

平成 24 (2012) 年度
首都大学東京 大学院
理工学研究科

分子物質化学専攻
研究分野紹介

各専攻の分野名の前又は、研究室名の前につけた①、②などの番号は、学生募集要項の研究分野一覧表中に付してある番号と同一です。

教員名の○印は平成 25 年 3 月定年退職予定であることを示します。

① 無機化学研究室

教授：杉浦 健一 准教授：浅野 素子 助教：山下健一

無機化学研究室では、「多重機能を有するナノ金属錯体の創製」および「金属錯体複合系の光励起ダイナミクス」に関する研究を行っている。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性質を示すだけでなく、様々な機能を発現することが期待される。特に有機配位子の修飾によって一次元～三次元的な配列をもつナノ錯体の合成が可能であり、また複数の金属錯体ユニットが様々な距離・配向で相互作用する分子系を設計できるため、単独の金属錯体とは全く異なる機能の発現や生体超分子系の模倣が可能となる。

これらの分子によって実現される磁性と伝導、伝導と光、光と磁性等が複合的に作用して発現する“多重機能”は例えば既存の電子材料を凌駕する新物質系の創出を導く。さらにナノ領域に於いて発現する量子効果や、構造が明確なナノサイズ構築体を用いた触媒機能等に注目している。一方、光励起状態における動力学的研究においては電子・スピン間相互作用という分子の静的性質によってどのように動的性質が導かれるのか、その原理を明らかにすることを目指す。これらはいずれも世界に先駆ける先導的な研究テーマであると共に、新しい学問分野の開拓を目指すものであり、自然科学における新しい概念の構築を目指している。具体的には以下のような研究を行っている。

(1) 遷移金属ポルフィリン錯体の機能化

金属ポルフィリンは動植物の生命機能を司る鍵分子であり、その多種多様な機能は、その拡張されたπ電子系と導入された金属とに由来している。この分子を利用することにより、生命機能を凌駕し得る新物質の開発を目指す。具体的には、遷移金属ポルフィリン錯体を利用することにより、希土類磁石に匹敵する機能を有した分子性磁石の開発を実現させた。又、機能集積型巨大ポルフィリン分子の合成研究に於いては、数ナノメートルのサイズを有する錯体の合成と、その可視化に成功しており、ナノテクノロジーへの応用が期待されている。尚、本テーマを遂行するに当たり、ポルフィリン、あるいは芳香族分子の官能基化を目指した新しい反応の開発も並行して行う。これらの研究においては、有機合成化学的な作業が8~9割を占める。

(2) 金属錯体・複合分子系における長距離相互作用と光ダイナミクスの解明

生体系や人工超分子系においては数十Åの距離を数-数十ピコ秒の速度で光誘起電子移動やエネルギー移動が起きる。なぜ、このような高速反応がvan der Waals半径よりもはるかに大きな距離間で起こるのか、長距離相互作用によって引き起こされる光ダイナミクスを明らかにしている。また、分子内配向に部分的な自由度をもつ多量体を用いて、溶液中での分子の揺らぎと分子励起電子状態ダイナミクスとの連動の解明を目指す。これらの研究においては測定・解析のみならず、分子設計もあわせて行う。

(3) 二中心 三重項—二重項 coupled-spin 系におけるスピンドイナミクス

スピンは電子のもつ重要な性質の1つであるが、そのエネルギーは電子の軌道エネルギーに比べ、はるかに小さい。この小さなエネルギーをもつスピンの振る舞いを制御することによって大きなエネルギーを伴う分子過程を支配できる。2つのスピンの二中心で相互作用する系は化学反応や光物理過程の中間体として重要であるばかりでなく、二中心のスピン間相互作用に由来する新しい物質系として期待される。特に、二中心のスピンを作用もつ超分子錯体における、光とスピンの関わる化学を明らかにする。

