas.1920165117. Epub 2020 Jun 8.

8. Akagawa R, Trinh HT, Saha LK, Tsuda M, Hirota K, Yamada S, Shibata A, Kanemaki MT, Nakada S, Takeda S, Sasanuma H. (2020) UBC13-Mediated Ubiquitin Signaling Promotes Removal of Blocking Adducts from DNA Double-Strand Breaks. *iScience*.
9. DKC1 Overexpression Induces a More Aggressive Cellular Behavior and Increases Intrinsic Ribosomal Activity in Immortalized Mammary Gland Cells." Guerrieri AN, Zacchini F, Onofrillo C, Di Viggiano S, Penzo M, Ansuini A, Gandin I, Nobe Y, Taoka M, Isobe T, Treré D, Montanaro L. *Cancers* (Basel). 2020;12(12):3512.
10. "The ER cholesterol sensor SCAP promotes CARTS biogenesis at ER-Golgi membrane contact sites." Wakana Y, Hayashi K, Nemoto T, Watanabe C, Taoka M, Angulo-Capel J, Garcia-Parajo MF, Kumata H, Umemura T, Inoue H, Arasaki K, Campelo F, Tagaya M. *J Cell Biol*. 2021;220(1):e202002150.
11. "Cryo-EM structure of the highly atypical cytoplasmic ribosome of *Euglena gracilis*." Matzov D, Taoka M, Nobe Y, Yamauchi Y, Halfon Y, Asis N, Zimmermann E, Rozenberg H, Bashan A, Bhushan S, Isobe T, Gray MW, Yonath A, Shalev-Benami M. *Nucleic Acids Res*. 2020;48(20):11750-11761.
12. "Direct Determination of Pseudouridine in RNA by Mass Spectrometry Coupled with Stable Isotope Labeling." Yamaki Y, Nobe Y, Koike M, Yamauchi Y, Hirota K, Takahashi N, Nakayama H, Isobe T, Taoka M. *Anal Chem*. 2020;92(16):11349-11356.
13. "Dynamic RNA acetylation revealed by quantitative cross-evolutionary mapping." Sas-Chen A, Thomas JM, Matzov D, Taoka M, Nance KD, Nir R, Bryson KM, Shachar R, Liman GLS, Burkhart BW, Gamage ST, Nobe Y, Briney CA, Levy MJ, Fuchs RT, Robb GB, Hartmann J, Sharma S, Lin Q, Florens L, Washburn MP, Isobe T, Santangelo TJ, Shalev-Benami M, Meier JL, Schwartz S. *Nature*. 2020;583(7817):638-643.

14.

(4) II. 著書、総説等

なし

(5) III. 学会発表、講演等

1. Hirota K. Role of proofreading exonuclease activity of replicative polymerase  $\epsilon$  in replication fork slowing at DNA damage 分子生物学会, 2020年12月4日

オンライン開催

2. Yuki Matsubara; Yasuto Yokoi; Masami Koike; Masato Taoka; Yuko Nobe; Hiroshi Nakayama "xNA Analyzer: a novel computational tool for characterizing therapeutic oligonucleotides using liquid chromatography-tandem mass spectrometry data" 68th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, 6/2020
3. Hiroshi Nakayama; Daisuke Higo; Masami Koike; Masato Taoka "Characterization of phosphate- and phosphorothioate-linked nucleic acids by 213-nm ultraviolet photodissociation tandem mass spectrometry" 68th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, 6/2020
4. Mayu Tezuka; Yuko Nobe; Yuka Yamaki; Yoshio Yamauchi; Hiroshi Nakayama; Masato Taoka "Stable isotope labeling with nucleosides in cell culture as an approach to RNA modification dynamics" 68th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, 6/2020
5. Kurokawa Yusaku; Matsubara Yuki; Masami Koike; Yoshio Yamauchi; Taoka Masato; Yokoi Yasuto; Nakayama Hiroshi "Automatic identification of antisense locked nucleic acid by liquid chromatography - tandem mass spectrometry and combinatorial sequence database search" 68th ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics, 6/2020

## 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、その磁氣的性質を 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. T.Wada, S. Nikaido, H. Yoshino, J. Yamada, T. Kodama, K. Kikuchi, "Crystal Structure and Physical Properties of Charge-Ordered Organic Conductor  $\beta$ -(MTDT-TTP) $_2$ BF $_4$ ", *Bull. Chem. Soc. Jp.*, 94(1), 164-169 (2021)

