

## ① 錯体化学研究室

教授：杉浦 健一 准教授：石田 真敏

錯体化学研究室では、(1) 新規な不斉配位子を用いた金属錯体の合成、(2) 新規な多環芳香族化合物の合成、および(3) 錯体を基盤とした光機能性材料に関する研究を行っている。金属錯体は、一般に、多様な酸化/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 $\pi$ 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、以下の三つのテーマを遂行することにより、新しい錯体化学の開拓を目指している。

### (1) 不斉配位子の設計と合成、及び金属錯体の合成

不斉な配位子を有した金属錯体は、特異な分光挙動を示すことが知られている。中でも、発光過程において円偏光を発する場合があり、このような光には様々な応用が提案されている。この研究では、金属の電子系に大きな不斉摂動を与えることを目的として、 $\pi$ 電子系が拡張された不斉配位子に注目し、新規な配位子とそれらを用いた金属錯体の合成に取り組んでいる。

### (2) 構造が明確な多環芳香族化合物の合成研究

多環芳香族炭化水素 (PAH) は多彩な性質を示すことから、無機化学-有機化学-材料化学等の境界領域の化学として興味もたれている。当研究室では、新しい合成手法を用いて、出来るだけ多くの6員環を有する PAH の合成にチャレンジしている。ここで得られた PAH について、分光学的、あるいは酸化還元挙動を明らかにするとともに、金属錯体の配位子としての利用も評価する。

### (3) 金属イオンの配位をカギとする機能性色素の開発

機能性色素は、分子固有の光物性を利用した光電変換デバイスや医療診断プローブ、有機発光ダイオード等の様々な先端光機能材料の開拓において鍵となる物質であり、中でも波長 700–2500 nm の近赤外 (Near-Infrared: NIR) 領域の低エネルギー光に応答する機能性色素の開発に関心が寄せられている。本研究では、金属 d 電子軌道を活用する巨大  $\pi$  共役錯体分子の合成化学を基軸として、高い近赤外光捕集能を示し、特異な発光・発熱・光増感能を有する多機能性色素の開発を目指す。

## ② 環境・地球化学研究室

教授：竹川 暢之 助教：三澤 健太郎、芝本 幸平

環境・地球化学研究室では、大気化学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  $\mu\text{m}$  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 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。

#### (1) 二次エアロゾル生成過程に関する研究

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

#### (2) ナノ粒子組成分析計の新規開発

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

### ③ 無機化学研究室

教授：山添 誠司 准教授：大浦 泰嗣 助教：吉川 聡一

無機化学研究室では、クラスターを中心とした機能性材料の開発に関する研究及び宇宙・地球物質といった無機物質の元素分析に関する研究を行っている。機能性材料の開発では、金属原子 100 個以下で構成された金属及び金属酸化物クラスターを新規に合成し、その幾何構造、光学特性、熱的性質の解明およびこれら材料の触媒・デバイス応用を行っている。また、X線吸収分光法を中心とした放射光分光により、これらクラスター材料の機能発現機構の解明を幾何構造・電子状態の観点から進めている。無機物質の元素分析に関する研究では、放射化分析法や誘導結合プラズマ (ICP) 質量分析法や ICP 原子発光分析法を用いた元素分析を通して、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の解明を行っている。最近の研究テーマを以下に示す。

#### (1) 金属クラスターの精密合成とその触媒・デバイス応用

100 原子以下で構成される金属クラスターは対応するバルク金属やナノ粒子とは異なる幾何構造、電子状態を取るため、新しい機能性材料の構成単位として注目を集めている。本研究室では有機分子を保護材とした配位子保護金属クラスターを新規に開発し、クラスターに特有な幾何構造、光学特性、熱的性質、触媒作用を原子レベルで明らかにする。さらに得られた知見を基に、革新的な触媒、光学材料、デバイス材料の開発を目指している。