より詳しい研究内容については、研究室のホームページを参照されたい。

<http://www.sci.metro-u.ac.jp/chem/in1/>

② 環境・地球化学研究室

教授：伊永 隆史 准教授：藤野 竜也 助教：芝本 幸平

非放射性で安定に存在する安定同位元素は従来から地球化学分野で活用されてきたが、軽元素の安定同位体比 (D/H , $^{13}C/^{12}C$, $^{15}N/^{14}N$, $^{18}O/^{16}O$) 測定を応用した食品起源トレーサビリティの可能性に着目し研究を重ねてきた。安定同位体は人体や生物に対して害が無く安全で、摂取しても生体には認識されないにもかかわらず、軽元素の安定同位体をトレーサーとして用いる同位体比質量分析装置を用いれば精密に測定できることが特長である。これまで分析化学・環境化学分野で研究対象とされてきた化学物質とは異なる優れた特性をもち、アミノ酸、脂肪酸、糖などをクロマト分離した有機分子レベル安定同位体比測定によれば、代謝系の動態解析のみならず、食品の産地判別や化粧品、薬品等の作用機構に関する基礎科学研究の進展に役立つ。その研究成果を新産業創生の基盤科学技術として産学公連携により社会に還元することをめざした研究活動を行っている。

マイクロ・ナノ化学の研究領域では、非極性溶媒中でも作用するイオン対試薬の探索により、 Li^+ を目的分子に付加させてイオン化する新発想のソフトイオン化に成功した。大気圧下でスプレーした超微粒子液滴に物理的インパクトを加えずに、リチウムイオン付加分子を液相から気相へ脱離させる新しいリチウムイオン付加による化学イオン化法が世界最高のソフトイオン化といえ、今後の発展が期待される。

化学反応、特に凝縮相で起きる反応は、様々な揺動・散逸過程との競合で起きる。このような過程はピコ秒 (10^{-12} 秒) からフェムト秒 (10^{-15} 秒) といった非常に速い時間領域でおきるため、競合する化学反応もこれと同様、もしくはそれ以下の時間スケールで進行していく。従って凝縮相でおきる化学反応を直接理解するためには、ピコ秒からフェムト秒といった非常に速い時間分解能を持つ分光手段が有用となる。我々は各種の超高速時間分解分光法を用いることにより、凝縮相における化学反応を超高速分子ダイナミクスの観点から明らかにする研究を行っている。

③ 宇宙化学研究室

教授：海老原 充 准教授：大浦 泰嗣 助教：白井 直樹

宇宙化学研究室で展開されている研究活動にかかわる主要キーワードは「地球を含めた太陽系」、「元素組成」、「核・放射化学」である。地球を含めた太陽系の物質は今から 45.6 億年前に形成された。その誕生以降、これらの太陽系物質はさまざまな変遷を経て現在に至っている。本研究室での研究領域は、太陽系形成最初期の環境、物質進化から、現在の地球上で起こっているダイナミックな変動までを包含し、地球誕生以降、現在に至るまでの宇宙・地球化学的、及び環境化学的諸過程を元素組成を通して解明することを研究の目的としている。これらの諸過程の解明には核・放射化学的知識が必須であり、それに関連する分析手法に関する研究も並行して行っている。併せて、誘導結合プラズマ (ICP) 質量分析法や ICP 原子発光分析法を用いた宇宙・地球物質の元素分析に関する研究も実施している。最近の研究テーマのいくつかを以下に示す。

(1) 隕石の化学組成に関する研究

隕石は宇宙物質 (地球外物質) を代表するものであり、太陽系形成最初期から地球を代表とする惑星形成までの惑星間環境や物質の進化に関する諸情報を内包する。これらの情報は地球物質からは失われてしまっており、隕石がその解明の唯一の手がかりを提供してくれる。本研究では隕石の元素組成を正確に求め、それをもとに太陽系を形成した物質の化学組成上の特徴から、惑星形成に至るまでの様々な過程を考察する。研究対象とする試料としては、主として南極大陸で回収された