## II. 著書、総説等

## III. 学会発表、講演等

01. 和田智也、山田順一、兒玉健、菊地耕一「電荷秩序絶縁体(MTDT-TTP) $_2$ X の構造と物性」日本化学会第 100 春季年会(2020.3、野田)
02. 高井良也、東中隆二、青木勇二、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「The Cage Dependence of Single Molecule Magnet Properties of Dy-dimetallofullerene Anions」第 58 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 (2020.3、東京)
03. 前島萌乃、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「ESR study of La and Y hetero-dimetallofullerene anions」第 58 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 (2020.3、東京)
04. 吉田俊、古川貢、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「ESR Study of two isomers of [Sc $_2$ C $_{80}$ ] $^-$ : [Sc $_2$ C $_{80}$ (1)] $^-$  and [Sc $_2$ C $_{80}$ (2)] $^-$ 」第 58 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 (2020.3、東京)
05. 山岸主暉、東中隆二、青木勇二、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「Single molecule magnet properties of Tb-dimetallofullerene anions: [Tb $_2$ @C $_{80}$ (I $_h$ )] $^-$  and [Tb $_2$ @C $_{78}$ (D $_{3h}$ )] $^-$ 」第 58 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 (2020.3、東京)
06. 藤田直也、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「Attempt to produce Sm-dimetallofullerenes」第 58 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 (2020.3、東京)
07. 前島萌乃、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「LaY ヘテロ二核金属内包フラーレンアニオンの金属ダイマー軌道の ESR による研究」分子科学オンライン討論会 (2020.9、オンライン)
08. 藤田直也、小林和博、降矢裕輔、山下祐典、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「二核金属内包フラーレン M $_2$ @C $_{80}$  の生成条件についての研究」分子科学オンライン討論会 (2020.9、オンライン)
09. 山岸主暉、東中隆二、青木勇二、菊地耕一、阿知波洋次、兒玉健「Tb 二核内包フラーレンアニオンの単分子磁石特性」分子科学オンライン討論会 (2020.9、オンライン)

## 反応物理化学研究室

化学反応素過程や衝突過程、励起過程、緩和過程などの各種素過程は、反応を記述する基本要素であり、化学反応の根源的な理解のためには、これら素過程の詳細なメカニズムの解明が不可欠である。反応物理化学研究室では、様々な素過程において分子内の電子分布や核分布が時々刻々どのように変化していくのかを解明することによって、分子素過程に対する新たな反応物理化学を構築することを目指している。そして、そのために電子線・レーザー光線・イオンビームを用いた独自の実験手法や実験装置を開発し、「これまで見えなかったものを見えるようにする」ことによって、化学反応の本質へ迫ることを目標としている。

### (1) 超高速電子回折法による分子動画の測定

独自に開発した極めて高い時間分解能を持つレーザーアシステッド電子回折法を用いて、化学反応過程にある分子の瞬間的な構造をスナップショット撮影し、化学反応のブレ無しスローモーション動画の撮影を目指している。2020年度は角度分解飛行時間型電子分析器を備えた世界最高感度のレーザーアシステッド電子散乱観測装置を完成させた。

### (2) レーザー照射走査電子顕微鏡の開発とナノ構造体測定

ナノ構造体に光を照射した際に生じる表面プラズモンと呼ばれる局所電場を、アト秒 ( $10^{-18}$  s) の時間分解能とオングストローム ( $10^{-10}$  m) の空間分解能で撮影できる新たな走査電子顕微鏡を開発し、表面プラズモンの時空間ダイナミクスの解明を目指している。2020年度は改造中の走査型電子顕微鏡装置を東京都立大学に移設し、動作確認を実施した結果、改造後の電子銃を用いても電子顕微鏡像の測定が可能であることを検証した。

### (3) 捕捉イオン電子回折法による分子イオン・分子錯合体イオンの構造測定

イオントラップに捕捉された分子イオンや分子錯合体イオンに対する電子回折法を開発し、分子イオンや分子錯合体イオンの精密構造測定を目指している。2020年度は分子イオンに対する捕捉イオン電子回折法に初めて成功し、分子イオンの直接的な構造測定が実現可能であることを示した。

### (4) ゼプト秒領域の散乱遅延時間計測

高速電子線と原子との衝突によって生じる散乱遅延時間をゼプト秒 ( $10^{-21}$  s) の時間分解能で計測する実験手法の開発を目指している。2020年度は散乱電子信号強度の数値シミュレーションや波長板自動制御システムの構築など、実験手法開発の準備を進めた。

(5) 多価イオン衝突による分子解離過程の研究

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。2020年度は、多価イオン-エチレン衝突実験における解離過程の考察を行った。

(6) 卓上静電型イオン蓄積リングによる分子冷却過程の研究

超高真空の卓上型イオン蓄積リング ( $\mu\text{E}$ -ring) を用いて、炭素クラスターをはじめとする原子・分子イオンの輻射冷却や反応断面積測定を行っている。2020年度は炭素クラスター負イオンの冷却過程の測定に向けた標的負イオンの蓄積条件を模索した。

## I. 原著論文

01. Q. Zhang, S. Fukahori, T. Ando, R. Kanya, A. Iwasaki, T. Rathje, G. G. Paulus, and K. Yamanouchi

“Absolute carrier-envelope-phase dependences of single and double ionization of methanol in a near-IR few-cycle laser field”

J. Chem. Phys. 152, 194304 (2020).

02. J. Matsumoto, Y. Iwasaki, H. Shiromaru, and G. Veshapidze,

“Charge-sharing dynamics of dissociating highly charged ions”

Phys. Rev. A 102, 022819 (2020).

## II. 総説等

## III. 学会発表

01. Reika Kanya,

“Determination of collision times in laser-assisted electron scattering for ultrafast imaging of atoms and molecules” (招待講演)

The 6th Quantum Science Symposium (2020年9-11月, オンライン開催)

02. 松本淳,

“多電子捕獲における多価アセチレンイオンの電子再配置と解離” (ホットトピックス講演として選出),

原子衝突学会第 45 回年会 (2020 年 11 月, オンライン開催)