#### (2) 金属酸化物クラスターの塩基触媒応用

アニオン性の金属酸化物クラスターは酸触媒、酸化還元触媒、光触媒として広く研究が行われている。本研究室では多価アニオン金属酸化物クラスターが示す塩基触媒作用に着目して研究を進めている。金属クラスターのサイズや構成金属元素により塩基点として機能するクラスターの表面酸素原子の電荷密度を制御することで強塩基性を示す新しい金属クラスター触媒の開発を行う。さらに、多価アニオン金属酸化物クラスター触媒の高いルイス塩基性を利用して二酸化炭素を活性化し、二酸化炭素を有用な分子へと変換する触媒反応系を開発する。

#### (3) 放射光分光を用いた構造解析

非晶質の配位子保護金属クラスターの幾何構造を明らかにするために、X線吸収分光法や高エネルギーX線回折法といった放射光分光を駆使した新しい構造決定手法の開発を行う。また、X線吸

収分光法と他の分析法（紫外可視吸収分光法、赤外線吸収分光法、ガスクロマトグラフィー、質量分析法等）を組み合わせたオペランド分光により、触媒反応中や機能発現中におけるクラスターの幾何構造や電子状態の *in-situ* 測定を行い、触媒作用や機能発現機構を解明する。

#### (4) 放射化学的手法を用いた研究

キーワードは放射性核種である。放射性核種は上手に利用すると様々な情報を与えてくれる。放射性核種を利用する放射化分析法を駆使して様々な試料に対して非破壊的により多くの元素の定量を行ない、元素組成からいろいろな情報を読み解く。また、宇宙物質や環境物質等に含まれる天然ならびに人工放射性核種をγ線スペクトロメトリーや加速器質量分析法を用いて定量し、天然における核現象や放射性核種の環境動態に関する研究を行なう。これらの研究に必要な元素分析や同位体分析の手法の開発も行なう。これらを通じて、物質の過去を読み解き、未来を予測する。

#### (5) 惑星形成過程における親鉄・親銅元素の分別挙動に関する研究

地球のような分化した惑星物質は、微惑星集積後の熔融過程を経て核・マントル分離や地殻形成等の分化過程を経て現在に至っている。核・マントル分離や地殻形成における親鉄・親銅元素の挙動に注目し、岩石・隕石中のこれらの元素存在度を正確に求め、地球、月、火星や小惑星の形成過程を考察する。そのために、元素存在度を高感度・高精度に測定する分析方法の開発に関する研究も行っている。

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

## ④ 有機構造生物化学研究室

教授：伊藤 隆 准教授：池谷 鉄兵 准教授：西長 亨

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、電子顕微鏡単粒子解析、核磁気共鳴（NMR）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。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。また、生体高分子における水素結合の性質の解析に向けた NMR の新手法の開発にも取り組んでいる。

#### (2) 動的な生体高分子複合体の構造解析

機能が異なる複数のドメインを数珠繋ぎに結びつけることで、活性制御などの新たな機能を付加するデザインは自然が頻繁に行う戦略であり、真核生物では全蛋白質の約 3/4 がマルチドメイン蛋白質である。マルチドメイン蛋白質は柔らかなリンカーをもつため、通常 X 線結晶解析などによる解析が困難であり、NMR による解析が大いに期待されている。当研究室では、多様な生物活性を担っている様々なマルチドメイン蛋白質の NMR 解析を進めている。またそのために必要な試料調製法、測定法の開発も鋭意行っている。

#### (3) 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安定同位体標識、②NMR 測定の感度増大、③データ処理および解析のための新しい計算科学的手法、④NMR 測定中の細胞の生存と維持、の 4 つの要素技術の確立が必須である。当研究室では、既に生きた原核細胞、真核細胞中の蛋白質の立体構造やダイナミクスの詳細な 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。

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

## ⑤ 有機化学研究室

教授：野村 琴広 准教授：Abdellatif Mohamed M.、稲垣 昭子 助教：下山 大輔

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、非可食の植物資源から分解・ケミカルリサイクル可能な高分子機能材料の開発に関する研究、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

独自の効率炭素-炭素結合形成手法を基盤とした精密合成手法の特徴を活かして、非可食の植物資源から分解・ケミカルリサイクル可能なバイオベース高分子機能材料や優れた光・電子機能を持つ $\pi$ 電子系化合物などの機能集積型の新規材料の設計・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