隕石を用い、下記に述べる諸分析手法を用いてその元素組成をできるだけ多くの元素について正確に求める。元素組成に加えて、宇宙線との核反応によって生成した放射性核種を測定し、隕石が宇宙空間を飛行していた時間や、地球落下後の年代などを調べる研究も行う。

(2) 惑星探査によって得られる地球外物質の宇宙化学的研究

21世紀は宇宙の時代と言われるように、日本をはじめとする世界の主要国で惑星探査衛星の打ち上げが推進されている。その結果、これまで手に入らなかった種類の地球外物質がわれわれの研究対象になり、今後宇宙に関する知識は飛躍的に増大することが期待される。当研究室では、当面の惑星探査計画として、米国 NASA の「Genesis」、日本の宇宙開発機構 (JAXA) の「はやぶさ」、「かぐや」の探査計画に共同研究として参画している。「Genesis」では探査衛星で捕獲した太陽風を分析し、太陽の元素組成を直接分析することを目的とするものであり、「はやぶさ」では小惑星から試料を採取して地球上で分析する計画で、ともに世界ではじめての試みである。「かぐや」では月面の元素組成を遠隔測定によって得たガンマ線スペクトルを解析して求める計画である。

(3) 惑星分化過程における微量元素の分別挙動に関する研究

地球などの惑星物質は、集積後、溶融過程を経てコア分離、地殻、大気形成等の分化過程を経て現在に至っている。コア-マントル分離、地殻形成の際の白金族元素存在度、揮発性元素の挙動に注目し、マントル起源の岩石中のこれら元素の存在度をもとに、惑星の形成過程を考察する。また、小惑星、火星から飛来した隕石においても同様のアプローチを行い、微量元素の分別過程をもとに、惑星形成史を考察する。

(4) 元素組成分析法の開発とその応用

上記の研究を実施するにあたり、試料中の元素組成を正確に知る必要がある。本研究室においては主として放射化分析法、ICP 質量分析法、並びに ICP 発光分析法を利用して元素濃度を定量するが、既存の方法を発展させ、対象試料や目的元素に適した分析手法や操作の開発も行う。開発した手法は、宇宙化学的試料に利用するだけでなく、地球上の岩石試料や環境試料の分析にも応用する。例えば、大気中の微小浮遊粒子を定期的に採集し、有害元素をはじめとした微量元素の定量にも適用している。

④ 有機構造生物化学研究室

教授：伊藤 隆 准教授：三島 正規 助教：池谷 鉄兵

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 線結晶解析法と核磁気共鳴 (NMR) 法が知られているが、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ことが多い。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よう。また、細胞膜上という疎水的環境と親水的環境が隣り合う場所で機能しているいわゆる「膜蛋白質」の解析についても、NMR 法にはいっそうの手法的改良が希求されている。当研究室ではこれらの溶液 NMR 法のフロンティア領域に挑戦し、21 世紀の生命科学研究、環境研究、あるいは高分子化合物の物性研究に貢献できる研究を進めていく。

当研究室ではまた、生きた細胞や生物個体の中での蛋白質や核酸などの分子動態を直接観測するための研究も行っている。NMR 法は、生体に対する非侵襲性が高く、不透明な試料の内部についても観測可

能であることから、このような「生体高分子試料のその場解析」に適している。従来は単離・精製した試料に用いられてきた NMR を生きている細胞に適用する方法 (In-Cell NMR 法) に注目し、生細胞中の蛋白質の立体構造とその変化、翻訳後修飾、相互作用などの直接観測法の確立を目指し研究を行っている。

以下に主な研究テーマを記す。

(1) NMR を用いた高分子量蛋白質、蛋白質複合体の解析法の研究

高分子量蛋白質の NMR 解析の際には、回転相関時間の増大に伴うシグナル強度の低下と、シグナル

のオーバーラップの問題を解決する必要がある。近年の方法論的な進歩によって 10 年前は 20kDa 程度であった NMR の「分子量の壁」が、現在では 50kDa 程度まで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 3 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) NMR を用いた膜蛋白質の解析法の研究

