



2023 年度

東京工業大学 理学院

化学系

Department of Chemistry
School of Science
Tokyo Institute of Technology

巻頭言

私たちの身の回りのすべては物質から成っています。私たち自身も物質で作られ、私たちの思考さえも物質の働きの一つとして理解されようとしています。物質の有り様とその変化を支配しているのは、原子・分子およびその集合体の構造と電子の振る舞いです。化学は、この「電子・原子・分子とその集合体を支配する原理」を明らかにし、この原理に基づいて新しい物質を設計・合成し、新しい物質の世界を創造することを目指す学問です。その意味で、化学は物質が関係する全ての自然科学分野の中心に位置する学問領域、すなわち「セントラル・サイエンス」であると言えます。



人類はこれまで多くの問題を科学の力で克服してきましたが、環境問題、エネルギー問題、医療問題など、新たな問題に私たちは直面しています。これらは相互に複雑に絡み合い、イデオロギー対立などに利用されることにより、安全保障問題などにもつながる深刻な問題となっています。そして、IT化とグローバル化が進んだために、これらの諸問題は私たちの本当に身近な問題になっています。これらの問題の根本は物質に関わっていると言えます。環境問題は化石燃料からの排出ガス、微粒子排出や産業廃棄物の問題などが挙げられ、これを解決するには触媒や環境負荷の少ない化学合成法の開発など物質変換の原理に基づく化学の力が必要です。エネルギー問題では、核融合技術が着実に進歩しているものの商用発電にはまだ遠く、蓄電池技術、燃料電池、光触媒の開発による水素エネルギーの実用化などが喫緊の課題です。これらの新技術の開発のためには、物質の多様性に基づく化学の基礎概念の発展と新発想の創出が不可欠です。そして、原子・分子一つ一つに機能をもたせ、有用な機能をもつ集合体を原子・分子を組み合わせることで自在に作り上げ、その電子状態を制御して有用な物質を創出することが必要です。医療問題では、感染症問題が我々の日常を一変させてしまいました。新しいワクチンや治療薬の開発には、遺伝子・タンパク質などの構造や機能の分子レベルでの解明に基づく新薬の開発が必要です。また、これらの技術はこれまで治療が難しかった重篤な病気の克服にも新たな可能性を拓いています。

化学系では、このような原子・分子とその集合体の振る舞いを支配する原理を探求し、物質の個性や多様性をより深く理解するとともに、その原理を自在に応用・展開して新分子をデザインするなど、物質科学の発展に貢献することを目的として教育・研究を行っています。カリキュラムは、皆さんが幅広い学問の基礎を身に付け、より専門的な内容を学修し、将来そのフロンティアを私たち教員、学生および国内外の研究者と協力して切り開いていけるように構成されています。また、化学コースだけではなく、エネルギーコースや物質・情報卓越教育院など多彩な教育プログラムが用意されています。研究面では、化学本来の実験・理論両面にわたる新しい手法を積極的に創出するとともに、物理学、生物学など物質の関わるさまざまな領域との融合をはかり、新分野を次々に開拓しています。これらの成果は国内外に発信され、我が国の社会、産業ひいては文化の発展に貢献するとともに、国際学術交流を通じて世界の化学の発展に大きく貢献しています。

このように化学系では、力量のある基礎的研究と論理的思考の積み上げに基づき、新物質や新分子を開拓し、その働きによって我々が直面している種々の問題の新しい解決法を切り開こうとしています。これを実現するために、化学の基本原理やさまざまな現象の解明を目指す研究室、またそのような知識に基づいて新しい機能を持った物質を創り出す研究室など、多彩な分野の学生と研究者が切磋琢磨しつつ協力して活動しています。化学系の教員は学生の皆さんが飛躍するのを全力で支援します。世界は皆さんの才能を待っています！

2023 年度化学系主任
石内 俊一

石内 俊一 教授
大島 康裕 教授
腰原 伸也 教授
谷口 耕治 教授
沖本 洋一 准教授
北島 昌史 准教授
西野 智昭 准教授
山崎 優一 准教授
石川 忠彦 助教
金子 哲 助教
黄 柏融 助教
中村 雅明 助教
平田 圭祐 助教
藤井慎太郎 特任准教授
田久保 耕 特任助教

大森 建 教授
後藤 敬 教授
豊田 真司 教授
小野 公輔 准教授
工藤 史貴 准教授
鷹谷 絢 准教授
安藤 吉勇 助教
鎌野 哲 助教
鶴巻 英治 助教
山科 雅裕 助教

野上 健治 教授
寺田 暁彦 准教授

石谷 治 教授
川口 博之 教授
河野 正規 教授
火原 彰秀 教授
前田 和彦 教授
八島 正知 教授
植草 秀裕 准教授
福原 学 准教授
大塚 拓洋 講師
原田 誠 講師
石田 豊 助教
関根あき子 助教
藤井孝太郎 助教
和田 雄貴 助教
松本 隆也 特任教授
岡崎めぐみ 特任助教
Siby Mathew 特任助教
Sebastian Nybin
Remello 特任助教
Pavel Usov 特任助教

ユーハス ゲルゲイ 特任准教授

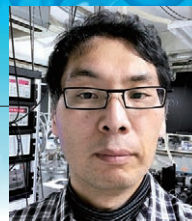
化学系の教員一覧	1
指導教員および研究内容	2-3
研究室紹介	
石内研究室	4
大島・山崎研究室	5
北島研究室	6
腰原・沖本研究室	7
谷口研究室	8
西野研究室	9
大森研究室	10
工藤研究室	11
後藤・小野研究室	12
鷹谷研究室	13
豊田研究室	14
野上・寺田研究室	15
石谷研究室	16
植草研究室	17
川口研究室	18
河野研究室	19
火原・福原研究室	20
前田研究室	21
八島研究室	22
入試情報	23
カリキュラム	24-25
代表的な修士論文・博士論文題目一覧	26-27
学生の受賞	28
教員の受賞	28
修了後の主な進路	29
学生からひとこと	30
卒業生の声、同窓会組織“東工大理化会”	31-32
化学系教員マップ	33



指導教員および研究内容

指導教員		研究内容
電子メール		
教員室	内線	
教授 石内 俊一		冷却イオン分光で探る分子認識のからくり 極低温分子及びイオンのレーザー分光、生体分子や人工超分子系における分子認識メカニズムの研究、複雑分子系のための新しい分子論的研究法の開拓
ishiuchi@chem.titech.ac.jp		
西4-506	7601	
教授 大島 康裕		ダイナミックな分子の姿をありありと捉え、自在に制御する 光／原子／分子科学、強レーザー場科学、分子分光学、反応動力学、分子運動、量子波束、コヒーレント制御、分子間相互作用
ohshima@chem.titech.ac.jp		
西4-105B	2899	
教授 腰原 伸也		物質を支配するドミノ効果（協同現象）を光で制御しよう ～超高速光デバイス、光エネルギー変換、生命機能に共通する新物質機能の開拓と探求～ 強い電子・格子相互作用や、電子相関を有する物質系（中心的題材は1次元有機半導体、磁性半導体）における、新奇な光電、磁気物性（例えば光誘起磁気相転移や光誘起構造転移等）の探索。光学的測定技法を中心に、伝導、磁性その他の分野の技法も組み合わせた新しい測定手法の開発と、化学的・物理的合成法を組み合わせた物質探索とを平行して行っている。
skoshi@chem.titech.ac.jp		
本118	2449	
教授 谷口 耕治		固体中で光・電荷・スピンの織りなす協奏現象の探索 ～物質の隠された魅力の発掘～ 固体物性化学。有機・無機ハイブリッド化合物や無機化合物を舞台とした機能性物質の探索、キラル電子物性、マグネトイオニクス（イオン輸送を介した磁性制御）、マルチフェロイクス
taniguchi@chem.titech.ac.jp		
東1-25	3532	
准教授 沖本 洋一		固体材料のエレクトロニクス機能を光で変える 光学的手法を用いた「強い電子相関」を持つ固体材料の電子状態の研究。高速非線形光学分光を用いた有機・無機強誘電体材料の光による制御手法の開発
yokimoto@chem.titech.ac.jp		
本117	3895	
准教授 北島 昌史		化学の根本原理を解明する 原子・分子衝突、反応物理化学、反応素過程、放射光を利用した超低速電子によるCold Collision実験、配向分子による電子散乱
mkitajim@chem.titech.ac.jp		
西4-503東	3812	
准教授 西野 智昭		分子協奏が創る単分子の化学 単分子化学、ナノバイオ、分子認識、分子エレクトロニクス、表面科学、分子探針、走査プローブ顕微鏡、有機薄膜、電気化学
tnishino@chem.titech.ac.jp		
西4-107	2242	
准教授 山崎 優一		分子内の電子と原子の動きを捉え、化学の核心に迫る 反応顕微鏡、分子イメージング、波動関数、分子軌道、電子移動、分子振動、反応動力学、電子分光、原子分子物理学
yamazaki@chem.titech.ac.jp		
西4-502	2235	
教授 大森 建		末踏の合成標的への挑戦：複雑な構造を有する天然有機化合物の自在合成 有機合成化学、生理活性天然物の全合成研究、新規立体制御法の開発、巨大分子の精密合成、ポリフェノール
kohmori@chem.titech.ac.jp		
東1-34	2761	
教授 後藤 敬		ナノサイズ有機分子の化学：機能を最大限に引き出すデザイン戦略 機能性ナノサイズ分子の開発、生体反応活性中間体の合成モデル研究、機能性ロタキサンの設計・合成、有機元素化学、超分子化学、生体機能関連化学
goto@chem.titech.ac.jp		
本B18	3543	
教授 豊田 真司		芳香環の配列を自由に設計して新しい構造や機能を創る 特異な構造や性質をもつ新しいπ共役系化合物の設計と合成。立体障害を利用した構造とダイナミクスの制御。芳香族分子を用いた超分子構造の構築。
stoyota@chem.titech.ac.jp		
東1-54	2294	
准教授 小野 公輔		テーラーメイドナノ空間の創出 超分子化学、有機化学、ホストゲスト化学、高分子化学
k.ono@chem.titech.ac.jp		
本B02	3279	
准教授 工藤 史貴		生物有機化学 ～ 有機化学を基盤とするケミカルバイオロジー ～ 生物有機化学、天然有機化合物の生合成化学、生合成酵素の機能構造解析、生合成マシナリーを利用した物質生産
fkudo@chem.titech.ac.jp		
東1-52	2607	

准教授 鷹谷 絢 takayajun@chem.titech.ac.jp 東 1-45 2766	独自の分子触媒で切り拓く新しい有機合成化学 有機合成化学、有機金属化学、錯体化学、新しい合成反応の開発、新しい遷移金属錯体の開発と機能開拓
教授 野上 健治 knogami@ksvo.titech.ac.jp 草津白根火山観測所 0279-88-7715	マグマに含まれる揮発性成分の挙動の解明 火山化学、火山噴火予知、火山噴出物、揮発性成分、火山ガス、火山岩の変質過程、海底火山、温泉、温泉沈殿物、粘土鉱物
准教授 寺田 暁彦 terada@ksvo.titech.ac.jp 南 5-405B 草津白根火山観測所 0279-88-7715	本物の火山が実験場 ～火山現象の熱学的研究～ 火山における熱的現象、火山ガス、噴煙、噴気地、火口湖、火山浅部熱水系、火山活動のモニタリング
教授 石谷 治 ishitani@chem.titech.ac.jp 北 3-701 2240	金属錯体の光化学と人工光合成系の開発 光反応化学、新しい光触媒の開発、人工光合成系の構築、有機金属錯体の光化学、二酸化炭素の光還元、超分子光化学、光機能性物質の創製、金属錯体－半導体ハイブリッド光触媒の開発
教授 川口 博之 hkawa@chem.titech.ac.jp 東 1-24 2234	遷移金属錯体の化学 無機合成化学、錯体化学、有機金属化学、小分子活性化、金属クラスター、カルコゲニド錯体
教授 河野 正規 mkawano@chem.titech.ac.jp 北 3-605 2158	～非平衡下でのものづくりー空間とポテンシャルの制御～「結晶性超分子化学」 錯体化学、超分子化学、結晶相反応、その場観察X線構造解析
教授 火原 彰秀 ahibara@chem.titech.ac.jp 西 4-609	ナノ・マイクロスケールの界面化学と物理化学に基づく分析化学研究 分析化学、蛍光偏光イムノアッセイ法、レーザー分光法、分析装置開発、大気化学、エアロゾル表面化学、フッ素化合物の分子間相互作用解析と分離・センサーへの応用
教授 前田 和彦 maedak@chem.titech.ac.jp 北 3-702 2239	半導体光触媒を中核とした人工光合成系の構築 光エネルギー変換、水の分解、水素製造、二酸化炭素固定化、ナノ材料、金属錯体/半導体ハイブリッド材料、複合アニオン化合物、無機固体化学、光電気化学
教授 八島 正知 yashima@cms.titech.ac.jp 西 4-410 2225	結晶構造と電子を調べてエネルギー・環境材料、電子材料、バイオ材料、触媒をデザインする エネルギー・環境・電子・バイオ・構造材料の結晶構造、イオンと電子を調べて、新材料を原子・電子レベルでデザインしよう！高温での精密結晶構造解析、構造物性、中性子・放射光X線回析と散乱、無機系新素材、燃料電池、光触媒、誘電体、環境浄化触媒、リチウムイオン電池、第一原理バンド計算、化学結合、ナノ粒子、相転移、電子・核密度解析、イオン伝導、熱分析、状態図
准教授 植草 秀裕 uekusa@chem.titech.ac.jp 本 363 3529	有機結晶を使った新しい結晶性材料の解析と展開 機能性の有機物結晶を設計し、結晶構造解析からその機能を調べる。医薬品原薬結晶の物理化学的性質と構造、包接化合物結晶の設計と機能、フォトクロミズム物質の探索、合成と物性制御など。理論計算、単結晶X線構造解析による分子構造・結晶構造の三次元解析。粉末結晶X線回析データによる未知構造の動的解析。
准教授 福原 学 gaku@chem.titech.ac.jp 西 4-608 3122	超分子分析化学：生体機構であるアロステリズムが関与する新計測手法 分析化学、超分子化学、分子認識、センサーテクノロジー、光化学、高分子化学、生化学、これらを融合した境界新領域の開拓
特任准教授 ユーハス ゲルゲイ juhasz@chem.titech.ac.jp 西 4-510 2357	Material design by computational chemistry for a cleaner future Catalysis, electrocatalysis, nanoparticles, carbon nanomaterials, quantum chemistry



