

① 錯体化学研究室

教授：杉浦 健一

錯体化学研究室では、(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) 新規な不斉配位子の設計・合成と金属錯体の合成、(3) 新規な炭素材料の化学に関する研究を行っている。金属錯体は、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) 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。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) 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。当研究室では、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、 π 電子系が拡張された不斉配位子に注目し、配位子とそれらを用いた錯体の合成に取り組んでいる。

(3) 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。

② 環境・地球化学研究室

教授：竹川 暢之 准教授：佐藤 総一 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中心に行っている。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。

以上の分析化学系研究とともに、高周期典型元素に焦点を当てた新規化学種の発掘とその応用についても研究を行っている。

(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都市域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) ナノ粒子組成分析計の開発

エアロゾル数濃度を決める要因として、自動車や工場などの燃焼発生源とともに、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るナノ粒子組成分析計全体としての開発・評価も行う。

(3) 化学イオン化質量分析法による硫酸濃度測定装置の開発

上記の通り大気中の硫酸は粒子生成において重要であるが、極微量であるため高感度の分析法が必要である。このため、ドリフトチューブ・化学イオン化質量分析法に基づく硫酸濃度測定装置の開発を行っている。ナノ粒子組成分析法とともに実大気観測を行うことで、粒子生成メカニズムの解明を目指す。

(4) 高周期典型元素を礎にした新規化学種の創製と高機能材料の開発

高周期典型元素、中でも高周期 p ブロック元素（13～18族の第3周期以降元素群）と呼ばれる元素群は、炭素を中心とした化学を基準にすると「異常」な結合形態を数多くとることが知られる。これまで高周期 p ブロック元素を中心とした多くの新規化学種が発掘されてきたが、まだ世に知られていない結合様式を持つ新しい化学種（単に新しい化合物ではない）が数多く眠っている。当研究室では、高周期 p ブロック元素を中心とした新規化学種に焦点をあて、将来教科書に載るような新化学種の発掘を目指している。また、高周期 p ブロック元素の基礎知識を基盤にした高機能材料の基となる分子の開発も並行して取り組んでいる。

③ 無機化学研究室

教授：山添 誠司 准教授：大浦 泰嗣 助教：白井 直樹

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Lewis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

地球のように分化した惑星物質は、集積後、熔融過程を経て核・マントル分離、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、地殻形成における親鉄・親銅元素の挙動に注目し、マントル・地殻を形成する岩石中のこれらの元素の存在度を正確に求め、惑星の形成過程を考察する。また、小惑星、火星、月から飛来した隕石においても同様のアプローチを行い、親鉄・親銅元素の分別過程をもとに、惑星形成史を考察する。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/yamazoe/lab/>です。

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、西長 亨

有機化学は「炭素化合物の化学」で、「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」である有機化合物は、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手法を構築する新しい有機金属光触媒の開発、優れた光・電子機能を発現する新しい π 共役系化合物の合成と特性解析にも取り組んでいる。

(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ナケミカルズ（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、効率炭素-炭素結合形成を基盤とする手法により精密合成する。

内容：有機金属化学、有機合成化学、反応有機化学、分子触媒化学、有機金属光触媒、新しい有機高機能材料の開発、構造有機化学、有機典型元素化学、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、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チ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 (野性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、ど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 准教授：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 C_{60} 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) 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。
- (3) フラーレン・金属内包フラーレンの基礎研究：金属元素を含む金属内包フラーレンは、内包金属の性質(例えば希土類金属の磁性や発光)を生かした機能性分子としての利用が期待されています。当研究室では、金属内包フラーレンの構造や性質を分光学的手法によって研究しています。特に、金属元素を複数内包した金属内包フラーレンを対象として、内包金属間の相互作用を明らかにし、また、分子の電荷を制御することにより機能性を変化させることを目指して研究しています。

⑧ 分子集合系物理化学研究室

准教授：好村 滋行 助教：川端 庸平

高分子や液晶、コロイドなどに代表されるソフトマターの構成分子は大きく、分子が自己集合したときに、ナノスケールまたはメソスコピックな内部構造が出現する点に最大の特徴がある。そのため、ソフトマターは小さな外場で大きな構造変化を示す非線形性と、熱平衡への緩和での著しく遅いダイナミクスを兼ね備えている。このような特徴を有するソフトマターは、非線型応答や非平衡現象を調べるのに適した系である。当研究室の研究課題は、特に生命現象との関連を重視しつつ、様々なバイオ・ソフトマター系のゆらぎ、構造、ダイナミクスなどの問題を、主に物質科学の立場から解明することである。

生物は膨大なソフトマターで構築されているため、究極のソフトマター複合系であり、さらに典型的な非平衡系の一つと見なせる。一般に生体系は極めて多彩で深遠な非平衡現象の宝庫であるが、中には適切なモデル化が現象の本質的な理解につながることもある。研究室では、物質科学に理解の基盤を置きつつ、生命現象へのアプローチを試みるという立場をとる。最終的な研究目標は物質(ソフトマター)と生物(バイオマター)の境界を明らかにすることである。

以下は現在進行中の具体的な研究テーマの例である。

- (1) 生体膜における不均一構造のダイナミクス
- (2) 細胞のマイクロレオロジー
- (3) 生体組織や腫瘍のダイナミクス
- (4) 液晶などのソフトマターの構造レオロジー
- (5) マイクロマシンの非平衡ダイナミクス
- (6) 非平衡ソフトマター・複合ソフトマター

研究室のホームページ：<http://www.comp.tmu.ac.jp/colloid/>

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

E C R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

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) 分子内に複数のカルコゲニウム部位を有する化合物の合成と物性評価

カルコゲノクラウンエーテルやカルコゲン元素を有するかご型化合物をベースとして、分子内に複数のカルコゲニウム部位を有する化合物を合成し、その構造、物性および包接挙動を明らかにすることを目的として研究している。

⑪ 理論・計算化学研究室

教授：波田 雅彦 准教授：中谷 直輝 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) 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