03. Takahiro Suzuki, Keiko Kato, Hideaki Tanaka, Kazuki Isoyama, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi,  
“Determination of geometrical structure of  $\text{CCl}_3^+$  by trapped-ion electron diffraction,”  
日本化学会 第 101 春季年会 (2021 年 3 月, オンライン開催)
04. Motoki Ishikawa, Kakuta Ishida, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi,  
“Measurements of two-dimensional differential cross section of femtosecond LAES signals of Ar atoms,”  
日本化学会 第 101 春季年会 (2021 年 3 月, オンライン開催)
05. Shuhei Sudo, Motoki Ishikawa, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi,  
“Development of a photocathode-type pulsed electron gun for time-resolved electron diffraction measurements,”  
日本化学会 第 101 春季年会 (2021 年 3 月, オンライン開催)
06. Takahiro Suzuki, Keiko Kato, Hideaki Tanaka, Kazuki Isoyama, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi,  
“Determination of geometrical structure of  $\text{CCl}_3^+$  by trapped-ion electron diffraction,” (招待講演)  
Symposium on Recent Development in Ultrafast Intense Laser Science 2 (2021 年 3 月, 東京, ハイブリッド開催)
07. Motoki Ishikawa, Kakuta Ishida, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi,  
“Measurements of two-dimensional differential cross section of femtosecond LAES signals of Ar atoms,” (招待講演)  
Symposium on Recent Development in Ultrafast Intense Laser Science 2 (2021 年 3 月, 東京, ハイブリッド開催)
08. Michihiro Kitanaka, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi,  
“Development of single-cycle THz light source for THz-wave-assisted electron diffraction,” (招待講演)  
Symposium on Recent Development in Ultrafast Intense Laser Science 2 (2021 年 3 月, 東京, ハイブリッド開催)
09. Reika Kanya, Kousuke Matsuo, Takashi Ohshima, Yoichi Ose, Naoto Ito, Kaoru Yamanouchi, (招待講演)  
“Development of a pulsed electron gun for scanning electron microscope,”



Symposium on Recent Development in Ultrafast Intense Laser Science 2 (2021年3月, 東京, ハイブリッド開催)

10. Takashi Hiroi, Yuya Morimoto, Reika Kanya, Kaoru Yamanouchi,  
“Observation of laser-assisted (e, 2e) in ultrashort intense laser fields,” (招待講演)

Symposium on Recent Development in Ultrafast Intense Laser Science 2 (2021年3月, 東京, ハイブリッド開催)

## 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) <オルトおよびパラ置換ベンゼン環を有する不飽和チアクラウンエーテルによるフラーレンおよび金属内包フラーレンの包接に関する研究> オルトおよびパラ置換ベンゼン環とシス二重結合を交互に導入した大環状不飽和チアクラウンエーテルとフラーレンとの溶液中での相互作用を、紫外吸収スペクトルおよび発光スペクトルを用いた滴定実験により検討した。その結果、 $C_{60}$ 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れらの大環状不飽和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> ベンゼン環上に複数のスルフィド部位とスルホニウム部位を持つ化合物の合成を検討した。その結果、ベンゼン環上にスルフィド部位を1~3つ、スルホニウム部位を1~4つ有する化合物を合成することができた。合成した化合物の吸収スペクトルを比較すると、スルホニウム部位のみを持つ化合物より、スルフィド部位とスルホニウム部位の両方を持つ化合物の方が、またスルホニウム部位を多く有する化合物の方がより長波長に吸収が観測された。酸化還元挙動では、スルホニウム部位の数が多いほど還元されやすいことがわかった。

### I. 原著論文

01. Ayari, S.; Hirabayashi, K.; Shimizu, T.; Jamoussi, B.; Saglam, M. F.; Atilla, D.; Sugiura, K.  
“Crystal Structure of 3-(3-Methyl-1*H*-indole-1-yl)phthalonitrile”  
*X-ray Structure Analysis Online* 2020, 36, 11-13.
02. Hossain, M. A.; Hirabayashi, K.; Nishinaga, T.; Shimizu, T.; Sugiura, K.  
“Crystal Structure Refinement of 1,4,5,8-Tetrabromonaphthalene: A Twisted Chiral Naphthalene Induced by Steric Repulsion”

II. 著書、総説等

01. Shimizu, T.

“Four-membered Rings with Two or More Heteroatoms including Selenium or Tellurium”

*Comprehensive Heterocyclic Chemistry IV* Katritzky, A. R.; Ramsden, C. A.; Scriven, E. F. V.; Taylor, R. J. K., Eds., Elsevier, Oxford, 2020, vol.2, 853-874.

III. 学会発表、講演等

01. 高橋蓮, 平林一徳, 清水敏夫

「複数のスルホニウム部位を有するベンゼン誘導体の合成」

日本化学会第100春季年会 (2020, 3, 東京)

02. 高橋蓮, 平林一徳, 清水敏夫

「ベンゼン環上にスルフィドとスルホニウム部位を有する化合物の合成と性質」

第47回有機典型元素化学討論会 (2020, 12, online)

03. 本多理沙, 平林一徳, 西長亨, 清水敏夫, 杉浦健一

「ジナフトフランを基本骨格として用いた新規蛍光色素の合成研究」

第117回有機合成シンポジウム (2020, 12, online)

## 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、量子化学という研究分野が確立された。また、巨視的な観点では、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、分子集団の非平衡物理化学を扱う研究も進んでいる。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、生体物質の大規模シミュレーションや粗視化モデルによる生命現象の解析などが可能となってきたことから、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、理論化学・計算化学の研究手法は広く活用されつつある。