石内 俊一 教授

冷却イオン分光で探る分子認識のからくり 「物理化学」

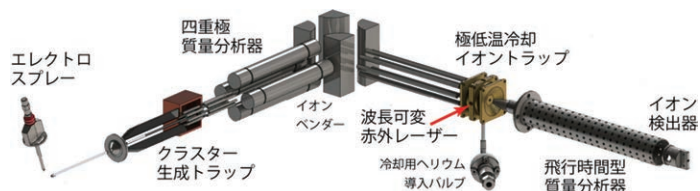
1. はじめに

分子の機能は分子と分子が協調しあうことで生まれます。生命はその最も複雑で精緻な例です。細胞内の様な多種多様な分子が混在している系で狙った化学反応を起こさせるには、分子が互いを認識する能力—分子認識が不可欠です。分子認識には、例えばDNA塩基対の様に形の相補性によるものもありますが、構造がかっちり決まっていないう柔らかな分子どうしても精密に分子認識できる例がたくさんあります。その様な系ではどうやって精密な分子認識が達成されているのでしょうか？本研究室では、冷却イオン分光という新しい方法で、複雑な分子認識のしくみの解明に挑んでいます。

2. 研究テーマ

(1) ボトムアップによる複雑分子系の新規研究法の開拓

複雑分子のしくみを調べるために、私たちは、機能の中心となる部分だけを切り出してそのしくみを調べ、その本質を理解しようというやり方—ボトムアップアプローチをとっています。柔らかな分子系、つまり、室温では様々な配座異性体（通常は異性体として区別できない）の間を揺らいでいる系の構造を精密に調べるために、溶媒和状態を精密に制御できる真空中に導入して、極低温に冷却することで揺らぎを止め、種々の精緻なレーザー分光法を用いて構造情報を得ます（冷却イオン分光）。私たちの装置は、独自の技術によりイオンの冷却性能や感度が世界最高レベルで、これまで難しかった測定が簡単にできるようになりました。私たちは、日々、人類未だの研究をエキサイティングにそして楽しみながら進めています。



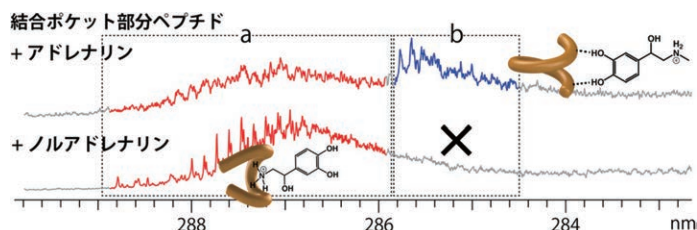
エレクトロスプレーで溶液中の分子イオンを気相中に取り出す。クラスター生成トラップで溶媒和クラスターを生成し、特定の個数の溶媒分子が付着したクラスターを四重極質量分析器で選択し、極低温冷却イオントラップで瞬間凍結する。ここに、波長可変赤外レーザーを導入し、レーザー光吸収により生成した壊れたイオン（フラグメントイオン）を飛行時間型質量分析器で検出する。フラグメントイオン量をモニターしながらレーザー光を波長掃引することでスペクトルが測定できる。

(2) レセプター・リガンド系の分子認識

例えば、神経伝達過程では、シナプスにおいて神経伝達物質が放出され、それが別の神経細胞の表面にあるレセプタータンパク質に結合することで、神経シグナルが伝達されます。この過程は「鍵と鍵穴」に例えられ、それぞれのレセプターに結合する神経伝達物質が決まっ

ています。代表的な神経伝達物質であるカテコールアミンは、複数の単結合を持つため、様々なコンフォメーションをとる柔らかな分子ですが、どうしてこの様な分子が精密な鍵としてはたらくのでしょうか？

私たちは、 β 2-アドレナリンレセプターの結合ポケットの一部を構成するペプチドと種々のカテコールアミンの複合体に対し冷却イオン分光を適用しました。その結果、レセプタータンパク質に認識されるリガンドとそうでないリガンドでは紫外スペクトルが大きく異なり、前者ではX線結晶構造解析でわかっている分子認識構造をとるのに対して、後者ではその様な構造をとらないことがわかりました。つまり、結合ポケットの一部でも分子認識が可能だということです。興味深いのは、カテコールアミンの構造が異なる部分がペプチドとの結合に直接関与していないということで、それに関わらずそれらの構造の違いを認識できるのはとても不思議です。



β 2-アドレナリンレセプターの結合ポケット部分ペプチド (SIVSF) とアドレナリンおよびノルアドレナリンとの複合体の紫外スペクトル。ノルアドレナリンは β 2-アドレナリンレセプターには結合しにくく、ノルアドレナリン複合体ではアドレナリン複合体で観測されるb-バンドが観測されない。このバンドは赤外分光により分子認識構造（上図）であることがわかった。

(3) 金属イオン認識のメカニズム

生体内には、特定のイオンのみを選択的に通すイオンチャネルや、細胞内から特定の金属イオンを細胞外に運び出すイオノフォアという分子があります。また、それらにヒントを得て人工のイオン認識分子も合成されています。金属イオンは球体なので、形で認識するのは困難です。では大きさを認識しているのでしょうか？例えば、カリウムイオンチャネルはカリウムより小さいナトリウムやリチウムイオンも通しません。つまり、単純に穴の大きさを分けている訳ではありません。金属イオンの選択には周りの水分子が重要であることはわかっていますが、分子レベルでどの様にイオン認識と関わっているのかわかっていません。私たちは、水分子を分子レベルで制御し、個々の水分子がイオン選択性にどの様に関わっているかを、冷却イオン分光を用いて研究しています。

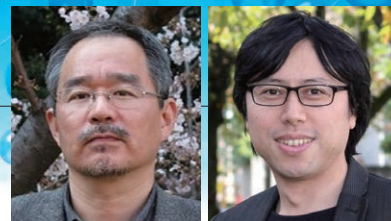
3. 学生の皆さんへ

フレキシブルで複雑な分子系が織りなす機能のしくみを解き明かすには、分子レベルの精密な情報が不可欠です。複雑系を分子レベルで研究するという分野は実験的にも理論的にも未開拓であり、今までにない新しい技術とアイデアが必要です。きっと皆さんの奇想天外なアイデアが大いに役立つでしょう。私たちと一緒に、未開拓の分野を切り開きましょう！

大島・山崎研究室

URL <http://www.chemistry.titech.ac.jp/~ohshima/index.html>

E-mail 大島 / ohshima@chem.titech.ac.jp 山崎 / yamazaki@chem.titech.ac.jp



大島 康裕 教授 山崎 優一 准教授

超高速で動き回る分子の姿をありありと捉える「物理化学」

1. はじめに

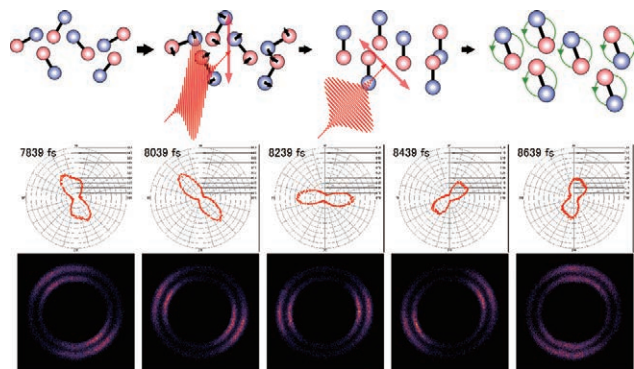
紙の上に書いた分子式は分子の骨組みだけを教えてくれますが、実際の分子は空間を飛行し、回転し、振動しています。室温の条件であっても、典型的な分子で1秒間に300メートル飛び回り、1000億回も回転し、振動は1兆～10兆回に達します。私たちは、極めて高い時間分解能やエネルギー分解能を有する各種レーザーを駆使し、さらに、荷電粒子画像観測法のような先端計測技術を組み合わせることにより、激しく運動する分子の姿を「ありありと捉える」こと、その上で、分子の運動を「自在に操作する」ことを目指して、以下のテーマで研究を進めています。

2. 研究テーマ

(1) 分子運動量子状態の詳細決定と制御法の開拓

分子運動をコントロールするために、まず、分子を1ケルビン以下の極低温状態に冷却して運動をストップさせたのち、1ピコ秒(1兆分の1秒)よりも短い強力な光パルスを用いて瞬間的に分子に撃力を加え、運動を励起します。このような「撃力」光による状態分布の変化を精密に測定する方法を、私たちは独自に開発しました。さらに、レーザーパルスを適切な時間間隔で2発続けて照射することにより、そろって右回りもしくは左回りに回転させることも実現しています。パルス間隔は分子の回転周期(10ピコ秒)程度で、この時間内で回転方向の整列が完了します。そのために、回転のタイミングをきれいにそろえることができます。

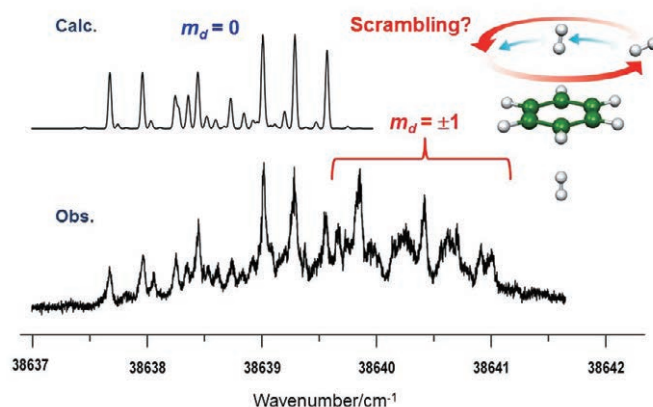
そろって回転する分子の集団を作り出すことに成功したことは、超高速で運動する分子の姿を「ありありと捉える」ことへとつながる重要なステップです。実際について先ごろ、独自に開発したイメージング法を活用して、回転する分子の「動画」を撮影することに成功し、「粒子であるとともに波としての性質を持つ」というミクロスケールの物理法則に支配された分子の世界を、明確に視覚化することができました。



そろって右回りに回転する分子集団生成の模式図(上段)、観測した画像イメージ(下段)、ならびに、対応する分子の空間配向を極座標プロットしたもの(中段)。各イメージは、左から右へ0.2ピコ秒ごとのスナップショットに対応。

の性質に深く関わる分子間相互作用を定量的な信頼性をもって特定することが挙げられます。そのためには、少数個の分子が弱く結びついた集合体(分子クラスター)を気相孤立状態に取り出して、振動量子準位を精密に測定することが最も有力です。

当研究室では、極低温状態で分子クラスターを効率よく生成し、その紫外可視スペクトルを測定することによって、クラスター内で構成分子の相対配向や位置が大きく変化する運動を実験的に特定することに取り組んでいます。例えば、ベンゼンに3つの水素分子が結合したクラスターでは、2つの水素分子が入れ替わる大規模な構造変形運動が存在することを明らかにしました。



ベンゼン- (水素)₃ クラスターのスペクトルと内部運動

(3) 電子や原子の粒子性を利用した新規分光法の開拓

多くの化学反応は、分子内の電子分布の変化を契機として結合の生成・開裂が起こり、それを駆動力として各構成原子がその運動状態を変えることで進行すると考えられます。私たちは、これら電子や原子の状態変化を、粒子性の特徴である運動量の変化として直接捉える、まったく新しい計測法を独自に開発し、分子間相互作用や化学反応の核心に迫ることを目指しています。

3. 学生の皆さんへ

分子運動コントロールの今後のターゲットは「反応」です。分子構造の変化、さらには異性化のような化学反応を効率的かつ選択的に誘起するような、エキゾチックな運動状態を作り出したいと思っています。また、化学反応が進行している「現場」である遷移状態近傍に直接アクセスし可視化することにも挑戦し、真に量子論的な枠組みのなかで「望ましい反応のみを進行させる」ための指導原理の確立を目指したいと考えています。

このような「夢」の実現には、オリジナルなアイデアとオリジナルな装置の開発が欠かせません。当研究室では、これまでも複数の「世界でただ1つの装置(レーザーも含む)」を作り出して、独自の研究を進めてきました。「今まで誰も見たことのないこと」に(ちょっと大げさですが)人類史上初めて出会う際の高揚感を味わってませんか? 独立の気概と柔軟な発想を持って「知の地平の拡張」に参加する同志諸君を待っています!