細胞は細胞膜を通して非常に洗練された物質と情報のやりとりを行っている。細胞膜上に存在する

多数の「膜蛋白質」がこの機能を担っているが、構造生物学的アプローチからの解析は未だ十分とは言えない。当研究室では、ミトコンドリア膜を通じた鉄関連物質の輸送に関与している ABC 輸送体膜蛋白質に注目し解析を行っている。主として生物工学的、蛋白質化学的なアプローチと、NMR の方法論的なアプローチから、ABC 輸送体の分子機能発現のメカニズムに迫る。

(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) 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、②

NMR 測定の感度増大の 2 つの要素技術の確立が必須である。当研究室では、既に生きた大腸菌中のカルモジュリン蛋白質の詳細な 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。

⑤ 有機化学研究室

教授：野村 琴広 准教授：西長 亨 助教：高瀬雅祥

有機化学は「炭素化合物の化学」であり、有機化合物は「炭素、水素、酸素、窒素を中心とする比較的簡単な元素組成の分子を構成要素とする物質群」とであると定義されるが、それらの結合を使って極めて多様な構造を持つ化合物をつくり得ることで知られている。当研究室では、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製を目的に研究に取り組んでいる。また、興味ある性質を持つと予想される有機化合物を分子設計し、実際に合成してその性質を評価している。同時に、有機分子に金属の結合した有機金属化合物、電子移動反応で発生させたラジカル反応試剤、ヘテロ原子の結合した新規

反応試剤、などを利用した新しい合成反応を開発し、目的とする化合物の合成に応用している。このようにして、化学の根幹をなす「新しい化合物群を創出する」ことを念頭に研究を行っており、化学物質のもつ新しい機能の発現を目指している。

- (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、及び触媒の特徴を生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。また、金属-炭素結合を有する反応中間体の単離・同定・構造決定とその反応性を通じて、反応機構解析に関する基礎研究にも取り組んでいる。
- (2) 新しい π 電子系化合物の分子設計と合成：有機 π 電子系化合物は、その共役系を利用して特異な物性や機能を示すことが可能である。そこで、このような新しい性質が期待できる π 電子系化合物を分子設計し、続いて高度な合成手法を用いて合成する。現在、このような研究テーマに基づいて、電界効果トランジスタに用いる新規有機半導体の開発などを行っている。
- (3) 新規有機酸化還元系の合成と物性：有機ドナーまたはアクセプターとして新しい物性が期待される分子骨格を構築し、その性質を調べるとともに、その電荷移動錯体およびラジカル塩を合成し、伝導性、強磁性などの物性について研究する。また、有機酸化還元系は自己会合によって新しい超分子構造を作るので、このような自己組織化を使ったナノ分子の構築と物性についても研究している。
- (4) 新規 π 共役系化合物を含んだ遷移金属錯体の合成と物性・機能：有機金属化合物を π 共役系化合物に組み込んだ機能性物質を分子設計し、合成して、その物性を調べる。また、特異な構造を持った π 共役系化合物に基づく金属錯体の合成やそれらの超分子構造についても研究している。