研究室の Web Site は、<http://tmu-orgchem-lab.com/>です。

## ⑥ 生物化学研究室

教授：廣田 耕志 准教授：田岡 万悟 助教：阿部 拓也

生物化学研究室では、遺伝情報を担う染色体 DNA の安定維持機構の研究（廣田・阿部グループ）とタンパク質や RNA 分子の独自の質量分析法による研究（田岡グループ）を行っている。当研究室では、分子レベルでの生体内反応の理解を基盤として、新しいバイオテクノロジーの創生、新規医薬品やガン治療法の創生、化学物質の毒性評価法開発などを目指して研究を進めている。

染色体 DNA の安定維持機構の研究（廣田・阿部グループ）

1. 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る。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する。当研究室では、分裂酵母を真核細胞のモデルシステムとして用い、クロマチンが果たす様々な役割や制御の仕組みに関わる基盤的研究に取り組んでいる。
2. DNA 損傷は外的要因（放射線や紫外線など）や内定要因（代謝により発生する活性酸素など）によって、大量に発生している。当研究室では、培養細胞（ニワトリ細胞とヒト細胞）を用い、遺伝子破壊や変異導入によって DNA 損傷応答に関わる遺伝子の変異体細胞を作製している。作製した変異細胞の DNA 損傷応答を解析することで、様々な DNA 損傷応答タンパク質の機能について解析を進めている。DNA 損傷応答に関わるタンパク質の機能や、それらタンパク質間の関係性の理解を通じ、染色体の安定維持機構の解明に取り組んでいる。

タンパク質や RNA 分子の質量分析法による研究（田岡グループ）

1. RNA とタンパク質の相互作用を解析するための新規法を開発している。開発した解析法を通じて RNA の代謝異常に起因するヒト難治性疾患の細胞で、RNA-タンパク質複合体の細胞内での役割や病理との関連性を研究している。
2. さまざまな RNA の転写後修飾の実態を明らかにするための質量分析法の高感度化に取り組んでいる。高感度な方法を利用して、新規な転写後修飾の発見や定量、細胞内での代謝を研究している。

研究室の WEB Site は、<https://khirota9.wixsite.com/website> です。

## ⑦ 物性物理化学研究室

教授：廣瀬 靖

物性物理化学研究室では、パルスレーザー堆積法やスパッタリング法などの薄膜成長プロセスを用いた無機固体材料の開発に取り組んでいます。①低温非平衡下での結晶成長、基板との化学結合による構造安定化や応力の印加、人工超格子などの積層構造制御といった薄膜合成の特長を活かした準安定物質の探索、②合成した薄膜の化学組成や結晶構造、各種物性の評価に基づく機能発現機構の解明、③積層膜や微細加工を利用した電子デバイスやエネルギー変換デバイスへの応用の3つが研究の大きな柱です。主な研究対象は酸化物や窒化物ですが、酸窒化物や酸フッ化物をはじめとする複合アニオン化合物の合成や機能探索にも取り組んでいます。最近の代表的な研究テーマをいくつか紹介します。

### (1) 透明導電性酸化物のエレクトロニクス応用

可視光に対して透明で高い電気伝導性を示す透明導電性酸化物は、太陽電池やフラットパネルディスプレイなどの光デバイスの透明電極として広く利用されています。既存材料の課題である紫外光や近赤外光に対する透明性に優れた材料を開発し、高効率太陽電池や深紫外LEDをはじめとする次世代光デバイスに応用することを目指しています。また、透明導電性酸化物の母材であるワイドギャップ酸化物半導体の開発や、薄膜トランジスタやセンサーへの応用にも取り組んでいます。

### (2) 複合アニオン化合物の電子機能開拓

金属酸化物はカチオンの置換や複合化により多彩な機能や化学的な活性を示しますが、アニオンである酸素の置換や複合化に基づく機能開拓や物性研究は発展途上です。薄膜成長プロセスを用いた低温合成によって複合アニオン化合物の高品質な薄膜を合成し、可視光吸収が可能な強誘電体、高効率な太陽光水分解光触媒、希少元素や有害元素を含まない熱電変換材料などの機能材料の開発を試みています。