(2) 精密分光による分子間相互作用の解明

分子運動コントロールの重要な応用の1つとして、物質のほぼ全て



北島 昌史 准教授

化学の根本原理を解明する

1. はじめに

原子・分子は物質の基本的構成要素であり、その性質や振る舞いが、様々な物質の個性、多様性を支配しています。基底状態にある原子・分子は量子力学によってその構造や性質が解明されてきていますが、高い励起状態にある原子・分子には、未だに多くの謎が残されています。例えば「多電子励起分子」は、現代化学が扱ってきたモデルが破綻するため、その理解には、まだまだ多くの研究が必要です。また、このような高い励起状態の原子・分子は、化学反応の中間状態としても、しばしば現れます。化学反応は、分子と分子の衝突により化学結合の組み替えが起こり、新しい分子が生成される過程ですので、化学反応の理解には「原子・分子衝突」の詳細な理解が不可欠です。原子・分子衝突は、物理学における散乱問題の典型例であり、大変重要であるとともに、極めて興味深い課題です。私たちのグループは、化学の根本原理を解明することを目指して、原子・分子の織り成す量子力学の世界を、世界で唯一の高性能装置を自ら開発して研究しています。

2. 研究テーマ

(1) 多電子励起分子の研究

分子軌道近似とBorn-Oppenheimer近似が、破綻する系として注目を集めている多電子励起分子のダイナミクスの研究です。多電子励起分子とは、2個以上の電子が同時に励起した分子のことです。イオン化ポテンシャル以上の内部エネルギーを有していながら一時的にイオン化せずに存在する中性励起分子で、当然きわめて活性に富んだ 10^{-16} s程度の短寿命の分子種です。多電子励起分子は、反応中間体として重要な役割を果たしているだけでなく、基底状態にある分子からは想像もできないようなダイナミクスを見せることでも注目されています。

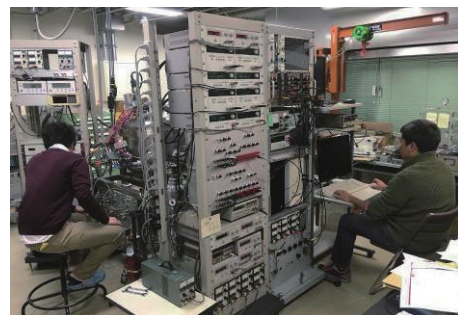
私たちは、この多電子励起分子の不思議な性質を解明する研究を進めてきました。例えば、電子と光子という2種類の量子ビームを利用して、独自の究極的多電子励起分子の観測法を開発し、どのようにして多電子励起分子が生成するのか研究を行い、分子軌道法では説明のつかない結果を次々と発見しています。分子軌道法は、しよせん近似ですから、どこかで破綻するはずですが、分子軌道法ほどの良く使われる近似の破綻は、やはり大事件です。このように多電子励起分子は、きわめて魅力に富んだ研究対象です。我々は、多電子励起分子を対象に、化学の根本原理に一步一步、着実に迫っています。

(2) 電子-分子衝突過程における立体ダイナミクスの研究

化学反応の立体効果を突き詰めて、分子そのものが持つ反応性の立体効果を追及するテーマです。化学反応は、分子と分子の衝突により化学結合の組み替えが起こり、新しい分子が生成される過程です。現象論としての化学反応は古くから研究されており、多くの知識と経験則が体系となって積み上げられてきました。しかし、化学反応が「何が起こり」、「どのように進むのか」という問を根本原理か

ら解明することは、今なお現代科学の重要な先端領域です。私たちは、量子力学と衝突理論に基づいて原子・分子の衝突の立場から、化学反応を理解することを目指して研究を進めています。

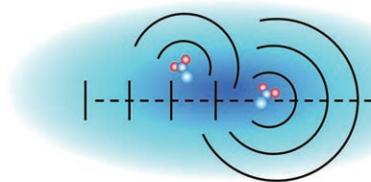
このテーマでは、電子ビームを、分子軸の向きの分かっている分子一つ一つに照射して、分子軸の向きと分子の反応の関係を精密に研究します。現在、トロイダルアナライザーと呼ばれる独特の分析器を中心とした、世界で唯一の実験装置を開発中です。この装置にも、学生さんの種々のアイデアが盛り込まれています。



テスト中の開発中の実験装置

(3) 超低エネルギー電子ビームによるCold Collisionの研究

このテーマは、非常にエネルギーの低い電子ビームを原子・分子に照射して、量子力学の支配する世界の衝突を覗いてみようというものです。室温程度のエネルギーを下回るエネルギーの電子ビームは、電子のド・ブロイ波長が原子・分子のサイズよりも遥かに大きくなり、純粋に量子力学の支配する世界が現れると期待されます。私たちは、このような衝突過程を“Cold Electron Collisions”と呼び、分子衝突に現れる新たな量子ダイナミクスを探索しています。私たちは、放射光を用いることで、世界で最も低いエネルギーの電子衝突実験が行える装置を開発し、冷たい電子衝突の世界を探索しています。



Cold Electron Collisionの概念図

(4) 量子もつれ原子ペアのダイナミクス

「量子もつれ」とは、量子力学の摩訶不思議さの根源であり、かのアインシュタインがどうしても許せなかった概念です。我々は分子の解離により量子もつれ原子ペアが出来ることを明らかにしました。これまで、量子もつれは、化学とは無縁の概念とされていたのですが、どうやらそれは勝手な思い込みのようです。

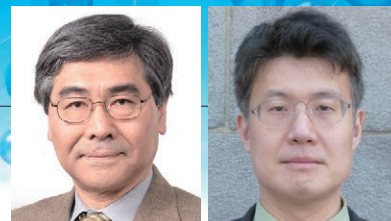
3. 学生の皆さんへ

我々の特徴は、世界で唯一の高性能装置を自らの手により開発することです。研究がうまく行くこともあれば、うまく行かないこともあります。でもその困難さを乗り越えることによって、実社会で必要とされる、課題設定能力や問題解決能力が身につきます。物理化学の革新的な研究に興味のある人、是非一緒に研究をして、ともに成長しましょう。

腰原・沖本研究室

URL <http://www.cms.titech.ac.jp/~koshihara/index.html>

E-mail 腰原/skoshi@chem.titech.ac.jp 沖本/yokimoto@chem.titech.ac.jp



腰原 伸也 教授 沖本 洋一 准教授

光で起こす原子・分子のドミノ倒し

1. はじめに

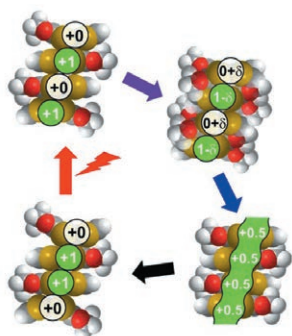
豊かで便利な今日の社会と生活を支えてゆく上で、エネルギーや各種資源の限界の問題が大きな壁として立ちはだかっています。この問題の解決に向け、無限に降り注ぐ光エネルギーを資源に変換して徹底的に利用する材料（光エネルギー変換材料）の開発が課題になって来ています。また光は、超高速光通信や各種高密度光メモリー、光演算の形で我々の生活とすでに深いかかわりを持っていますが、この点でも、光デバイス材料に対して、さらなる高速化と抜本的な省エネルギー化が強く求められています。さらに私たちの身の回りの生命現象を見回してみると、光合成をはじめ発光、視覚、光医療など光が主役を演じている現象に満ちています。このように、光によって物質を変化させ、その変化の仕方を制御することは、今日の物理学、化学、材料科学、生命機能科学等多くの分野に共通する一大課題となっているのです。しかし従来の研究では、一つ的光子に応答する分子や電子の数はおおむね一つに限られていました。この原理的限界を打破するべく、私たちのグループは、「**一つ的光子で極めて多数の電子や分子が一気に変化するような現象を示す固体群の発見**」と、「**現象の特性解析、そしてそのための観測装置開発**」の二つの柱を中心に、日夜研究に取り組んでいます。



2. 研究テーマ

(1) 光ドミノ効果（光誘起相転移）物質の探索

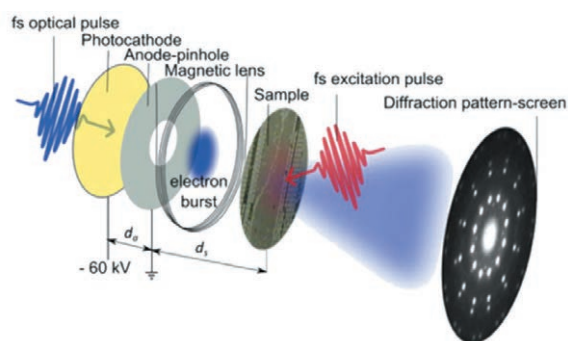
物質の中では、それを構成する原子や分子相互に働いている力があります。これは協力的相互作用と呼ばれていて、この力が（チームスポーツのように）方向性を合わせて一気に働くと、物質に大きな変革が生じます。これが相転移と呼ばれる現象で、磁石などはその典型例です。この相転移を光で制御することができれば、物質に触れることもなく光を当てるだけで、急に物質が金属に変わったり、磁石になったり、誘電体になったり、さらには高効率の酸化還元反応を起こしたり、といった夢のようなことが可能かもしれない。いわば、光によってコントロールされた揺らぎが巨視的な変化に成長してゆくドミノ効果を現実の物質で発生させようという試みです。我々の研究室では、これまでに①有機分子を骨格とする分子性錯体結晶、②遷移金属をふくむ酸化物セラミックス結晶などにおいて、光照射による磁性、誘電性、結晶構造の変化を発見し報告しています。これら我々の先駆的発見がきっかけとなり、世界中でこのような探索研究が始まり現在に至っています。



EDOTTF₂PF₆結晶の光励起後の構造と価数変化の様子

(2) 光ドミノ効果観測手段の開発

さてこのように光で様々な物質の特性変化が確認されると、次はその変化がどのようなメカニズムで、どのような速さで進行するのか調べることが、応用のみならず次の新物質デザインにとっても重要問題となります。特に物質の原子分子レベルの構造が、光によってどのように、どんな時間スケールで変化してゆくのかが調べることが大変重要な課題となります。このために、私たちのグループは世界に先駆けて、パルス幅が10兆分の1秒という超短パルスレーザーと最新の加速器技術を組み合わせて、X線で100億分の1秒の物質の構造変化をナノスケール以下でとらえる装置の開発も行い、世界中の科学者の利用に供しています。さらにこの世界最先端の装置を使って、生命分子の中でも、ドミノ倒しのようなタンパク質の構造変化が、生体内のガス分子輸送（呼吸）とかかわっていることも発見・報告しています。さらに近年では、超短レーザーと同じ時間分解能を持った光電子顕微鏡や、電子線散乱による構造解析システムの試作にも取り組んでいます。



我々が作成している電子線回折による光励起構造変化動画撮影システム

cf. G. Sciaini 他, Rep. Prog. Phys. 74, 096101 (2011).