⑥ 生物化学研究室

准教授：岡田聖裕* 助教：田岡 万悟

生物化学研究室では、さまざまな立場や方向から行われている生命科学研究の一環として、生体を構成するタンパク質分子のダイナミクスとその反応を基礎にして、細胞の基本的な働きを支える「機能情報ネットワーク」を解き明かすための研究を進めている。研究室の最大の特徴は、生物が示すさまざまな現象を担っている「生体のマイクロマシーン」であるタンパク質分子を、二次元電気泳動法や多次元液体クロマトグラフィー、質量分析法などを用いて高感度で包括的に解析する「プロテオーム研究」で、この分野の研究では世界で最先端の評価を受けている。「プロテオーム」とは、ある条件化で機能している遺伝子が作るタンパク質全体のことで、その構成と相互作用のダイナミクスを時系列に添って包括的に解析していく方法論が「プロテオーム解析法」である。20世紀末から21世紀にかけて、ヒトをはじめとする各種生物の設計図といえるゲノム情報の全貌が次々に明らかにされ、「生物はいかにして生命の営みを行っているか」という生命科学の最も基本的な問題に対する挑戦が「ポストゲノム研究」として世界的な規模で始まっているが、その中心として期待されるのがプロテオーム研究である。生物化学研究室は、プロテオーム研究または「プロテオミクス」と呼ばれる新しい生命科学の領域で、最新の質量分析法と情報処理技術を駆使した世界最先端のタンパク質解析技術を開発している。さらに最近では、この技術を基礎にして、RNAとタンパク質の複合体を解析するための最先端技術の開発を進めている。また、これらの方法を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とその異常を、タンパク質を中心とする生体分子の相互作用の結果として「分子の言葉」で理解することを目標とした研究を進めている。

- (1) タンパク質と低分子RNAの発現プロファイルと相互作用を解析するためのプロテオミクスの新技

術開発。上記の研究を進める目的で、最新のバイオテクノロジーやゲノム/プロテオーム情報処理技術を融合した基礎技術の開発を行っている。現状では、細胞や組織に存在する数千種類のタンパク質をフェムトモル (10^{-15} モル) レベルの領域で高速に解析できるようになっている。また、この技術を基礎にして、最近の研究で細胞の機能制御に重要な役割をもつことが明らかになった低分子 RNA とタンパク質の複合体を解析するための方法論の開発を進めている。

- (2) タンパク質の翻訳後修飾についての研究。遺伝情報にしたがって細胞内で合成されたタンパク質は、「プロセッシング」と呼ばれるポリペプチド鎖の切断や、糖鎖や脂肪酸の付加、リン酸化などの「翻訳後修飾」によって細胞内での機能が調節されている。生物化学研究室では、ゲノム解析の完了した線虫やマウスなどをモデル生物として、タンパク質の翻訳後修飾の実態を最先端のプロテオミクス技術によって大規模に解析することで、ゲノムとプロテオーム、生命現象との関わりを明らかにするための研究を進めている。
- (3) 胚性幹細胞 (ES 細胞) の分化調節機能に関する機能プロテオミクス研究。再生医療などで注目される ES 細胞が多分化能を維持し、刺激によって特定の細胞系譜に分化する仕組みを、プロテオミクスと細胞生物学の最新技術によって解析している。
- (4) 脳神経系の情報伝達機構についての研究。神経細胞をはじめとするさまざまな細胞が、環境変化に応答して情報を伝達する「シグナル伝達ネットワーク」の実態を、細胞運動を調節するタンパク質ネットワークの解析に焦点をあてて、プロテオミクスや遺伝子工学、細胞工学などの方法によって解析している。
- (5) 細胞が分裂増殖する時には、数十本もの染色体がひとつの間違いもなく二つの細胞に一斉に分配される。この複雑精緻な生命現象を担うセントロメアの構造と機能の全容を明らかにするために、プロテオミクスによってセントロメア構成タンパク質を同定し、ノックアウト細胞を構築して同定したタンパク質の機能解析を行っている。数十種類のタンパク質が絡み合う高度な機能制御ネットワークの解明へ向けて研究を進めている。

* 戦略研究センター所属

⑦ 物性物理化学研究室

教授：菊地 耕一 准教授：藤田 渉 助教：兒玉 健

ホウ化マグネシウム超伝導体、鉄砒素系超伝導体など新しい超伝導体が発見され、世間から注目されています。一方、有機物やサッカーボールの形をした C₆₀ などを用いて、磁性や光物性などの多機能性を兼ね備えた新しいタイプの超伝導体をめざした開発も盛んに行われています。新しい物質開発は人類の未来にとって重要であることは間違いありません。当研究室では、このような新しいタイプの超伝導体、分子磁性体、フラーレンを用いた複合機能性物質などを、新しい視点に立ち、合成からスタートし、新たな物質のコンセプトに繋がるような新規物性を開拓することを目指しています。主な研究を以下に示します。