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の提案や計算効率の高い実用的な解法の開発、およびこれら手法を利用した実験結果の数値解析と、その解釈に基づく定量的な予測を行うことを目指して研究を進めている（波田・中谷・阿部グループ）。また、バイオ・ソフトマターの非平衡物理化学の研究で得られた知見を用いて、生体物質や生命現象を理解しようとする研究を進めている（好村グループ）。さらに、p-ブロック元素上に未知の結合様式を有する新規化学種の合成、単離、構造解析と、p-ブロック元素の特性を生かした機能性分子の基盤分子の開発にも取り組み、新しい化学理論の構築を目指す研究を進めている（佐藤グループ）。

主要なテーマは以下の通りである。

- (1) 相対論および電子相関理論を考慮した電子状態理論の構築
- (2) 重原子を含む分子の電磁氣的分子物性に関する理論的研究
- (3) 遷移金属錯体を使った触媒反応メカニズムの理論解析
- (4) 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
- (5) 粗視化モデルで解明する生体ナノマシンの自律的な運動機構
- (6) 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
- (7) p-ブロック元素を礎にした新規化学種の創製とその応用

### I 原著論文

#### 01. Time-dependent DFT study of K-edge spectra for vanadium and titanium complexes: Effects of chloride ligands on pre-edge feature

Yi, Jun; Nakatani, Naoki; Nomura, Kotohiro; Hada, Masahiko, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 674-683 (2020).

<https://doi.org/10.1039/C9CP05891E>

#### 02. Effect of External Electric Fields on the Oxidation Reaction of Olefins by Fe(IV)OCl-Porphyrin Complexes

Z. Ma, H. Fujii, N. Nakatani, M. Hada, *Bulletin of Chemical Society of Japan*, **93**(2), 187-192 (2020). doi:10.1246/bcsj.20190293

03. Exploring the Relationship between Effective Mass, Transient Photoconductivity, and Photocatalytic Activity of  $\text{Sr}_x\text{Pb}_{1-x}\text{BiO}_2\text{Cl}$  ( $x = 0-1$ ) Oxyhalides  
Hajime Suzuki, Shohei Kanno, Masahiko Hada, Ryu Abe, and Akinori Saeki, *Chemistry of Materials*, 32(10) 4166-4173 (2020). <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b05366>
04. Experimental and theoretical investigation of the role of bismuth in promoting the selective oxidation of glycerol over supported Pt-Bi catalyst under mild conditions,  
Feng, Shixiang; Yi, Jun; Miura, Hiroki; Nakatani, Naoki; Hada, Masahiko; Shishido, Tetsuya, *ACS Catalysis*, 10(11), 6071-6083 (2020). <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c00974>
05. Accurate determination of the enhancement factor X for the nuclear Schiff moment in  $^{205}\text{TlF}$  molecule based on the four-component relativistic coupled-cluster theory,  
M. Abe, T. Tsutsui, J. Ekman, B. P. Das, M. Hada, *Molecular Physics*, 118(23), e1767814, (2020).  
DOI: 10.1080/00268976.2020.1767814
06. Density Functional Study of Metal-to-Ligand Charge Transfer and Hole-Hopping in Ruthenium(II) Complexes with Alkyl-Substituted Bipyridine Ligands.  
Salmahaminati, \*; Abe, Minori; Purnama, Indra; Mulyana, Jacob; Hada, Masahiko, *ACS Omega*, 6 (1), 55-64, 2021, <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c01199>
07. Transition-Metal Capping to Suppress Back-Donation to Enhance Donor Ability,  
Masaichi Saito\*, Jumpei Hamada, Shunsuke Furukawa, Masahiko Hada, Libor Dostál, and Aleš Růžička, *Organometallics*, 39(23), 4191-4194 (2020), <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.0c00534>
08. Theoretical studies of reaction mechanisms for half-titanocene-catalyzed styrene polymerization, ethylene polymerization, and styrene-ethylene copolymerization: Roles of the neutral Ti(III) and the cationic Ti(IV) species  
Yi, Jun; Nakatani, Naoki; Tomotsu, Norio; Nomura, Kotohiro; Hada, Masahiko, *Organometallics*, 40(6), 643-653 (2021). <https://doi.org/10.1021/acs.organomet.0c00715>
09. Surface-enhanced Raman scattering of  $\text{M}_2$ -pyrazine- $\text{M}_2$  ( $\text{M} = \text{Cu}, \text{Ag}, \text{Au}$ ): Analysis by natural perturbation orbitals and density functional theory functional dependence.  
Masaya Miyamoto and Masahiko Hada, *Computational Chemistry*, 41(17), 1628-1637 (2020)  
<https://doi.org/10.1002/jcc.26205>
10.  $^{13}\text{C}$  NMR chemical shifts in substituted benzenes: analysis using natural perturbation orbitals and substitution effects.  
Masaya Miyamoto and Masahiko Hada, *Mol. Phys.*, 119(6), e1843722, <https://doi.org/10.1080/00268976.2020.1843722>