3. 学生の皆さんへ

研究は、皆さん自身が計画を立案し、実験結果を得て、発表するとともに次に向けての計画を立てる、という3段階を経て初めて一つのサイクルが完了します。このための能力を、実際の研究活動を通して磨いていきます。このような仕事の進め方は大学のみならず、一般社会に出てからも共通して役立つスキルになると私たちは確信しています。これらを身に着けるための研究室活動として、(1)一週間に一度のセミナー（主に文献紹介）と研究報告、安全情報交換(2)学生さん自身が企画する読書会、などを行っています。皆さんがこれまで高校、学部での勉強で培ってきた基礎学力をベースに、最先端の光化学研究活動に向けてスムーズに離陸できるよう懇切丁寧に指導します。また欧米の多くの大学、国立研究所との共同研究を実施しており、学生の間に海外で研究発表を行える機会も充実しています。

皆さんと一緒に光を用いた最先端物質研究を行えることを期待しています。



谷口 耕治 教授

固体中で光・電荷・スピンの織りなす協奏現象の探索 ～物質の隠された魅力の発掘～

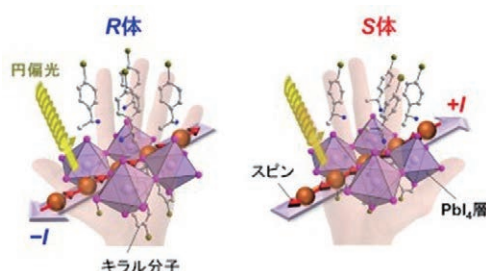
1. はじめに

よく知られているように、物質は多数の原子から出来ています。その原子はさらに、原子核と電子とから構成されていますが、実はほとんどの場合、物質中で主役を演じているのは電子の方です。たとえば、物質の化学反応や化学結合では、価電子が大きな役割を果たすことが知られていますし、物質が電気を流す、光る、磁石になるといった、我々の生活に欠かせない様々な機能的な性質（機能物性）も、実は電子が引き起こしているものです。私たちは、電子の性質に着目することで、光物性、電気伝導性/誘電性、磁性などの機能物性を単独で誘起するのではなく、互いに結合させ、新奇な光・電荷・スピンの協奏現象として誘起することに関心を持っています。実際の研究では、このような物性が発現する場として固体物質を選択し、物質合成から物性評価までを自分たちで行うという、自給自足型のスタイルで研究に取り組んでいます。また、研究の鍵となる電子が量子論的な粒子であることから、化学だけでなく、物理など他分野の知識や技術も、使えるものは総動員してアプローチするというスタンスで物質に向き合っています。最近では、光・電荷・スピンを結びつける要素として、物質の右手・左手の性質（キラリティ）に興味を持っており、物質開発を行いながら、キラル電子物性の開拓を進めています。将来的にはこのようなキラル電子物性の研究をもとに、自然科学最大の謎の一つとも言われているホモキラリティの謎（生命体が片方のキラリティの分子のみで構成されていること）の起源に迫っていければと考えています。

2. 研究テーマ

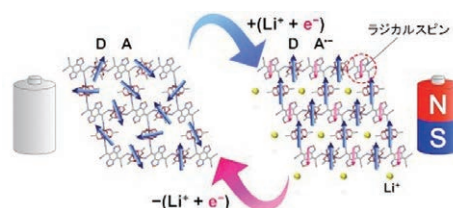
(1) キラル電子物性の開拓

キラルな結晶構造を持ち重元素から構成される物質は、非磁性であっても電子スピンによる磁気的性質が発現するという、興味深い性質が予想されています。しかし、重元素から成る物質の大半が属する無機物では、自由にキラリティを選択して物質を合成することは非常に難しく、新しい物質の開発が期待されていました。これに対し私たちは、二次元有機・無機ハイブリッドペロブスカイトと呼ばれる系において、キラリティの制御が可能な重元素から成る新しい半導体の開発に成功しました。開発した半導体では、光を照射した際に、結晶の右・左のキラリティに応じて光電流の流れる向きが反転するといった変わった現象が、これまでに見出されています。さらにこの光電流中では、磁場を印加していないにも関わらず電子スピンの向きが揃うといった興味深い性質も予想されており、今後、光照射で磁化反転を制御出来るメモリデバイスのような、光を利用したスピントロニクスへの応用なども期待されています。



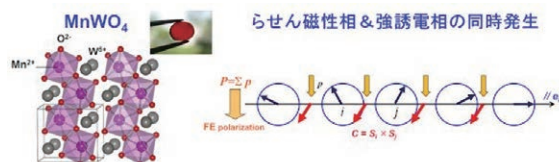
(2) イオン輸送を介した電気・磁気相関現象の開拓

電気的な磁性制御は、エレクトロニクス技術との親和性から、応用物性分野において広く関心が持たれてきた主題の一つです。本研究では、現在の代表的な蓄電デバイスとして知られるリチウムイオン電池 (LIB) のメカニズムを、バルク物質に対する高密度の電子ドーピング制御法として利用するという独自の発想で、新しい電気的磁性制御の実現を目指しました。これまでに、分子性化合物の有機金属構造体において、酸化・還元に伴うラジカルスピンの生成・消滅を利用して、LIBの充放電操作と連動させた可逆的な磁石状態のON-OFF制御に成功しています。このような酸化・還元反応に伴うイオン輸送を介した磁性制御は最近、“Magneto-ionic control” とも呼ばれ注目されており、今後、新たなスピン-イオン協奏現象デバイス (マグネトイオニクスデバイス) の創出につながることも期待されています。



(3) 新規マルチフェロイクスの探索&巨大電気磁気効果の開拓

一般に電気と磁気の相関というと、電磁気学の法則が良く知られていますが、物質中では、この法則で出てくる電束密度や磁束密度の時間変化を必要としない、固体特有の特異な磁性と誘電性の相関現象（電気磁気効果）が生じる場合があります。私たちは電気磁気効果を発現させる舞台として、一つの物質内でスピン秩序と強誘電秩序が共存する“マルチフェロイクス”と呼ばれる系に着目し、らせん型の特異なスピン配列が強誘電性を誘起する新しいタイプの酸化物マルチフェロイクスを発見しました。このマルチフェロイクスでは、スピン秩序と強誘電秩序の強い結合を利用して、磁場による電気分極フリップ (90°回転) や電気分極反転 (180°回転) のような、様々な新奇な巨大電気磁気効果の誘起に成功しています。



3. 学生の皆さんへ

電子物性の研究をしていて面白いのは、昔からよく知られていたような物質であっても、視点を少し変えるだけで、思いがけず魅力的な性質が見つかることがしばしばあるという点です。それまでただの石ころだと思っていたものが、急に最先端の機能性物質として光輝いて見えるようになる瞬間に立ち会えるのは、物性研究の一つの醍醐味です。当研究室では、多角的な視点で物質を眺めることを通して、このような物質の隠された魅力の発掘を目指しています。皆さんと、物質の深淵な世界に挑める日を楽しみにしています。



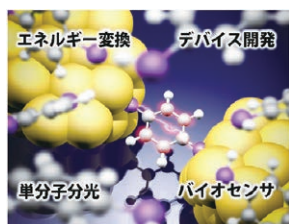
西野 智昭 准教授

単分子の化学 ーナノスケールの物質科学を究めるー

1. はじめに

分子はバラエティに富んだ化学的性質と機能をもっています。この多様性に富む分子1個を金属電極間に挟むと、分子のもつ機能に加え、分子と金属の相互作用によりさらに多様な性質・機能を単分子はもつようになります。例えば、普通は絶縁体である分子が金属と同じように電気を流したり、金属表面でも進行しない触媒反応が電極間に架橋した単分子では進行したり、常磁性の分子が強磁性を示すことなどがこれまで明らかにされてきました。これら電極間に架橋した単分子の優れた機能を自由に利用することが出来れば、高効率のエネルギー変換素子、単分子で動作する超小型コンピュータなどを実現することが出来ます。また単分子を検出できることを最大限に生かすと、高感度のセンサ利用も可能です。そして、光合成、太陽電池で重要なプロセスである光電変換など複雑な現象を、単分子レベルで解明することも単分子計測技術を適用することで可能となります。

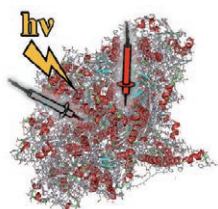
以上のような興味から、私達は、単分子を利用した、高効率エネルギー変換、低消費電力を実現する単分子素子、高感度バイオセンサ、そして、単分子を見る手法の開拓などの研究を展開しています。最終的には、単分子を利用した新たな化学分野を創発したいと考えています。



2. 研究テーマ

(1) エネルギー変換の単分子計測

太陽電池は再生可能エネルギー技術として重要なものです。私たちは、エネルギー変換効率の向上のために、単分子計測の技術を活かして、その基礎過程の解明に挑戦しています。光励起に伴う電荷分離が太陽電池の発電におけるもっとも重要な過程であり、これを単分子レベルで捉えるための計測法を開発しています。実際の太陽電池では構成要素や界面構造など多くの要因が相互に複雑に関連しているため電圧発生機構を分子レベルで理解することは困難で

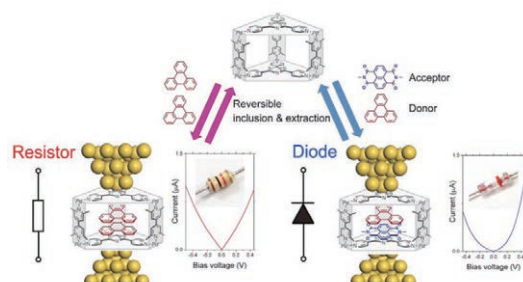


す。そこで、電荷分離などの素過程を最も単純な単分子レベルで計測することによって、発電に至る基礎過程を分子尺度で解明できます。さらに、光だけでなく、熱エネルギーを電力に変換する熱電変換についても単分子レベルで計測し、明らかにしています。

(2) 単分子を用いたデバイス開発

単分子に素子機能を賦与することができれば、究極サイズの微小低消費電力素子をつくりだすことができます。素子の微細化は高集積化につながり、コンピュータの性能を飛躍的に向上させることが出来ます。私たちは単分子素子の実現にむけ、単分子スイッチ、ダイオードの開発に成功してきました。特に単分子ダイオード開発で

は、かご分子にドナー性とアクセプター性の分子を積層させることで整流特性を発現させました。積層させる分子を変えることで機能を自由にデザインできます。また、分子を電流計測プローブとして用いることによっても整流特性を計測することに成功しています。



(3) 単分子を検出できるバイオセンサの開発

私たちは、分子認識化学を単分子接合に応用し、わずか1つの生体分子を選択的に直接はかる手法を開発しています。例えば、DNAの単分子検出法を開発しました。金属電極にあらかじめDNAを固定しておく、それに相補的なDNAが存在するときのみ単分子ー単分子接合が形成され電子伝導が生じるため単分子検出が達成されます。その電子伝導度はDNAの組成に極めて敏感であるため、がんや老化の一因となるDNAの変異や損傷も検出することができます。

この技術を利用すればDNA単分子で遺伝子検査が実現できる可能性もあります。DNA以外にも様々な生体分子や生体シグナルの単分子検出法を開発しています。

(4) 単分子分光法の開発

通常の光学顕微鏡では、たった一個の分子を見ることはできません。そこで、私たちは単分子接合の振動分光計測、電子状態計測法などの新しい分光法を開拓を行っています。接合を流れる電子と分子振動の相互作用に由来する伝導度の微弱な変化に着目することによって、接合の分子の種類、さらにその数まで決定できます。これによって、ベンゼン分子を用いて世界で初めて有機単分子の振動分光計測に成功しました。このベンゼンの系で興味深いことは、バルクでは絶縁体であるベンゼンが単分子接合となると、金属と同程度に電気を流した点です。単分子接合に特徴的な物性の発現と言えます。

さらに、ピリジンを用いて単分子接合の動的な揺らぎを実時間で計測する事などにも成功しています。

3. 学生の皆さんへ

以上のように、私たちは単分子だけが発現する物性探索・機能開発と、単分子だからこそ分かる基礎過程の研究を行っています。興味のある性質や現象をあらわに見るために分子、その接合や計測法を自分でデザインできるのが醍醐味です。想像・創造力がかきたてられ、成功したときの興奮は筆舌には尽くせません。みなさんの研究室見学、そして研究室への参加を歓迎します。



大森 建 教授

～未踏峰の合成標的に挑む～「合成有機化学」

全合成のススメ

私たちの究極の目標は、有機化合物を思いのままに、自在に合成できるようになることです。その目標に向かって、当研究室では天然有機化合物の全合成に挑戦しています。また、その合成に役立つ新しい反応や合成論理の開拓も行っています。合成目標とする化合物の中には、天然から僅かしか得られない希少なもの、有用かつ強力な生理活性を持つもの、あるいは珍しい構造をもつもの、ときには非常に不安定で取り扱いにくいものなどもあります。それらをどのような作戦で効率的かつ選択的に作り上げるか。そこが我々の腕の見せ所ともいえます。

現在、私たちは、1) ハイブリッド型天然物（生合成経路が異なる構造単位が複合構造を形成している化合物）、2) 高度に酸化された骨格を持つ化合物、3) 歪んだ構造や、多環構造をもつ化合物、などに興味を持ち研究を進めています。どれも一癖二癖ある化合物ばかりで、そう簡単に合成できるわけではありません。

