

2015（平成27）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28年3月定年退職予定であることを示します。◎印は平成29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 助教：山下健一

無機化学研究室では、(1) 特異な π 電子系配位子の設計と合成、それらを用いた金属錯体の合成研究、(2) 規な炭素材料の化学に関する研究を行っている。無機物質は、一般に、多様な電子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。この両者を組み合わせることにより、無機物や有機物のみでは実現することが出来ない特異な性質を発現できると期待される。特に、有機配位子の π 電子系の操作は、金属の性質の精密チューニングに効果的である。具体的には、以下の二つのテーマを遂行することにより、新しい無機物質科学の開拓を目指している。

(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、拡張された π 電子系配位子と、それと強く摂動した金属の性質に由来している。この分子系で知られている知見をもとに、生命機能を凌駕し得るような新物質の開発を目指す。具体的には、母体のポルフィリンの骨格を変化させること、あるいは特異な官能基を導入することによって、配位子の分子軌道を変化させ、挿入する金属の性質を変化させる。研究を遂行するにあたっては、研究室で開発された独自の化学反応を用いることを目指すとともに、標的とする化合物には、特異な酸化還元挙動、あるいは新しい軸配位挙動の発現を期待する。

(2) 構図が明確な多環芳香族化合物の合成研究

炭化水素、とりわけ芳香族性を有した多環芳香族化合物(PAH)は多彩な性質を示すことから、無機化学-有機化学-材料科学等の境界領域で扱われている。これらの物質の中で、分子構造が明確なものを取り扱う際には、合成化学の力を最大限発揮する必要がある。当研究室では、出来るだけ多くの6員環を有するPAHを標的化合物とし、特に酸化還元に対して活性な性質を有する分子の設計と合成を当面の目標に掲げている。ここで得られたPAHは、将来、金属錯体の配位子として用いることも予定している。

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.comp.tmu.ac.jp/chem/in1/jp/index_jp.html

② 環境・地球化学研究室

教授：竹川 暢之 准教授：藤野 竜也

環境・地球化学研究室では、大気化学および分光分析に関する研究を行っている。特に、大気中に浮遊する微粒子(エアロゾル粒子)が主要な研究テーマの一つである。エアロゾル粒子の直径は数nmから10 μ 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PM2.5もその一部である。エアロゾルは大気汚染物質であると同時に、太陽光を遮ることで地球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、その放射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

刻々ダイナミックに変化している。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である。我々は、レーザーや質量分析技術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目指している。

また、金属や磁性粒子を利用した機能性マトリクスを開発することで、特に生理活性物質の高感度・効率的なレーザーイオン化法の開発を行っている。

(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。これまで開発してきたエアロゾル計測装置を用いて東京で大気観測を実施し、広域二次生成の寄与率やプロセスを明らかにする。

(2) ナノ粒子ビーム生成技術の開発と組成分析への応用

エアロゾル数濃度を決める要因として、硫酸クラスターを核としたナノ粒子生成（新粒子生成）が重要と言われているが、未解明の点が多い。ナノ粒子の組成変化を実時間計測するために、エアロダイナミックレンズを用いた粒子ビーム生成技術を開発している。粒子ビーム中におけるナノ粒子の拡散や熱力学過程について理論検討を行い、実験による検証を試みる。また、質量分析計と組み合わせで装置全体としての評価も行う。

(3) レーザーイオン化法における機能性マトリクスの開発

分子の包接特性や酸化物固体表面を利用し、従来法ではイオン化・検出が出来なかった分子、特に低分子量の生理活性物質や禁止薬物のレーザーイオン化法による検出を行っている。生理活性物質や禁止薬物などの代謝物を尿などから直接的に前処理なく検出できる手法の開発を目指している。

③ 宇宙化学研究室

教授：海老原 充◎ 准教授：大浦 泰嗣 助教：芝本 幸平、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、熔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。

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：稲垣 昭子、佐藤 総一、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、炭素-炭素結合形成などの精密合成反応を達成する上で重要な鍵を握る反応性の高い有機金属化学種の合成と反応化学に関する研究、光を駆動力とする合成プロセスを構築する新しい有機金属光触媒の開発、優れた光・電子機能を発現する新しい π 共役系化合物群の合成と特性解析にも取り組んでいます。

(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・特性解析：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。

内容：有機金属化学、有機合成化学、構造有機化学、反応有機化学、分子触媒化学、有機金属光触媒、有機典型元素化学、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