11. マテリアルズ・インフォマティクスを用いたペロブスカイト太陽電池材料の探索  
菅野翔平, 今村穰, 波田雅彦, 分離技術, 50, 1, 18-24 (2020)
12. Meso-Substitution Activates Oxoiron(IV) Porphyrin  $\pi$ -Cation Radical Complex More Than Pyrrole- $\beta$ -Substitution for Atom Transfer Reaction.  
Mami Fukui, Kanako Ueno, Masahiko Hada, Hiroshi Fujii  
*Inorg. Chem.*, **60**(5), 3207-3217 (2021). <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c03548>
13. Attainable accuracies of  $\text{QH}^+$  rotational transition frequencies (Q:  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{202}\text{Hg}$ ),  
Kajita M., Bala R., Abe M., *J. Phys., B, At. Mol. Opt. Phys.*, **53** (8), 085401, 2020.  
DOI: 10.1088/1361-6455/ab7425
14. Significance of Non-Linear Terms in the Relativistic Coupled-Cluster Theory in the Determination of Molecular Properties.  
Prasanna V. S., Sahoo B. K., Abe M., Das B. P.  
*Symmetry-Basel*, **12** (5), 811, 2020. DOI: 10.3390/sym12050811
15. IR Intensities of CO Molecules Adsorbed on Atop and Low-coordinate Sites of Pd Nanoparticles: Analysis Using Natural Perturbation Orbitals.  
Masaya Miyamoto and Masahiko Hada,  
*Bull. Chem. Soc. Japan*, in press. doi:10.1246/bcsj.20210073
16. Effect of Ligand on the Electronic State of Gold in Ligand-Protected Gold Clusters Elucidated by X-ray Absorption Spectroscopy  
T. Matsuyama, J. Hirayama, Y. Fujiki, S. Kikkawa, W. Kurashige, H. Asakura, N. Kawamura, Y. Negishi, N. Nakatani, K. Hatada, F. Ota, and S. Yamazoe  
*J. Phys. Chem. C*, **125**(5), 3143-3149 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c09369
17. Synthesis and Structural Analysis of Four Coordinate (Arylimido)niobium(V) Dimethyl Complexes Containing Phenoxide Ligand: MAO-Free Ethylene Polymerization by the Cationic Nb(V)-Methyl Complex  
K. Koide, J. Yi, M. Kuboki, S. Yamazoe, N. Nakatani, and K. Nomura  
*Organometallics*, **39**(20), 3742-3758 (2020). DOI: 10.1021/acs.organomet.0c00567
18. Extending nudged elastic band method to reaction pathways involving multiple spin states  
L. Zhao, K. Watanabe, N. Nakatani, A. Nakayama, X. Xu, and J. Hasegawa  
*J. Chem. Phys.*, **153**(13), 134114 (2020). DOI: 10.1063/5.0021923

19. Synthesis and Molecular Structure of Pseudo-Hexacoordinated Pnictines Bearing 2-Phenylpyridine Ligands  
M. Sakabe, A. Ooizumi, W. Fujita, S. Aoyagi, S. Sato  
*Eur. J. Inorg. Chem.* **2020**, 4373-4379. DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.202000795>.
20. Isolation and Structural Determination of a Hexacoordinated Antimony(V) Dication  
M. Sakabe, S. Sato  
*Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 5658-5665. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202004659>.  
Front Cover; *Chem. Eur. J.* **18/2021**. DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202100316> and  
<https://doi.org/10.1002/chem.202100317>.
21. Shear viscosity of two-state enzyme solutions  
Y. Hosaka, S. Komura, and D. Andelman  
*Phys. Rev. E* **101**, 012610 (11pp) (2020)
22. Dynamics of a membrane coupled to an active fluid  
C.-C. Liang, K. Yasuda, S. Komura, K.-A. Wu, and H.-Y. Chen  
*Phys. Rev. E* **101**, 042601 (10pp) (2020)
23. Brownian motion confined in a Brownian surface  
S. Komura  
*JPSJ News and Comments* **17**, 08 (2020)
24. Reciprocal microswimmers in a viscoelastic fluid  
K. Yasuda, M. Kuroda, and S. Komura  
*Phys. Fluids* **32**, 093102 (7pp) (2020)
25. Dynamics of passive and active membrane tubes  
S. C. Al-Izzi, P. Sens, M. S. Turner, and S. Komura  
*Soft Matter* **16**, 9319-9330 (2020)
26. Mechanochemical enzymes and protein machines as hydrodynamic force dipoles:  
The active dimer model.  
Y. Hosaka, S. Komura, and A. S. Mikhailov  
*Soft Matter* **16**, 10734-10749 (2020)

## 27. Lateral diffusion on a frozen random surface.

T. Ohta and S. Komura

EPL 132, 50007 (7pp) (2020)