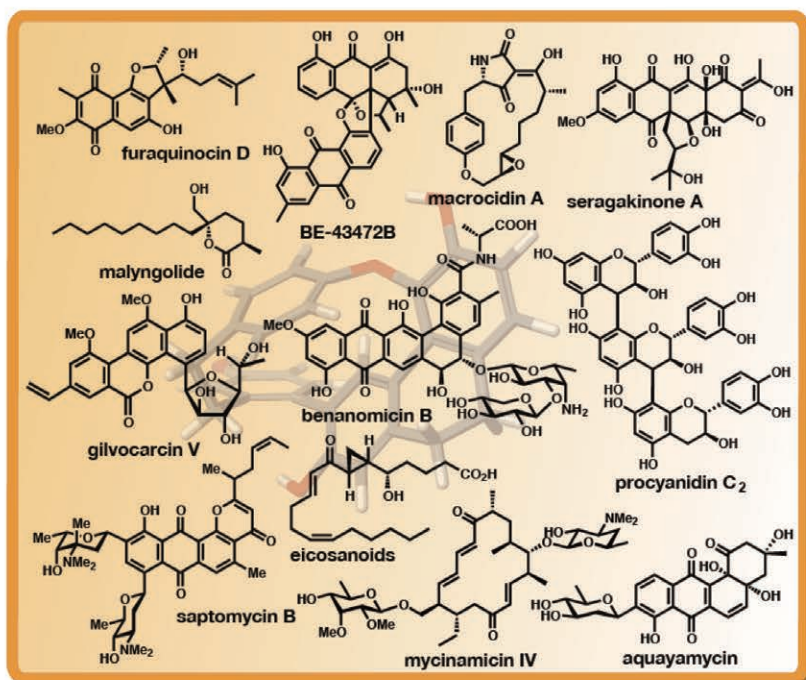
天然物合成はよく登山に喩えられますが、実際チャレンジしてみると、合成経路の開拓は、ながら地図を持たずに道なき道を突き進んでいくようなものです。遭難せずに難攻不落な要衝を越え、最終的に未踏の山の頂に到達するためにはどうすればよいでしょう？そこに私たちはあらん限りの知恵を絞ります。山の高さや急峻さに

よって登山の難易度が異なるように、合成においても標的化合物の構造次第で合成のアプローチが大きく変わります。成功のポイントは、個々の化合物において直面する特有の合成的課題を如何にして解決するか、ということです。私たちの研究室では、これまでにない独自の方法論を開拓し、それを駆使して全合成を達成するため、日々研究を続けています。下には、最近私たちが合成に成功した天然物の一例を挙げました。これらの合成は新しく開発した反応、合成論理を駆使して達成したものであり、そのほとんどが世界初です。

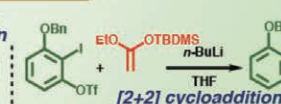
研究の主役は、いつも学生さん達であり、彼らが日々の実験の中で見つけたヒントが新たな発見を生み、またブレイクスルーにも繋がります。時には実験に失敗して、研究に行き詰まるもよしです。それも次なる発見に向けての「布石」となります。

なお、当研究室の特色の一つとして、他大学の出身者が多い点が挙げられます（半数以上は外部から！）。例年、海外からのポスドクも参加します。また、短期・長期の留学生が仲間に加わることもあります。いろいろなバックグラウンドを持つ人達が、お互いに切磋琢磨してそれぞれの高みを目指しています。

私たちは、このような独特の研究環境の中で鍛え上げられた「有機合成のスペシャリスト」達が、今後も社会で大活躍してくれることを期待しています。

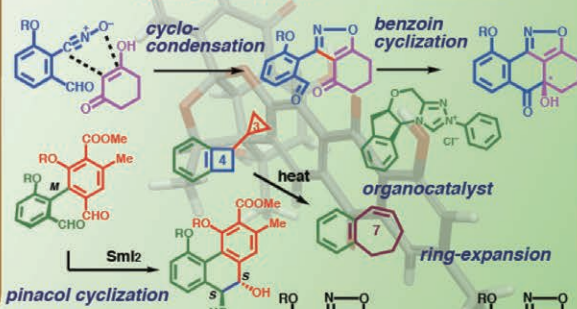


生理活性天然物の全合成



新規合成手法の開拓

C-glycosidation: O→C-rearrangement





工藤 史貴 准教授

～化学と生物の架け橋～「生物有機化学」

1. はじめに

生物は、私たち人類の想像を超えた、多種多様な化学構造の有機化合物を生産しています。中でも生理活性天然物と称される有機化合物は、人類の健康増進に貢献する医薬品となるばかりでなく、自然科学分野を発展させてきました。生物は、私たちが想像つかない合成方法で有機化合物を生合成しており、合成化学の発展にも寄与してきました。生物が利用している意外な合成方法を学び、活用することにより、新たな物質生産系の創出を目指しています。

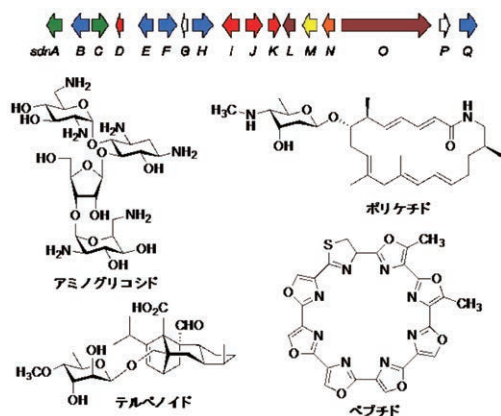


図1 生理活性天然物と生合成遺伝子クラスター

2. 研究テーマ

(1) 天然有機化合物の生合成解析

微生物は、複数の酵素を用いて、グルコースやアミノ酸などを原料として、医薬品となる化合物（抗生物質、抗がん剤、抗ウイルス剤、血中コレステロール低下剤など）を生合成しています。生合成に関わる酵素の遺伝子の配列情報は、ゲノム解析により入手可能です。しかしながら、私たちの想像つかない反応を触媒する酵素は、配列情報からだけでは分かりません。酵素触媒活性を検出することが重要です。天然有機化合物の化学構造から生合成経路を推定し、各反応段階を触媒する酵素の触媒活性の検出を積み重ねることで、生合成経路を明らかにしていきます。

アミノグリコシド系抗生物質の生合成に関しては、特徴的なアミノサイクリトールの生合成酵素の機能解明を起点として研究を進めています。中でも代表的なカナマイシンやネオマイシンの生合成経路を中心に研究を進めています。一連の研究の過程では、デオキシ化、異性化、C-メチル化といった修飾反応が、私たちの想像していなかったラジカル機構により起きていることが分かってきました。

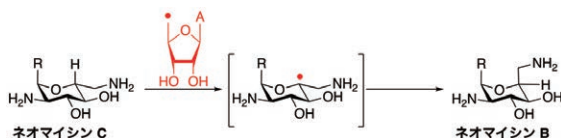


図2 ラジカル酵素による異性化機構

ポリケチド抗生物質の生合成に関しては、特徴的なスターターユニットのポリケチド経路への取り込み機構に着目し研究を進めており

ます。中でも β -アミノ酸をスターター部位に有するマクロラクタム抗生物質の生合成経路を中心に研究を進めています。 β -アミノ酸の活性化と保護修飾を経てポリケチド合成酵素に取り込まれること、マクロラクタム化の前に保護修飾部位が取り除かれることを明らかにしています。ユニークな β -アミノ酸の生合成機構も明らかにしています。

他にも天然有機化合物に見られる特徴的な化学構造の構築機構に興味を持ち、生合成解析を進めています。

(2) 生合成酵素の構造解析

機能解明した酵素に関しては結晶化を試み、X線結晶構造解析を行っています。ここでポイントとなるのは、基質類似体や阻害剤などの分子プローブを独自にデザイン・合成して複合体解析に用いていることです。これにより活性部位を可視化し、基質認識機構と触媒機構をアミノ酸レベルで解明することができます。また生合成においては、タンパク質-タンパク質間相互作用を介して基質を受け渡すことも多く、それを理解するために、独自に開発した分子プローブによるクロスリンク反応を検討しています。アミノ酸活性化酵素とアシルキャリアープロテインのクロスリンク複合体のX線結晶構造解析にも成功しています。

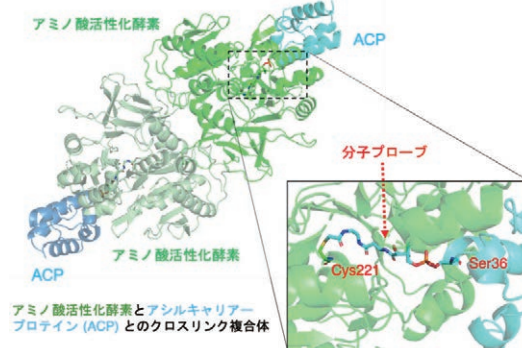


図3 クロスリンク複合体の結晶構造

(3) 生合成遺伝子改変による物質生産

生合成解析と酵素構造解析の知見を活用し、生合成遺伝子を人為的に改変して新たな物質の生産にもチャレンジしています。これまでにマクロラクタム抗生物質の一つであるヒタチマイシン類縁体の生合成に成功しています。

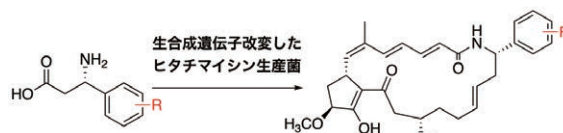


図4 生合成遺伝子改変による新規物質生産

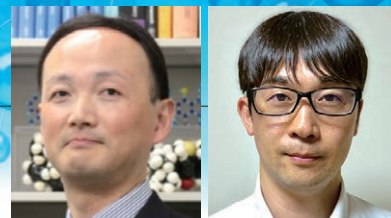
3. 学生の皆さんへ

生物が用いる変換反応は意外性に富んでおり、いつも驚かされています。そのような変換反応を理解し、積極的に活用することで、新たな分子を生み出す可能性が広がります。有機化学を基盤としつつも、遺伝子組換えや酵素構造解析も研究ツールとして活用することで新たな研究を展開していきましょう。

後藤・小野研究室

URL <http://www.chemistry.titech.ac.jp/~goto/>

E-mail 後藤 / goto@chem.titech.ac.jp 小野 / k.ono@chem.titech.ac.jp

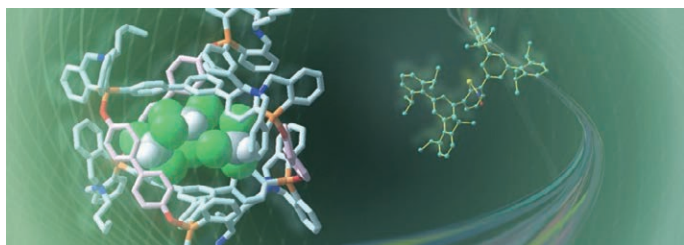


後藤 敬 教授 小野 公輔 准教授

ナノサイズ有機分子の化学： 機能を最大限に引き出すデザイン戦略

1. はじめに

有機化学の大きな特長として、分子を自在にデザインすることで、目的に応じたマイクロ空間を創り出せる点が挙げられます。我々の研究室では、**独自にデザインしたナノサイズ有機分子および超分子を活用して、従来の常識では困難だった物質合成や機能の発現に挑戦**しています。生体反応機構の解明や高反応性金属錯体の開発など、応用範囲は多岐にわたります。有機構造化学、有機元素化学を基盤として、様々な分野において、「他の分子ではできないこと」に挑戦しています。



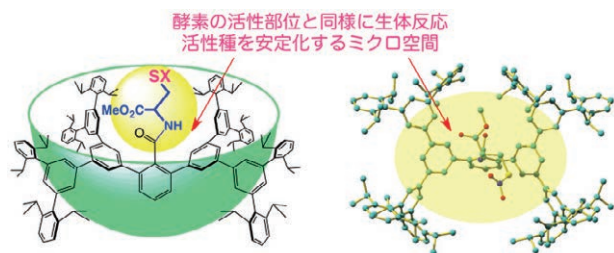
独自デザインのマイクロな反応空間の創製

2. 研究テーマ

(1) ナノサイズ分子キャビティを活用した生体反応活性種モデル分子の合成と生体反応機構の化学的解明

生体反応のメカニズムを解明するためには、様々な解析手段を適用できる人工系でのモデル研究により、反応活性種の構造および反応性について分子レベルの情報を得ることが不可欠です。しかし、生体内では安定に存在して生理作用を及ぼす反応中間体が、人工系では極めて不安定であるためにモデル系を構築することができない場合が多くあります。たとえば、生体内では数十時間も安定に存在し、重要な生理作用を及ぼしている化学種が、人工系では最長でもミリ秒オーダーの寿命しかもたない例などが知られています。

このような活性種が関わる生体反応機構を明らかにするためには、これまでの「非常識」を「常識」に変える革新的な人工モデル系を構築する必要があります。当研究室では、この目的を達成するために、巨大分子キャビティを分子レベルの保護容器として活用し、内部空間に活性なユニットを導入したモデル分子を独自に開発しました。それにより、これまで合成できなかったさまざまな生体反応活性種を手にとれる形に安定化し、従来ブラックボックスだった生体反応