### (3) 結晶中の原子配列制御技術の開発

固体化合物の性質や機能は結晶中の原子配列と密接な関係があります。熱、光、電場、応力などの外場を利用して薄膜結晶中の原子配列と物性を制御し、メモリやスイッチに応用するための研究をしています。特に、固体中のアニオン配列(=金属イオンの配位環境)に注目し、可逆的に制御可能な材料や手法の開発に挑戦しています。

## ⑨ 反応物理化学研究室

教授：歸家 令果 助教：奥村 拓馬 助教：松本 淳

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す。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ます。そして、そのために電子線・レーザー光線・イオンビーム・X線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にしています。以下に近年の主な研究例を示します。

### (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気体電

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ます。この手法によって、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ます。

- (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ます。
- (3) 時間依存電子衝突物理学の開拓： 超短レーザーパルス光を用いて、電子線と標的原子・分子との散乱過程に超高周波の電場変調を印加することによって、散乱電子ダイナミクスや原子・分子内の電子分布変化の情報を得る実験手法を開発し、時間依存の電子衝突物理学を開拓します。
- (4) 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を測定します。さらに、光励起された捕捉イオンの構造変化を実時間測定します。
- (5) 多価イオン衝突による分子解離過程の研究： 電子が多数剥ぎ取られた多価イオンを標的分子に衝突させることによって、標的分子から電子を捕獲させ標的分子のクーロン解離を引き起こします。そして、解離イオンの運動量ベクトル相関から、標的分子がどのような反応経路で解離していくのかを解明します。
- (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： 新たに開発した卓上静電型イオン蓄積リングを用いて、分子イオンビームを長時間周回運動させることによって、分子の振動状態や電子状態といった内部エネルギー状態の緩和過程を解明します。
- (7) 超伝導転移端センサーマイクロカロリメーターによる高分解能 X 線分光： 超伝導転移端センサーマイクロカロリメーター (TES) は、従来の検出器を超える高いエネルギー分解能と高い検出効率を両立可能な最先端の X 線検出器です。この TES 検出器をエキゾチック原子・分子をはじめとした様々な系に応用し、これまでの X 線分光では見えなかった新たな物理化学の解明を目指します。

## 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、構造および反応性に関する研究を行っている。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

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。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目的

とする。

(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。孤立電子対を有する 16 族元素を多く含む大環状化合物による有機分子の選択的包接を目的としている。

(3) カチオン部位が集積したイオンの合成、構造と反応性

分子内にスルホニウム部位を複数個有する環状および非環状化合物を合成し、その構造を明らかにすると共にカチオン部位（スルホニウム部位）の集積が物性や反応性にどのような影響を与えるかを明らかにすることを目的としている。

## ⑪ 理論・計算化学研究室

准教授：中谷 直輝

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) 電子相関理論、及び、相対論的量子化学理論の構築やソフトウェア開発

(2) 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

(3) 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の起源の解明

(4) 星形成過程における分子の化学進化や元素の同位体濃縮メカニズムの研究

(5) 吸収・発光スペクトルの計算解析による光化学現象の解明や光学材料の設計

(6) 分子における電荷共役・パリティ反転（CP）対称性破れの量子化学的研究

研究室の WEB Site は、<http://www.comp.tmu.ac.jp/theochem> 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る。メスバウアーグループでは鉄およびスズ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る。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なう。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  $^{57}\text{Co}$ 、 $^{119\text{m}}\text{Sn}$  等から発生する  $\gamma$  線を利用した共鳴吸収現象である。この手法によって、鉄およびスズイオン等のメスバウアー吸収核とその周辺にあるイオンとの間の化学結合の強さや電子の分布の偏り、磁氣的相互作用の有無などを非破壊で知ることができる。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をはじめとする機能性ガラス・セラミックスの組成－機能－物性の相関解明を行っている。近年取り組んでいる研究テーマ名を以下に示す。

- 1) 導電性ガラスの特性と構造の相関解明と二次電池電極としての応用
- 2) 鉄およびスズイオン含有ケイ酸塩の可視光応答光触媒効果と構造の相関解明と環境浄化光触媒としての応用
- 3) 酸化鉄および酸化スズナノ粒子の合成とその機能性材料としての応用

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  $\text{C}_{60}$  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る。

- 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

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