## II 著書、総説等

## III 学会発表、講演等

### 【国内】

#### 01. 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Ⅱ」

日本物理学会 2020 年秋季大会、2020 年 9 月 8 日-11 日、オンライン

#### 02. 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理論モデル」

日本物理学会 2020 年秋季大会、2020 年 9 月 8 日-11 日、オンライン

#### 03. 保坂 悠人、好村 滋行

「反対称粘性率を持つ二次元圧縮性流体の流体力学的応答」

日本物理学会 2020 年秋季大会、2020 年 9 月 8 日-11 日、オンライン

#### 04. 好村 滋行、曹 勇、保坂 悠人、安田 健人

「熱的に駆動されるマイクロマシンのエントロピー生成」

日本物理学会 2020 年秋季大会、2020 年 9 月 8 日-11 日、オンライン

#### 05. 江良 勝智、小谷野 由紀、保坂 悠人、安田 健人、北畑 裕之、好村 滋行

「自律的に速度を選択する弾性スイマー」

日本物理学会 2020 年秋季大会、2020 年 9 月 8 日-11 日、オンライン

#### 06. 伊藤 碧、山下 晃史、松尾 寛、佐藤 拓哉、立木 佑弥、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」

日本物理学会 2020 年秋季大会、2020 年 9 月 8 日-11 日、オンライン

#### 07. 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」

分子科学会オンライン討論会、2020 年 9 月 14 日-17 日、オンライン

#### 08. 木下 皓史、菅野 翔平、中谷 直輝、波田 雅彦

「深層学習によるペロプスカイト化合物のバンドギャップ予測」

分子科学会オンライン討論会、2020 年 9 月 14 日-17 日、オンライン

#### 09. 富田 大樹、中谷 直輝、砂田 祐輔、波田 雅彦

「Pd-Si クラスターの構造と電子状態に関する理論的研究」

分子科学会オンライン討論会、2020 年 9 月 14 日-17 日、オンライン



10. Zhifeng Ma, Naoki Nakatani, Hiroshi Fujii, Masahiko Hada  
「DFT study axial ligand effects on electronic structure and mechanistic reactivity of oxoiron (IV)porphyrin」  
Japan Society for Molecular Science, Online, Sep.14-17,2020
11. 波田 雅彦  
「NMR 化学シフトの精密計算と電子 EDM 探査を目指した相対論的量子化学計算」  
IQCE 量子化学探索講演会 2020 「量子化学で探る化学の最先端」  
2020 年 11 月 2 日、オンライン
12. 阿部 穰里、佐藤 有汰留、波田 雅彦  
「微生物によるウラン還元同位体効果の理論的考察」  
2020 年度日本地球化学会年会、2020 年 11 月 12 日・26 日、オンライン
13. 曹 勇、好村 滋行  
「Non-equilibrium statistical mechanics of a thermally driven micromachine」  
第 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
14. 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 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
15. 保阪 悠人、好村 滋行  
“Hydrodynamic non-reciprocal response of a compressible monolayer with odd viscosity”  
第 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
16. 古屋 智博、好村 滋行  
「細胞シートにおける亀裂進展の理論モデル」  
第 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
17. 劉 芳美、好村 滋行  
「不均一な輸送係数を持つ二成分系のマイクロ相分離ダイナミクス」  
第 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
18. 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 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
19. 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 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
20. 笹田 智暉、好村 滋行  
「層状弾性体における力学応答」  
第 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン
21. 糸井 遥、好村 滋行  
「化学反応を伴う三成分系の相分離シミュレーション」  
第 19 回関東ソフトマター研究会、2020 年 11 月 21 日、オンライン

22. 小林 果、好村 滋行  
「自己駆動粒子を用いた感染症流行のシミュレーション」  
第19回関東ソフトマター研究会、2020年11月21日、オンライン
23. 中谷 直輝  
「電子相関と post-HF 法」  
第10回量子化学スクール(自然科学研究機構分子科学研究所、計算物質科学人材育成  
コンソーシアム、理論化学会)、2020年12月1日-2日、オンライン
24. 坂部 将仁、佐藤 総一  
「三面冠四面体型7配位スチボニウムカチオンの合成」  
第47回有機典型元素化学討論会、2020年12月3-5日、オンライン(群馬大学)
25. S. Komura,  
「Non-reciprocity in active matter」  
Active Matter Workshop 2021, Jan.22-23, 2021, Online
26. K.Yasuda, S. Komura  
「State cyclone of a micromachine driven by catalytic reaction」  
Active Matter Workshop 2021, Jan.22-23, 2021, Online
27. Y. Hosaka, S. Komura, D. Andelman,  
「Non-reciprocal response of a two-dimensional fluid with odd viscosity」  
Active Matter Workshop 2021, Jan. 22-23, 2021, Online
28. 佐藤 有次留、市川 絵理、阿部 穰里、波田 雅彦  
「閃ウラン鉱における同位体効果の理論的研究」  
熊取研究会「アクチノイド物性化学とその応用」、2021年2月10日、オンライン
29. 好村 滋行  
「粗視化モデルで解明する生体ナノマシンの自律的な運動機構」  
新学術領域研究「情報物理学でひもとく生命の秩序と設計原理」  
第18回ランチミーティング、2021年3月2日、オンライン
30. 阿部 穰里、佐藤 有次留、波田 雅彦  
「化学反応経路中のウラン同位体効果に関する理論的研究」  
第18回同位体科学研究会、2021年3月12日、オンライン
31. 佐藤 有次留、市川 絵理、阿部 穰里、波田 雅彦  
「非生物性還元で生成する閃ウラン鉱の同位体分別に関する理論的研究」  
第18回同位体科学研究会、2021年3月12日、オンライン
32. 曹 勇、保阪 悠人、安田 健人、好村 滋行  
「熱的に駆動されるマイクロマシンの遊泳効率」  
日本物理学会 第76回年次大会、2021年3月12日-15日、オンライン
33. 江良 勝智、小谷野 由紀、保阪 悠人、安田 健人、北畑 裕之、好村 滋行  
「自律的に速度を選択する弾性スイマーII」  
日本物理学会 第76回年次大会、2021年3月12日-15日、オンライン