ナノサイズキャビティに活性アミノ酸部位を導入したモデル分子

機構を化学的に解明しています。

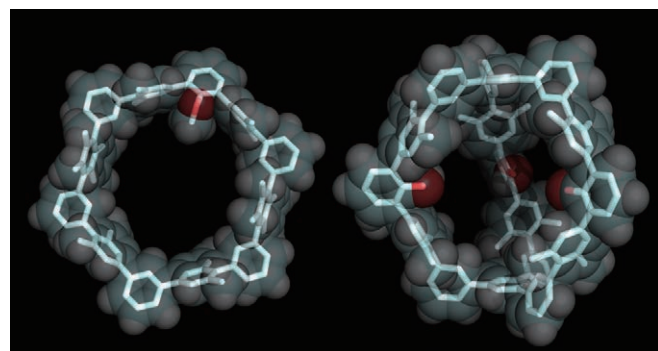
また、分子キャビティを配位子として活用すれば、金属錯体が本来もっていないながらこれまで見出されていなかった高い反応性を引き出すことができます。たとえば、キャビティ型カルベン配位子をもつパラジウム錯体を合成し、空気中に0.04%しか存在しない二酸化炭素を、結晶相で固定することに成功しています。

(2) 高周期元素の特性を活用した機能性超分子の開発

巨大な内部空間をもつ分子カプセルや、輪と軸が絡み合ったロタキサン of 効率的な合成法を開発し、超分子の特性を活かした反応空間の創製に取り組んでいます。ケイ素や硫黄、セレンなど高周期元素の特性を活用することで、複雑な構造をもった超分子構造を効率よく組み上げることが可能になっています。

(3) 共有結合性中空構造体

分子サイズの中空構造体は他の分子を内包することができ、内包された分子は時としてその性質を大きく変えることがあります。たとえば、不安定化学種を安定化したり、逆に不活性化化合物を活性化したりします。私達は、内部空間を同種もしくは異種の官能基で自在に修飾できる独自の共有結合性中空構造体（例えば大環状分子やかご状分子）を合成し、そこに内包した分子の未知の性質を引き出すことを目指しています。また中空構造体の新たな利用法も研究しています。



オリゴフェニレンリング (左) オリゴフェニレンケージ (右)

3. 学生の皆さんへ

自分がデザインした新しい分子を活用することで、世界で多くの研究者が挑みつづ合成できずにいた化学種を、安定に手に取ったときの思いは格別です。もちろんそこに至るまでの過程は試行錯誤の連続ですが、その過程こそが化学研究の醍醐味だと考えています。当研究室では研究テーマは基本的に一人ひとり独立しており、互いに切磋琢磨しながらターゲットに挑戦しています。硫黄やセレン、ホウ素、ケイ素、リンなどいろいろなheteroatomを扱っている研究室らしく、さまざまな大学の出身者が集まっているのも当研究室の特徴です。heterogeneousなバックグラウンドをもったメンバーが、協力し合いながら研究室の歴史をつくっています。



鷹谷 純 准教授

～不可能を可能にする～

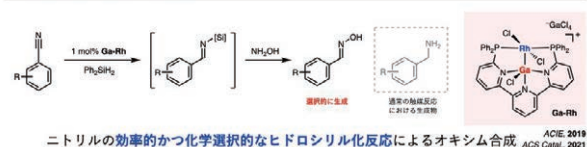
新触媒の創製に基づく革新的有機合成反応の開発

1. はじめに

有機合成化学とは、読んで字のごとく「有機化合物を自由自在に合成する」学問です。我々の生活は、多種多様な有機化合物に支えられて成り立っています。すなわち有機合成化学とは、現代の人類社会の根幹を成す「分子レベルのモノづくり」といえるでしょう。実際に、有機化学の教科書や専門書を開くと、そこには先人達が開発してきた何百という有機反応が収録されています。それらを利用することで、我々は様々な有機分子を自由自在に合成することができるのです。

一方、我々が研究しているのは、教科書には載っていないけれども「もしこんな分子変換ができればいいな」という、**新反応の開発**です。例えば、「石油資源である単純炭化水素を有用化合物に直接変換する反応」、「欲しい物だけを選択的に合成する反応」、「メタンや窒素など普遍小分子を有用有機化合物へと変換する反応」など、**従来の不可能を可能にする革新的有機合成反応**の開発を目指しています。このような分子変換は、試薬会社で売っている既存の触媒や教科書に載っている既存の反応の組み合わせでは実現できません。我々は、これまでに無い優れた機能を備えた**オリジナルの遷移金属触媒や反応活性種**を自ら創製して利用しています。このようなゼロからイチの創出を目指す学術的な基礎研究こそが、未来の人類社会の役に立つ重要な科学技術に大成すると考え、日々研究に取り組んでいます。

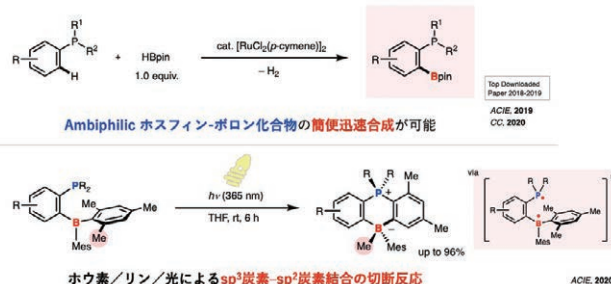
ています。他にも、その組み合わせを遷移金属同士、さらには3つ以上へと拡張した触媒開発や、メタンの効率的分子変換反応の開発などにも取り組んでいます。



(2) 光／多元素協働反応系の開拓

炭素－水素結合や炭素－炭素結合に代表される不活性結合の切断反応は、石油資源である単純炭化水素分子の直接変換につながるものとして、実験室レベルだけでなく工業的にも重要です。通常このような不活性結合を切断するには、極めて高い反応性をもつ遷移金属錯体（特に希少な貴金属）が必要とされます。

我々は、複数の有機典型元素や典型金属元素、光エネルギーを協働的に利用することで、希少な貴金属に頼らない触媒反応や、高効率かつ省資源型の革新的物質合成法の開発に取り組んでいます。一例として、ルイス塩基性のリン原子とルイス酸性のホウ素原子を併せ持つ Ambiphilic 化合物の効率的合成法の開発を基点とし、その光反応を新たに開拓することで、ホウ素による不活性炭素－炭素結合切断を伴う新奇反応を実現しました。複数の典型元素と光エネルギーを巧みに利用することで、貴金属の機能を超越する新たな高反応性活性種の創出が可能なのです。また、得られた Ambiphilic パイ共役系化合物を利用した機能性分子の開発にも取り組んでいます。まさに「**新反応は新分子の創出を可能とし、新しい化学を切り拓く**」といえます。他にも、光エネルギーと遷移金属触媒作用を組み合わせた不活性結合切断反応や、芳香族化合物の脱芳香化反応など、数々の革新的新反応を開発しています。



2. 研究テーマ

(1) 複核金属錯体触媒の創製に基づく反応開発

クロスカップリング反応を始めとする通常の金属触媒反応では、1つの金属原子が触媒として機能します。しかし、周期表上の限られたごく一部の貴金属に依存した現代の物質合成は限界を向かえつつあります。我々は、独自に開発した鑄型配位子を用いることで、金属－金属結合をもつ異種金属二核錯体の精密自在合成法を確立しました。これにより、周期表上の様々な2つの金属を組み合わせた新しい金属触媒ライブラリーが創出可能です。2つの金属が織りなす特異な電子状態や金属間協働作用を利用することで、従来の単核金属触媒では実現できなかった合成反応の開発や、従来触媒を凌駕する超高活性触媒の創出などを目指して研究を行っています。

一例として、典型金属であるアルミニウムと遷移金属であるパラジウムを組み合わせた二核錯体触媒を用いることで、不活性小分子である二酸化炭素の還元反応が極めて効率的に進行することを見出し、同反応における触媒活性の世界最高記録を樹立しました。また、ガリウムとロジウムを組み合わせることで、低反応性分子であるニトリルをアミンではなくオキシムへと選択的に変換する反応の開発にも成功し

3. 学生の皆さんへ

「新しい分子の合成」は、化学研究の醍醐味の1つです。自分たちが創り出した世界に1つしか無い分子触媒が、今まで誰も見たことのない新しい反応を起こした時の感動と喜びは、言葉で言い表すことができません。みなさんも是非一緒に、同じ感動を味わってみませんか？



豊田 真司 教授

芳香環の配列を自在に設計して 新しい構造や機能を創る

1. 研究の概要

ベンゼン、ナフタレンやアントラセンのような芳香環は一般にパネル状の平面構造をもち、 π (パイ) 電子が豊富な領域があります。したがって、複数の芳香環を配列することにより、様々な形、動きや電子の広がりをもつ分子系を設計することができます。当研究室では、このような芳香環の特徴を活かして、特異な構造や性質をもつ新しい π 共役系化合物の創製を目指して、構造、合成、物性などの観点から研究を行っています(図1)。研究を行うにあたり、有機化合物の構造や反応に関する理論の確立を指向した考え方に基づくこと(物理有機化学)、研究の目的に応じて標的とする分子を設計して実践と考察を繰り返して設計を精密化すること(分子設計)、分子の三次元的な構造を意識して性質を詳しく解析すること(立体化学)、さらに標的とした化合物を効率的に合成できるようにプロセスを最適化することを重視しています。また、分子間の弱い相互作用を活用して、分子集合体を構築する研究も行っています(超分子化学)。以下、いくつかの研究テーマを紹介します。

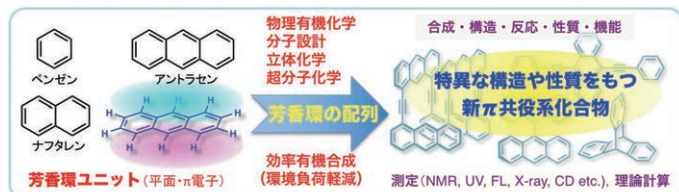


図1 研究の概要 ~簡単な芳香環ユニットから無限の構造を設計する~

2. アントラセンの集積—多様な構造を組み立てる

アントラセンは三つのベンゼン環が直線的に縮合した構造をもち、光を照射すると発光したり反応したりするため、その誘導体は蛍光色素や電子デバイス材料として用いられています。アントラセンを直接またはリンカーを介して連結すると、連結するユニットの数や位置によって無限の構造が設計できます。これまでに、アントラセンユニットを連続的に集積して種々のオリゴマーを合成してきました(図2)。これらの化合物の構造や性質を調べることで、分子の形や動き、芳香環の間の電子的相互作用、外部要因による電子状態の変化などを明らかにしました。このような拡張性の高い分子設

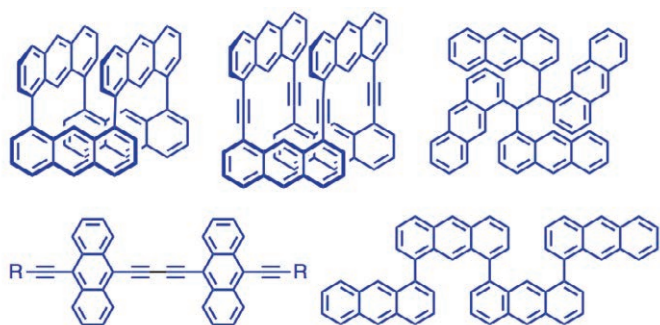


図2 研究室で合成された新しいアントラセン集積化合物

計の指針に基づいて、誰も考えつかないような新しい π 共役系化合物を創り出すための研究を行っています。

アントラセンを環状に連結することにより、図3に示す内部に空間をもつ大環状化合物の合成に成功しました。このリング形分子は水素とパイ電子の間の弱い相互作用によって空間にフラレン C_{60} 分子を取り込み、錯体を形成します。この錯体は、ナノサイズの土星形分子「ナノ土星」として注目されています。また、ケージ形の構造を構築して、さらに強くフラレンを捕まえるホストを合成しました。

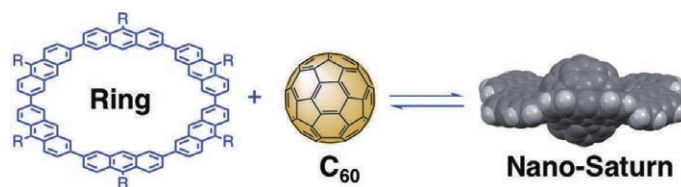


図3 大環状化合物とフラレンの会合によるナノ土星錯体の形成

3. 芳香環の拡張—パイ共役系を広げる

アントラセン環にさらに芳香環を縮合すると、 π 共役系を広げることができます。環化の位置と様式を制御することにより、様々な多環芳香族化合物の合成に成功しました(図4)。これらの化合物は構造に応じて独自の性質を示し、たとえば5員環を含むルビセンは特徴的な濃赤色を示します。 π 共役系を拡張する反応を高度に組み合わせて、炭素の同素体であるグラフェンやフラレンの部分構造やらせん形やプロペラ形構造をもつ化合物の合成に挑戦しています。