- (1) 分子性超伝導体に関する研究：有機物は構造や物性はバリエーションに富み、酸化物に匹敵するような高温超伝導体の出現が期待できます。また、官能基を付加することにより、光機能、磁性などを兼ね備えた多機能超伝導体をつくることも可能です。当研究室ではこれまで3つの分子において分子性超伝導体を開発することに成功しています。最近では、新たな分子性物質の合成、構造解析、物性測定を行い、超伝導出現に関連するキーパラメータの解明とともに、転移温度の高い分子性超伝導体、多機能分子性超伝導体の開発に取り組んでおります。
- (2) 分子性磁性物質の物性探索：環状チアジラジカルは、有機と無機、分子とポリマーの境界上に位置するとでもいふべき、非常に特異な性質を持っています。化学的安定性と強い分子間相互作用という、半ば相反する性質を持ち合わせ、結晶中では短い S···S あるいは S···N 原子間接触により、

多次元的な結晶構造をしばしば見せます。我々は、これまでの研究により、室温磁気双安定性、光誘起相転移、有機強磁性、分子間強磁性的相互作用に関する新規スピン分極機構、モット絶縁体に対する化学ドーピングと高電気伝導性、2重融解、電子移動相転移など、さまざまな特性を見出しています。

- (3) フラーレン類の分子物性と応用研究：C60 をはじめとするフラーレンやナノ・チューブは次世代の炭素デバイスとして着目されています。特に、C100 などの巨大フラーレンや金属元素を含む金属内包フラーレンの NMR などによる構造解析、磁氣的性質など基礎的性質の解明により、フラーレンを用いた機能性物質の開発を行っています。最近では、フラーレン内部の金属元素の運動や電子状態に関する研究を行っています。また、フラーレンの化学修飾や配列化により、新たな物性を示す物質の開発もを行っています。
- (4) Chiral な磁性体の構造研究：キラルな分子性磁性体は、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。当研究室ではキラルな磁性体の構造を制御することにより、キラルな磁性体に特徴的な物性制御することを目指した研究を行っています。

⑧ 分子集合系物理化学研究室

教授：加藤 直 准教授：好村 滋行 助教：川端 庸平

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

(1) 両親媒性分子集合体の平均構造とダイナミクス

両親媒性分子は水との親和性が正反対の2つの官能基を有しているため、水中では分子同士が一定の方向に配向し、条件に応じて多様なモルホロジーと機能を持った集合体を形成する。本研究室では、静的・動的散乱、小角光散乱 (SALS)、X 線小角散乱 (SAXS)、中性子小角散乱 (SANS)、中性子スピンエコー (NSE)、光学顕微鏡観察、ずり流動場下の SANS、SAXS、SALS、およびレオロジー測定等の手法を駆使することにより、広範囲の空間および時間スケールにわたって平均構造とダイナミクスの両面を調べている。最近の研究課題を以下に挙げる。

1. 界面活性剤リオトロピック液晶相・ゲル相を含む相分離過程の形態ダイナミクス
2. 界面活性剤濃厚ミセル相・ラメラ相の構造と流動場誘起転移
3. 脂質キュービック相の構造安定性に対する電解質の効果

(2) ソフトマターの理論的研究

高分子、液晶、両親媒性分子、コロイドなどのソフトマターと呼ばれる物質を対象とする研究は、非線形や非平衡科学の新しい問題と密接に関連している。これらの物質に共通する点は、メソスコピックなスケールの内部構造が存在することであり、粗視化された現象論的な物の見方が重要になる。本研究室では、ソフトマターの構造、相挙動、ダイナミクスについて、解析的手法や計算機シミュレーションを用いて研究を行っている。