34. 劉 芳美、好村 滋行  
「不均一な輸送係数を持つ二成分系のマイクロ相分離ダイナミクス」  
日本物理学会 第76回年次大会、2021年3月12日-15日、オンライン
35. 笹田 智暉、保阪 悠人、安田 健人、好村 滋行  
「層状弾性体における力学応答」  
日本物理学会 第76回年次大会、2021年3月12日-15日、オンライン
36. 安田 健人、黒田 瑞希、好村 滋行  
「粘弾性流体中の相反マイクロスイマー」  
日本物理学会 第76回年次大会、2021年3月12日-15日、オンライン
37. 保阪 悠人、好村 滋行、D. Andelman  
「反対称粘性率を持つ二次元圧縮性流体の流体力学的応答 II」  
日本物理学会 第76回年次大会、2021年3月12日-15日、オンライン
38. Ataru Sato, Minori Abe, Masahiko Hada  
「Theoretical study on isotope fractionation in multistep biotic uranium reduction reaction」  
日本化学会第18回春季年会、2021年3月19日-22日、オンライン
39. 市川 絵里、佐藤 有汰留、阿部 穰里、波田 雅彦  
「非生物性還元で生成するウラン結晶の同位体分別に関する理論的研究」  
日本化学会第18回春季年会、2021年3月19日-22日、オンライン
40. 吉田 玲、阿部 穰里、波田 雅彦  
「第一原理計算による  ${}^7\text{Be}$  核の電子捕獲壊変を速める化合物探索」  
日本化学会第18回春季年会、2021年3月19日-22日、オンライン

## 【国際学会】

01. Ataru Sato, Minori Abe, and Masahiko Hada  
“Theoretical modeling of uranium isotope fractionation in multi-step biotic reduction”  
Goldschmidt virtual 2020, Jun.21-26, 2020, Online.
02. Naoki Nakatani, Jun Yi, and Masahiko Hada  
“TDDFT studies on the XANES spectra of Ti and V complex catalysts”  
Japan-Norway Bilateral Symposium from Fundamental Chemistry to Porous Materials: Theory and Experiment, Aug. 20-21, 2020, Online (invited)
03. Minori Abe  
“Reconsideration of the electronic term of the Schiff moment in closed-shell molecules”  
Fundamental Sciences & Quantum Technologies using Atomic Systems 2020, Sep.28-Oct.1, 2020, Online.

**04. Minori Abe**

**“Diatomic molecular electronic wavefunction inside a nucleus for measurement of nuclear Schiff moment”**

**Yamada Conference LXXII: The 8th Asia-Pacific conference on Few-Body problems in Physics (APFB2020), Mar.1-5, 2021, Kanazawa bunka hall, Kanazawa, Japan.**

**05. S. Komura**

**“A three-sphere microswimmer in a structured fluid”**

**Biological and soft-matter physics, Dec.2020, Israel, Online**

## 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  $^{57}\text{Co}$  などから発生する $\gamma$ 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  $\text{C}_{60}$  等に代表されるフラーレン分子内部に金属原子を取り込んだ金属内包フラーレンは電子デバイスや医薬品としての応用が期待される分子の一つである。しかしながら金属フラーレンの生成量は非常に少なく、現在、応用研究はほとんど進んでいないのが現状である。我々は極少量でも非常に感度良く測定できる放射線を用いて金属内包フラーレンの性質を調べ、また、医学的に有用な放射性同位元素を罹患部位まで運搬するドラッグデリバリーとして水溶性金属フラーレンの合成を行い核医学的な応用を目指している。以下に研究テーマ名を示す。

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

I. 原著論文

1. A. S. Ali, S. A. M. Issa, H. M. H. Zakaly, M. Rashad, I. Khan, B. Zhang, K. Akiyama, S. Kubuki, and H.O. Tekin  
“Municipal waste slag for dyes photocatalytic and metal recovery applications through structural analysis and experimental characterization”  
*Int. J. Ene. Res.*, under revision.
2. I. Khan, M. Sakura, R. Higashinaka, T. D. Matsuda, Y. Aoki, E. Kuzmann, Z. Homonnay, K. Sinkó, L. Pavić, and S. Kubuki  
“Synthesis, Characterization and Magnetic properties of  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles prepared by Sol-Gel Method”  
*J. Mag. Mag. Mater.*, under revision.
3. S. Kubuki, K. Osouda, A. S. A. Ali, I. Khan, B. Zhang, A. Kitajou, S. Okada, J. Okabayashi, Z. Homonnay, E. Kuzmann, T. Nishida, L. Pavić, A. Šantić, and A. Moguš-Milanković  
“<sup>57</sup>Fe-Mössbauer and XAFS Studies of Conductive Sodium Phospho- Vanadate Glass as a Cathode Active Material for Na-ion Batteries with Large Capacity”  
*J. Non-Cryst. Solids*, under revision.
4. B. Zhang, L. Zhang, K. Akiyama, P. Bingham, Y. Zhou, and S. Kubuki  
“Heterojunction Architecture of BiOI/MIL-53(Fe) as a Reusable Catalyst for Boosting Advanced Oxidation Performance via Radical and Nonradical Pathway”  
*ACS Appl. Materi. Interfaces*, Accepted.
5. B. Zhang, M. Zhang, L. Zhang, P. Bingham, M. Tanaka, W. Li, and S. Kubuki  
“BiOBr/MoS<sub>2</sub> catalyst as heterogenous peroxymonosulfate activator toward organic pollutant removal: Energy band alignment and mechanism insight”  
*J. Colloid. Sur. Sci.*, in press. (2021)
6. I. Khan, E. Kuzmann, K. Nomura, A. S. Ali, K. Akiyama, Z. Homonnay, K. Sinkó, L. Pavić, and S. Kubuki  
“Structural characterization, electrical and photocatalytic properties of  $\alpha$ - and  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles dispersed in iron aluminosilicate glass”  
*J. Non-Cryst. Solids*, **561**, 120756 (2021).
7. N. Popov, M. Bošković, M. Perović, Z. Nemeth, J. Wang, Z. Kuang, M. Reissner, E. Kuzmann, Z. Homonnay, S. Kubuki, M. Marciuš, M. Ristić, S. Musić, D. Stanković, and S. Krehula  
“Influence of low-spin Co<sup>3+</sup> for high-spin Fe<sup>3+</sup> substitution on the structural, magnetic, optical and catalytic properties of hematite ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) nanorods”  
*J. Phys. Chem. Solids*, **152**, 109929 (2020).
8. S. Ohara, T. Naka, K. Sunakawa, S. Kubuki, M. Senna, and T. Hashishin  
“Emergence of ferromagnetism due to charge transfer in compressed ilmenite powder using super-high-energy ball milling”  
*Sci. Rep.*, **10**(1) 5293(Dec. 2020).
9. B. Zhang, L. Zhang, P. A. Bingham, W. Li, and S. Kubuki  
“PVP surfactant-modified flower-like BiOBr with tunable bandgap structure for efficient photocatalytic decontamination of pollutants”