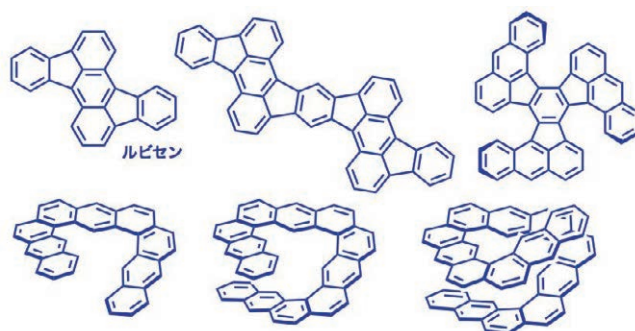


図4 π 共役系拡張多環芳香族化合物

4. 教育の方針

有機化学の研究を通して、高度な専門性、幅広い関連分野の知識および論理的な思考を備えたリーダーシップを発揮できる理工系の人材を養成します。研究室では実験や測定だけでなく、研究報告および発表、質疑討論、論文講読を行い、バランスのとれたラボとデスクワークの両面から高度で実践的な能力が身に付くようにします。研究を広く世界に発信し、グローバル化社会で活躍できるようにするため、報告書や論文の作成、研究発表、外国人研究者との交流における英語力やコミュニケーション力の向上を目指します。

野上・寺田研究室

URL <http://www.ksvo.titech.ac.jp/jpn/index.html>

E-mail 野上/ knogami@ksvo.titech.ac.jp 寺田/ terada@ksvo.titech.ac.jp



野上 健治 教授 寺田 暁彦 准教授

実験室は本物の火山 ～火山現象の化学・熱学的研究～

1. 研究方針と研究課題

■火山化学 (野上)

主たる研究目的は、地表で採取した火山ガス・温泉水を地球化学的に分析することでマグマの状態を知ることにあります。

活火山の地下にはマグマが存在し、そのマグマは揮発性成分 (H_2O 、 CO_2 、 SO_2 、 H_2S 、 HCl 、 H_2 、 N_2 、希ガスなど) を放出しています。この現象をマグマ脱ガスと言います。マグマ脱ガスが速やかに進むとマグマ全体に泡が発生し、マグマの比重が小さくなるので地表まで上昇してきます。これがマグマ噴火です。逆に、マグマ脱ガスの速度が小さい時は、揮発性成分だけが火山体内を上昇し、火山ガス、温泉水、火口湖水として地表に表れます。このように、揮発性成分がマグマから地表へと至る通路を熱水系と呼びます。

熱水系では、地下水混入や気相-液相分離などの複雑な現象が起きるので、本来の揮発性成分の化学組成や同位体比組成は大きく変化します。これらの化学的なプロセスを解明することが、火山ガスや温泉からマグマの状態を知るために重要です。

■火山熱学 (寺田)

マグマには火山ガスが溶け込んでいます。これが発泡することでマグマが激しく膨張し、しばしば莫大な力学エネルギーが生まれます。これが火山爆発です。一方で、噴火を起こしていない火山からも、火山ガスが静かに、大量に放出されています。このような日常の「ガス抜き」は、火山活動の多様性に関係します。そのため、火山ガスの放出量や輸送過程を研究することが重要です。

火山ガスは大きなエンタルピーを有しているので、地表付近では様々な熱現象として認識されます。主な現象として、上空へ立ち昇る真黒い噴煙、白いモクモクとした噴気、あるいは美しい火口湖などが挙げられます。これら熱現象を、実際の活動火山に出かけて観測、解析して、噴火前～噴火中に火山地下浅部で進行するプロセスを理解することが目標です。

火山は特殊な環境にありますから、市販の装置が使えない場面も珍しくありません。そもそも、確立された観測方法が存在しない場合も多いのです。新たな観測装置を開発して、今まで誰も測れなかった量を測ることも楽しみの一つです (図1)。



図1. 御嶽山平成26年噴火の際には、急遽、ドローンに火山ガス分析装置を搭載し、人間の手では不可能な、危険な火口でのガス観測に成功しました。

2. 教育方針

既存の方法を単に適用するのではなく、学生の興味に基づき、実験や現場観察を通じて研究対象や方法を考えます。危険なことはありませんが、自然が相手ですので、良いデータを取るために様々な苦労があるでしょう。それも含めて、現場で体験してほしいと思います。

火山現象には様々な要因が関与するため、火山の研究手法は多彩です。そのため、専門分野の深い知識を土台として、様々な視点から総合的に考えることが重要です。月1回、大岡山で開催される多元レジリエンス研究センター火山・地震部門のセミナーに出席し、専門性の異なる研究者との議論に参加します。多元レジリエンス研究センター火山・地震部門としての構成は、当センターのホームページをご覧ください。

3. 研究生活

本研究室は、大岡山 (南5号館) と草津白根火山観測所 (群馬県草津町) の2箇所に拠点を有しています。学生には大岡山と観測所の両方に机を用意しますので、必要に応じて、観測所へ出かける形になります。

交通費は研究室が負担します。観測所にはシャワーを完備した宿泊棟があり、近くに無料の温泉施設もあります。食事が自炊となる以外に、学生に金銭的負担はありませんので、ご安心ください。

我々の実験室は本物の火山ですので、必要に応じて全国の活火山へ出掛けます。他研究室とはちょっと違う、ユニークな大学院生活を送ることになるでしょう。



図2. 草津白根火山観測所



石谷 治 教授

金属錯体の光反応性と光機能： 金属錯体を中核とした人工光合成システムの構築

1. はじめに

我々の目標は、光の有効利用に資する新しい化学的概念を創成することにあります。21世紀は「光の時代」と言われていますが、その基盤を成す光反応化学や光機能化学は、まだ十分な発展を遂げていません。例えば、大気中の二酸化炭素濃度の上昇による地球温暖化や化石燃料の枯渇によるエネルギー危機等、人類が将来直面する深刻な問題に対して、光エネルギーの有効利用は、理想的な解決法となる可能性があります。しかし、地球に降り注ぐ太陽光を人工的な手法により利用する化学的な方法は、残念ながらまだ初歩的な段階に留まっています。また、分子レベルの機能性素子は、電子の代わりに光子で駆動するものにならなければいけません、光機能性発現の化学的知見は極度に不足しているのが現状です。

我々は、実験化学的な立場から、これらの問題の解決にチャレンジしています。特に、これまで報告されていない新しい化合物群・方法論・概念を打ち立てていくことを心掛けています。具体的には、(1) CO₂の資源化を目指し、高機能金属錯体光触媒およびそれを中核とし半導体や光捕集材料と融合したハイブリッド光触媒の創製を目指しています。また、(2) 植物の光合成と類似の機能を有する人工的なシステム（人工光合成）の構築と、(3) 光や電子の移動を自在に制御できる錯体超分子（分子ワイヤー等）の分子設計指針と合成法の確立を行っています。これらの研究を通して、(4) まだよく分かっていない「有機金属錯体の光反応化学」の分野に、新しい知見を加えていくことも重要な目的です。以下に、代表的な研究テーマを紹介します。

2. 研究テーマ

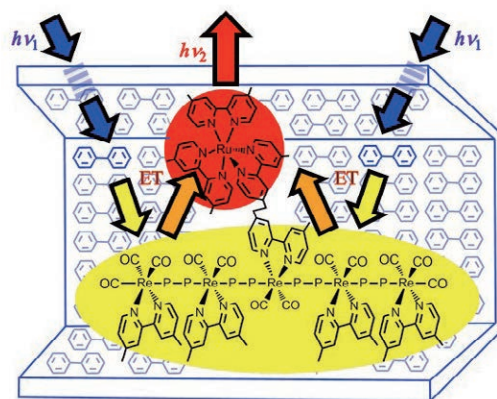
(1) 人工光合成：金属錯体および金属錯体

—半導体複合系を用いた光触媒的CO₂還元

光エネルギーを利用してCO₂を還元する光触媒の開発は、地球温暖化やエネルギー問題の解決に資する重要な研究課題です。我々は、CO₂還元光触媒開発において、世界を先導する成果を上げてきました。金属錯体を光触媒として用いることで、最も高い効率、耐久性そして生成物選択性で進行するCO₂還元反応系を構築することに成功しています。このように優れた金属錯体光触媒を中核とし、半導体光触媒や光捕集機能を持つ固体材料と融合したハイブリッド光触媒システムの開発も進めています。

(2) 光合成と同様な原理と効率で光を捕集するハイブリッド

植物の光合成は、太陽光エネルギーを化学エネルギーに変換する素晴らしいシステムです。その優れた機能の一つに、太陽光を効率よく捕集し活用する光アンテナ作用があります。我々が独自に発見したレニウム錯体の光配位子交換反応を利用すると、新しい光機能性材料である一次元レニウム錯体ポリマーが合成できます。この新規化合物群は、分子内のどの部分が光を吸収しても、光エネルギーは分子内をホッピングし、あらゆる場所へと高速で移動し続け興味深い光物性を示します。我々は、この光現象を活用することで、天然の光合成が太陽光を効率よく利用できる鍵となっている光捕集機能を再現することに世界で初めて成功しました。



二段階光捕集系：壁に組み込んだ有機分子が吸収した光エネルギーがレニウムポリマーを経由して、最終的に全てレニウム錯体に集約される

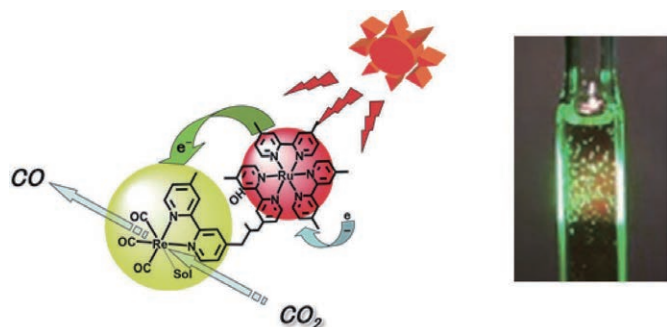
3. 研究室の構成、教育方針、特徴

石谷研究室は、教授、助教3名、博士研究員1名、秘書1名のスタッフ6名と大学院生9名（内訳：博士2名、修士7名）、学部生1名の全16名から構成され、スタッフと学生が親密に話し合いながら運営されています。研究に関する議論もスタッフと学生間で活発に行われており、世界で初めての「化合物」「化学反応」「機能」の開発を目指し、研究に励んでいます。また、雑誌会や輪講などを通じて、幅広い化学の知識の習得にも努めています。学生は、国内外の学会に積極的に参加し研究発表していますし、研究室を訪問された研究者との議論を行う機会も多くあります。プレゼンテーションの技術を磨くことも重要視されており、ほぼ毎年、学生は、学会や討論会で賞を受賞しています。

その他、イベント毎に開かれる飲み会や春・冬に企画される研究室旅行等、研究室内の親睦を深める行事も催されています。

- ・光反応化学・光触媒に興味がある。
- ・金属錯体の光化学を研究してみたい。
- ・有機・無機合成も機能性評価も両方やってみたい。
- ・研究者として活躍する夢を持っている。

石谷研究室は、そんな学生諸君の参加を歓迎します。



超分子錯体光触媒による可視光CO₂還元：
反応溶液から生成物であるCOが高効率に生成している様子

植草研究室

URL <http://www.chemistry.titech.ac.jp/~uekusa/>

E-mail uekusa@chem.titech.ac.jp



植草 秀裕 准教授

有機結晶の設計・機能・動的解析を総合的に展開する

1. 結晶の中の魅力的な世界

有機物を作る分子性結晶では、比較的弱い相互作用で結び付けられ分子が配列するため、結晶でありながらある種の“柔らかさ”を持っています。このため有機結晶は固体でありながら、周囲の環境変化や外部からの刺激により、容易に結晶内での分子の変化や、結晶構造の再配列が可能です。当グループでは、このような動的な挙動に注目しながら、有機結晶の設計・解析・物性について総合的に研究を展開しています。

有機結晶は結晶性材料としても重要で、特に医薬品結晶や色調変化材料として私たちの生活にも深く関わっています。結晶性物質を設計・理解するために最も重要なことは、結晶構造解析により結晶中の分子構造や分子の配列を三次元的に明らかにすることです。このためX線結晶解析の高い技術を基本とし、環境変化型熱分析・各種分光測定・理論計算なども組み合わせて研究します。

2. 研究テーマ

(1) 医薬品原薬の設計・構造・物性

医薬品の多くは結晶の形で生産、加工、貯蔵、使用されるため、有機結晶材料として興味深い研究対象です。現在、医薬品として好ましい性質（溶けやすく、保存安定性が高いなど）を持つ、より優れた医薬品結晶の創製が求められています。私達はクリスタル・エンジニアリングの観点から、結晶設計や結晶変換を行い、さらに結晶構造を詳細に解析することで、よりよい物性への改善や構造と物性の相関を調べています。