⑨ 反応物理化学研究室

准教授：城丸 春夫 助教：松本 淳

金属・半導体クラスターや巨大分子系のようなナノ構造体において、励起エネルギーが物質内でどう分散されていくか、といった分子内エネルギー散逸過程は、いまだ未知な部分が多く残されている研究領域である。本研究室ではこうしたマクロな物質系とミクロな物質系にまたがる物質系（ナノ物質系）における励起、脱励起過程の問題について研究を進めている。そのための実験手法として、巨大分子でさえも長時間、安定に蓄積できる静電リング型イオン蓄積装置とレーザーイオン分光の手法を組み合わせ用いている。さらに、分子の構造や化学反応過程について、他の実験手法では得ることの出来ない情報をもたらす多価イオン衝突実験装置をもちいて、比較的簡単な分子イオン系の解離過程や分子構造解明の研究を行っている。

(1) 真空中に孤立した巨大分子イオンの分光と衝突実験

クラスターをはじめとする巨大分子イオンのビームを静電型イオン蓄積リングに周回させ、レーザー分光や衝突実験を行っている。真空中でイオンが徐々に冷却する過程をイオンのサイズの関数、内部温度の関数として調べるとともに、冷イオンの振動、電子状態や反応性を明らかにすることを目的としている

(2) 多価イオン衝突によるクーロン爆発実験

ECRイオン源から引き出した多価イオンと分子、クラスターの衝突実験を行い、多電子移行反応によって生成した多価分子イオンの超高速分解（クーロン爆発）過程および低価数分子イオンのイオン対解離過程を研究している。爆発断片の飛跡を詳細に解析することにより、多価分子イオンの解離ダイナミクスやターゲット分子の構造（スナップショット）を得ることを目的としている。

(3) イオンビーム技術の開発

上記目的のため、イオンビームの制御やイオン検出の技術開発を行っている。

(4) 凝縮系における高密度励起実験

新規炭素ナノ物質の合成を目的として、レーザーや高エネルギーイオンビームによる液体標的の高密度励起実験を行っている。

⑩ 有機合成化学研究室

教授：清水 敏夫 准教授：佐藤 総一 助教：平林 一徳

最近の有機合成化学では、従来困難または不可能であった反応を高い官能基選択性、位置選択性およびエナンチオ選択性で実現させることに期待がよせられており、これらが重要な課題となっている。高度な機能や選択性の開発は、近年では高周期典型元素化合物、有機金属化合物および遷移金属錯体の特性を巧みに活用することによって成し遂げられており、特に第3周期以降の高周期典型元素を利用する新しい有機化学の分野、すなわち“高周期有機典型元素化合物の化学”が注目を集めている。有機合成化学がさらに発展するためには、有機合成化学を基盤とした高周期典型元素化合物の合成、構造および反応性に関する基礎的研究が益々重要である。当研究室では、有機合成化学を基盤として、構造有機化学や理論化学（分子軌道法を用いた理論計算）を駆使することにより、新規な高周期典型元素化合物（主に高周期第16族元素化合物）の合成、構造、反応の研究およびそれらの特性を利用した新規合成反応の開発を行っている。最近行っている主な研究テーマは以下のとおりである。

(1) 不飽和カルコゲノクラウンエーテルの合成と選択的包接挙動

主に高周期第16族の硫黄およびセレンを含む不飽和カルコゲノクラウンエーテルを対象として、

それらの合成法を確立すると共に、その構造および反応性を明らかにすることを目的としている。高周期カルコゲン元素がソフトであること及び環サイズの違いを利用して、ソフトな遷移金属イオン等の選択的な包接を実現し、新しい反応場を構築する。