*Appl. Surface Sci.*, **530**, 147233(2020).

10. A. S. Ali, I. Khan, B. Zhang, M. Razum, L. Pavić, A. Santić, P. Bingham, K. Nomura, and S. Kubuki

“Structural, electrical and photocatalytic properties of iron-containing soda-lime aluminosilicate glass and glass-ceramics”

*J. Non-Cryst. Solids*, **553**, 120510 (2020).

11. I. Khan, K. Sunakawa, R. Higashinaka, T. D. Matsuda, Y. Aoki, K. Nomura, E. Kuzmann, Z. Homonnay, K. Sinkó, T. Naka, T. Nakane, S. Krehula, S. Musić, and S. Kubuki

“Structural Characterization and magnetic properties of iron-phosphate glass prepared by sol-gel method”

*J. Non-Cryst. Solids*, **543**, 120158(2020).

12. A. S. Ali, I. Khan, B. Zhang, K. Nomura, Z. Homonnay, E. Kuzmann, A. Scrimshire, P. Bingham, S. Krehula, M. Ristić, S. Musić, K. Akiyama, and S. Kubuki

“Photo-Fenton degradation of methylene blue using hematite-enriched slag under visible light”

*J. Radioanal. Nucl. Chem.*, **352**(2), 537-549(2020).

13. N. Popov, S. Krehula, M. Ristić, E. Kuzmann, Z. Homonnay, M. Bosković, D. Stanković, S. S.Kubuki, and S. Musić

“Influence of Cr doping on the structural, magnetic, optical and photocatalytic properties of  $\alpha$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$  nanorods”

*J. Phys. Chem. Solids.*, **148**, 109699 (2020).

14. I. Khan, K. Nomura, E. Kuzmann, Z. Homonnay, K. Sinkó, M. Ristić, S. Krehula, S. Musić, and 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(2020).

15. E. Furuta, K. Akiyama, H. Inoue, Y. Kataoka, and M. Sensui

“A dipping method for radioactivity measurement in water using plastic scintillator”

*J. Radioanal. Nucl. Chem.*, **324**, 109–122 (2020).

## II. 著書、総説等

1. 久富木 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)

## III. 学会発表、講演等

<国際学会> なし

<国内学会>

1. 齋藤 滉, アブデルカリームアリ アーメドサラ, カーン イルファン, 久富木 志郎  
家庭ごみ焼却スラグモデルガラスセラミックスの構造と光触媒効果の相関  
日本セラミックス協会 2021 年年会 (2021 年 3 月、オンライン開催).
2. 高辻 真太郎, 渡邊 玄, 遠藤 理恵, 須佐 匡裕, 林 幸, 久富木 志郎  
 $\text{CaO-SiO}_2\text{-FeO-Fe}_2\text{O}_3$  融体の酸化鉄活量係数に及ぼす鉄イオンの配位構造の影響  
2021 年日本鉄鋼協会春季講演大会 (2021 年 3 月、オンライン開催).
3. 久富木 志郎, イルファン カーン  
家庭ごみ焼却スラグを原料とした環境浄化触媒の開発  
2020 年度オンライン施策提案発表会 (2020 年 1 月、オンライン開催).
4. 齋藤 滉, アブデルカリームアリ アーメドサラ, カーン イルファン, 久富木 志郎  
家庭ごみ焼却スラグモデルガラスセラミックスの構造と光触媒効果の相関  
第 59 回セラミックス基礎科学討論会 (2021 年 1 月、オンライン開催).
5. 諏訪智也, 秋山和彦, 菊永英寿, 久富木志郎  
プロメチウムを含む二金属内包フラーレンの性質  
第 64 回放射化学討論会 (2020 年 9 月、オンライン開催).
6. 齋藤 涼太, 秋山 和彦, Ali Ahmed S. A., Kahn Irfan, 菊永 英寿, 久富木 志郎  
家庭ごみ焼却スラグ中の有価金属の組成変動と分離  
第 64 回放射化学討論会 (2020 年 9 月、オンライン開催).
7. 秋山和彦, 齋藤涼太, 諏訪智也, Ali Ahmed, 菊永英寿, 久富木志郎  
光量子放射化法による家庭ごみ焼却スラグの組成分析 2  
第 64 回放射化学討論会 (2020 年 9 月、オンライン開催).
8. 秋山 和彦, 齋藤 涼太, 諏訪 智也, 西村 峻, 土田 竜貴  
家庭ごみ焼却スラグに含まれる有価金属元素回収の試み  
ELPH Symposium 2021 (2021 年 3 月、宮城・オンライン開催).