研究室の Web Site は、<http://www.comp.tmu.ac.jp/tmuorg/>です。

⑥ 生物化学研究室

教授：廣田 耕志 助教：田岡 万悟

生物化学研究室では、生化学手法と遺伝学手法を融合した新しいアプローチで、有用な化学物質（薬のシーズとなるケミカル）の探索や、毒性化合物の評価方法を開発する研究を行っています。特に中心的に進めているのは、遺伝情報を担う DNA をと作用する化合物や DNA の修復を行うタンパク質に作用する化学物質の解析です。DNA は染色体中に「クロマチン」という形でコンパクトに格納されています。DNA との相互作用を必要とする化学反応（転写や複製、修復など）の際には、クロマチンは反応因子のアクセスの障害となり、反応時にはクロマチンをオープンにする仕掛けが存在します。生物化学研究室では、「クロマチン」が果たす様々な役割や制御の仕組みについても研究を行っています。生物化学研究室では、分裂酵母やニワトリ B リンパ球 DT40 細胞を用いた分子生物学や、精製タンパク質と化学物質や合成人工 DNA を用いた生化学を学ぶことが出来ます。さらに、安定同位体を利用した新しいプロテオミクス手法 (SILAC) と遺伝学的手法を融合させた新しい方法での網羅的なタンパク質の同定や定量、細胞表面タンパク質の新たな精製法の開発と網羅的な解析に挑戦しています。また、プロテオミクスの技術開発の経験を活かし、最近ではさまざまな細胞内装置に含まれる機能性 RNA の実態を直接解析できる質量分析法の開発も進めています。主要なテーマは以下のようです。

- (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ます。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ます。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ます。
- (2) タンパク質の翻訳後修飾についての研究。近年 DNA が損傷した時、タンパク質がユビキチン化と呼ばれる翻訳後修飾が誘導され、この修飾が DNA の修復に必須の働きをすることがわかってきました。しかし、ユビキチン化の標的となるタンパク質は未知のままです。ユビキチン化修飾経路の全貌解明のために、遺伝学手法とプロテオミクス手法を融合させた方法 (SILAC) を用いて、解析を進めています。また、その他にも「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、リン酸化など様々な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ます。
- (3) ノンコーディング RNA 転写と共役するクロマチン再編成機構の解明。近年、タンパク質をコードしないノンコーディング RNA が予想以上に多く存在することが明らかとなり、その機能に注目が集まっています。当研究室では、世界に先駆けて、ノンコーディング RNA の転写によってクロ

マシン再編成が誘導されることを発見しました。このノンコーディング RNA 新機能の分子メカニズムの解明を目指しています。

- (4) 損傷した DNA の修復には多くの分子メカニズムが携わっています。ニワトリ B リンパ球 DT40 の遺伝学（野生型と変異体の比較を行う方法）手法で、新規の DNA 修復機構の発見や、各修復メカニズム間の関係を解明します。
- (5) 毒物検査法の改良に遺伝学手法を応用します。化学物質を網羅的に調べて、こういった構造の化合物がどのように DNA を損傷して、ガンを引き起こすのか、網羅的解明を行います。さらにこの遺伝学手法を応用して、新規の抗がん剤のシーズ化合物の探索をします。

研究室の WEB Site は、http://accafe.jp/biochem_tmu/です。

⑦ 物性物理化学研究室

教授：菊地 耕一 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) 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行っています。
- (3) 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. 界面活性剤クラフト転移に伴う形態ダイナミクス
2. 界面活性剤リオトロピック相の構造に対するずり流動場効果

(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

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 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実現は、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) 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 助教：阿部 穰里

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シュレーディンガー方程式が提案された直後から現在まで途切れなく続けられており、量子化学・理論化学・計算化学という研究分野を成立させました。最近では、コンピューターの飛躍的な発達にともない、複雑な化学現象の精密な理論的予測が可能となってきました。実社会でも、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、化学計算シミュレーションが活用されつつあります。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.comp.tmu.ac.jp/qc/>、及び、<http://www.comp.tmu.ac.jp/cc/>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ー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) メスバウアー分光法を用いた機能性材料のキャラクタリゼーション:

メスバウアー効果は ^{57}Co などから発生する γ 線を利用した共鳴吸収現象です。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できます。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-酸化鉄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フラーレンや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も目指しています。

- 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