(2) 高周期元素で架橋した大環状化合物の合成と包接挙動

高周期第 16 族元素で架橋（カルコゲニドやジカルコゲニド等）した大環状芳香族化合物の合成、構造と分子の取り込みを対象として研究を行っている。

(3) 高周期元素化合物の反応性評価システムの構築

主に高周期第 16 族の硫黄、セレンおよびテルル化合物を対象として、反応基質に対して同族のどの周期の元素化合物の反応性が高いかを NMR 等を駆使して簡便に調べるシステムを構築することを目的として研究を行っている。

(4) 超原子価カルコゲン化合物の合成と構造

第 3 周期以降の典型元素は容易に原子価拡大し、超原子価化合物になることが知られている。一般に超原子価化合物は電気陰性度の大きな置換基を有することが安定化の要因の一つであるが、当研究室では炭素リガンドのみを有する超原子価有機カルコゲン化合物（4～6 配位）の合成と構造に焦点を当てて研究を行っている。

(5) ルイス酸触媒によるカルコゲン化合物を用いた炭素—炭素結合形成反応の開発

カルコゲン化合物を用い、ルイス酸を触媒とした新規合成反応の開発を目的としている。ルイス酸は、カルボニル化合物等と相互作用し、種々の求核剤とカルボニル化合物等との反応を促進することが知られている。当研究室では、求核剤にカルコゲン化合物を用いることにより、カルコゲン化合物の特性による新たな反応性や選択性の発現を期待し研究を行っている。

⑪ 理論・計算化学研究室

教授：波田 雅彦 准教授：橋本 健朗

従来の実験・理論の枠組みにとらわれず、コンピューターを道具として、自然現象を解明する新たな研究領域が急速に発達しています。本研究室では、電子相関理論や相対論を考慮した精密で新しい量子化学の理論を構築し、同時に計算効率の高い実用的な解法を開発しています。また、電子状態理論・化学動力学理論などに基づき、原子・分子およびそれらの集合体で起こる現象を、ミクロな視点で解析・予測する、理論分子科学・計算分子科学の研究を行っています。国内外の実験グループと密接に協力しながら研究しており、数値的な実験の解析だけでなく、なぜそのような実験結果を与えるかというシナリオの提供や、実験で何がどの程度の値で測定できるかを定量的に予測することによって実験を先導することを目指しています。

(1) 核磁気共鳴 (NMR) や分子磁化率など分子の磁気的物性の研究

(2) 有機金属化合物や遷移金属錯体を用いた化学反応、特に反応性や選択性

(3) 相対論的量子論に基づく分子理論の開発

(4) 多次元精密振動解析理論の開発と地球惑星大気分子・星間分子研究への応用

(5) クラスタ・表面・生命関連分子の計算化学

研究室の WEB Site は、<http://www.metro-u.ac.jp/~hada/index2.html> です。

⑫ 同位体化学研究室

准教授：久富木 志郎 助教：秋山 和彦

同位体化学研究室はメスバウアグループとフラーレングループから構成されています。メスバウアグループでは主として鉄メスバウア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います。また、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ます。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います。以下に各研究グループの研究内容の詳細を示します。

テーマ1) メスバウア分光法を用いた機能性材料のキャラクタリゼーション：

メスバウア効果は ^{57}Co などから発生する γ 線を利用した共鳴吸収現象です。この手法によって、鉄イオンなどのメスバウア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ます。この特徴を生かし、メスバウア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ます。最近取り組んでいる研究テーマ名は以下のとおりです。

- 1) バナジン酸塩ガラスの顕著な導電性上昇の要因解明
- 2) 鉄－マグネタイト混合体によるトリクロロエチレン分解機構の解明
- 3) 鉄イオン含有ケイ酸塩の構造と水質浄化作用との相関解明

テーマ2) 放射性同位元素を用いた金属フラーレン研究：

サッカーボール型分子 C_{60} 等に代表されるフラーレン分子内部に金属原子を取り込んだ金属内包フラーレンは電子デバイスや医薬品としての応用が期待される分子の一つです。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す。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ます。

- 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