結晶設計としては、複数の医薬品原薬成分を結晶中で配列した、多成分系結晶を設計・合成しています（図1）。有機分子の構造や分子間相互作用を理解するため、結晶構造解析による知見やデータベースの利用、理論計算などを行って研究を進めています。

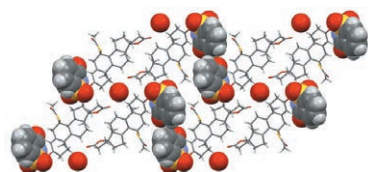


図1. 三種類の成分を含む多成分系医薬品結晶の設計と結晶構造 (prednisolone saccharin hemihydrate)

有機結晶は周囲の環境変化により、結晶構造、そして安定性・溶解度などの物性が大きく変化するため、結晶変換挙動として注目しています。特に湿度・温度変化による水和物結晶の脱水と・水和現象では、結晶構造変化により粉末状の結晶しか得られないのですが、近年注目されている粉末未知結晶構造解析法を使い、高分解能な粉末回折データから、結晶の三次元構造の解析に成功しています。

殺菌薬アクリノール結晶の研究では、水和物結晶が構造を保って無水和物結晶Ⅰ相へと脱水転移する様子、さらに加熱によりⅡ相へ熱構造転移の様子を調べています（図2）。これらの結晶構造は粉末結晶構造解析法により決定し、吸水特性の違いや溶出速度の大きな違いを解明しました。この研究は、多数の有機結晶・医薬品原薬結晶の転移メカニズム解明へと展開しています。

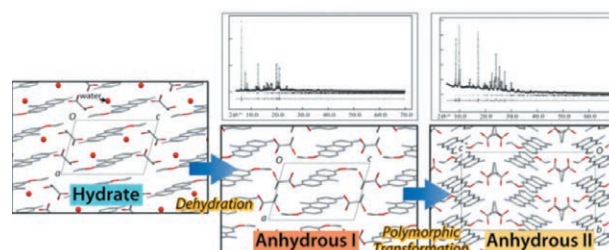


図2. アクリノール水和物結晶からの脱水と転移現象の粉末未知結晶構造解析。無水和物Ⅰ相は水和物相と構造類似のため容易に水和するが、Ⅱ相は高湿度下でも安定で溶出速度の速い新規相である。

(2) クロミズムを示す結晶の創製と物性制御

刺激により、可逆的に色調が変化するクロミズム現象の研究は、センサーなどの機能性材料創製への展開が期待されています。結晶への光照射で可逆的に結晶の色が変化するフォトクロミック結晶は、「光情報記録媒体」や調光サングラスの材料です。よりよいフォトクロミズム特性をもつ結晶を設計するために、分子構造・結晶構造変化を明らかにした反応のメカニズム解明の研究が重要です。

フォトクロミズムを示す分子の性質を結晶中で制御する研究では、結晶中で光により異性化するコバルト錯体にフォトクロミック分子を配位した新規錯体を合成しました（図3）。結晶に可視光を照射して錯体を異性化させると分子周囲の結晶環境が変化し、フォトクロミズム制御に成功しました。そのメカニズムを結晶の精密な三次元構造解析から定量的に解明しました。これまでサリチリデンアニリン、アゾベンゼン、スピロピラン等のフォトクロミズム制御に成功していますが、望みの光物性を示す新規光機能性物質の創成を目指して研究を展開しています。

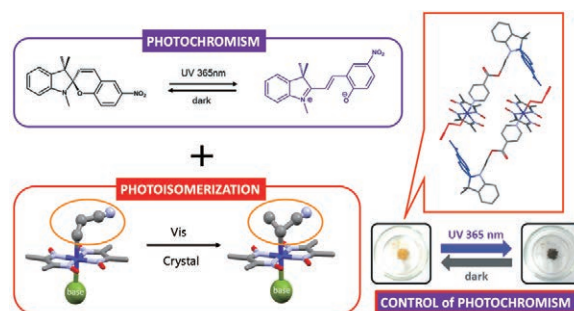


図3. 可視光・紫外光で変化するフォトクロミックコバルト錯体有機フォトクロミズム+コバルト錯体の結晶相光異性化反応（左図）、その場フォトクロミズム制御を行う新規錯体の結晶構造（右上図）とフォトクロミック色変化（右下図）

3. 学生の皆さんへ

私達の研究室では、結晶構造を中心とした構造化学が研究の中心です。このため単結晶・粉末結晶構造解析、結晶成長、化合物や固体の多種の物性測定、また合成に近い分野まで、多彩な機器を使って幅広く研究と勉強ができます。ぜひ、結晶の中の魅力的な世界に触れてみてください。



川口 博之 教授

～金属の新しい性質を探る～「錯体化学」

1. はじめに

金属錯体は、有機および典型元素化合物から構成される配位子が金属イオンの周囲を取り囲んだ化合物です。さまざまな性質をもつ金属イオンと多種多様な配位子に組み込むことにより、個性豊かな金属錯体を無尽蔵につくり出すことができます。私たちの研究グループでは、配位子設計に基づいて金属錯体を合成し、その構造と物性・反応性の相関関係について理解を深めようと研究を行っています。特に、新しく設計・合成した金属錯体を「構造が明確な反応場」として用いて、通常では反応性が乏しい窒素分子、一酸化炭素、二酸化炭素などの小分子の新しい反応の開拓を行っています。現在の研究課題としては、(1) 新しい配位子の設計と合成、(2) 多座配位子の配位化学、(3) 電子欠損型ヒドリド錯体の化学、(4) 金属錯体をもちいた小分子活性化、に取り組んでいます。

2. 研究テーマ

(1) 電子欠損型ヒドリド錯体

金属に水素原子が結合した金属ヒドリドは均一系、不均一系を問わず、さまざまな触媒反応や量論反応における鍵化合物として重要な化学種です。ヒドリド配位子をもつ金属錯体の研究の歴史は古く、1930年代の初めにはヒドリド錯体の初めての合成が報告されています。以降、ヒドリド錯体の研究が数多く報告されています。これらの錯体を眺めてみると、その多くはホスフィン配位子、カルボニル配位子などの、いわゆるソフトな配位子により安定化された錯体です。その結果、これらのヒドリド錯体の特徴として、錯体は電子的かつ立体的に飽和したソフトな状態、低原子価状態となる傾向があり、中心金属の最外殻の原子価軌道がすべて充填された状態をとります(18電子錯体)。

一方、これら電子飽和型ヒドリド錯体と正反対の電子状態をもつ錯体として、電子欠損型ヒドリド錯体を考えることができます。ヒドリド配位子、高原子価金属およびハードな配位子のみから構成される金属錯体です。この様な金属錯体では、大きく分極した金属-ヒドリド結合、電子的かつ立体的に不飽和な配位環境、ルイス酸性の強い金属中心の組み合わせにより、従来の電子飽和型ヒドリド錯体にはない特性を持つことが期待できます。

現在、私たちの研究グループでは、ハードな配位子としてフェノキシド配位子をもつ高原子価ヒドリド錯体に着目し、研究を進めています。

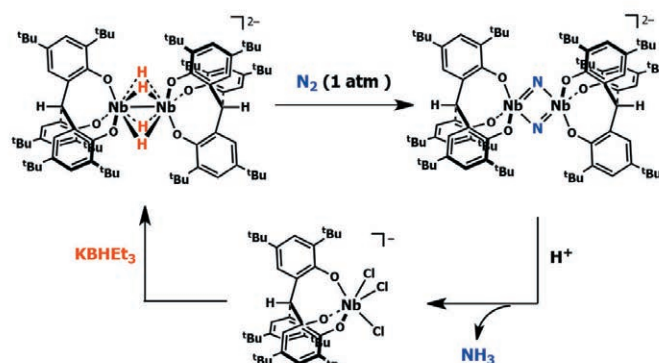
(2) 金属錯体をもちいた小分子活性化

電子欠損型ヒドリド錯体の特異な性質のひとつの例として、その高い反応性を利用した小分子の活性化について以下に紹介します。

三脚型のフェノキシド配位子を持つニオブのヒドリド錯体は窒素分子と穏和な条件下で反応し、 $N \equiv N_3$ 重結合の切断により、ニトリド錯体が生成することを明らかにしました。ヒドリド錯体による窒素分子の活性化は生体触媒や工業触媒における窒素固定化反応の機構と関連し興味もたれています。本反応はヒドリド錯体を用いた

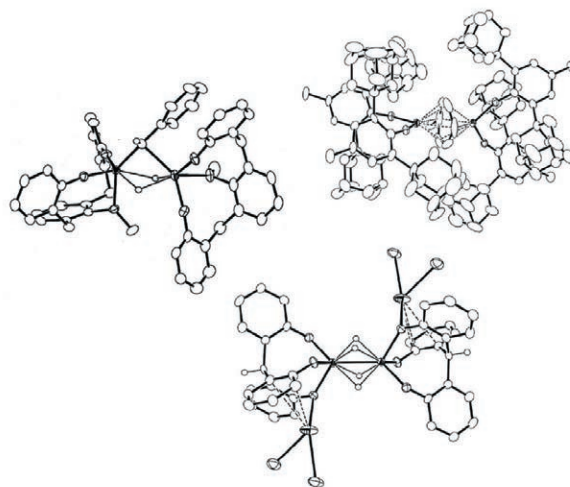
窒素分子切断の初めての報告例です。

さらに、窒素分子から合成したニトリド錯体は、酸と反応するとアンモニアを生成します。さらにヒドリド試薬を作用させるとヒドリド錯体が再成することを見出しました。以上の反応を組み合わせることにより、電子欠損型ヒドリド錯体を用い、 N_2 を NH_3 へ変換する合成サイクルの構築を達成しました。



3. 学生の皆さんへ

錯体化学は、有機化学および無機化学における知見を活かして、金属イオンと配位子を選択し、ひとつの分子に組み立てることにより、これまでに誰も見たことがない、予想もしなかった物性や反応性をもつ物質を生み出すことに挑戦する科学です。その研究対象は機能性材料から触媒まで多岐にわたります。私たちの研究グループでは、「自分たちがつくり出した、自分たちの金属錯体」にこだわり、この広範な分野に自分の科学を築く意欲ある人を待っています。



私たちの研究室で合成した金属錯体

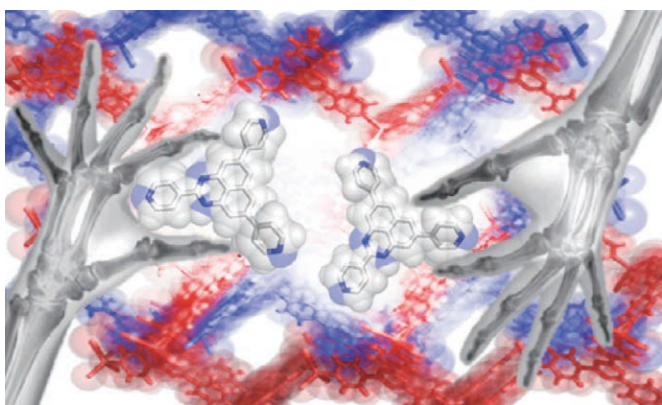


河野 正規 教授

～非平衡下でのものづくりー空間とポテンシャルの制御～ 「結晶性超分子化学」

1. 我々の目指すところ、それはオンリーワンの化学

自然界では温和な条件下で不活性な基質を活性化し、非常に精密な「化学反応」を行っています。そのポイントの一つは弱い分子間相互作用により形成される準安定状態です。これまでの物質科学の発展のおかげで、物質に介在する分子間相互作用についての理解が深化してきましたが、それを積極的にものづくりに利用していくことはまさに今世紀始まったばかりといえるでしょう。その理由は、人工系では高度に制御された準安定な構造体を作り出すことや構造の解明が難しいからです。そこで我々は、鍵となる分子を設計・合成することにより分子間の相互作用を速度論的に制御して、これまでにない細孔性材料の開発を行い、デバイスへの応用や構造・物性相関の解明などを目指し、次の基礎的な研究を行っています。



研究イメージ図：酸化還元特性を有する配位子からなるネットワーク錯体のX線による直接観察

2. 研究テーマ

(1) ナノ空間を速度論的に作る研究

従来の配位子と金属イオンから形成される細孔性ネットワーク錯体は、熱力学的支配のもと自己集合の原理に基づいて合成されてきました。実はその過程の中には様々な中間体が存在しています。その中間体を利用することにより、熱力学的支配下の生成物とは異なる構造体を構築することができます。また、速度論的に構造を組み上げることにより、原理的に細孔内にゲストと相互作用するサイトを生成することができます。そのような細孔体は、従来には見られないような吸着・分離・反応・物性などを示すことが期待されます。現在、独自の配位子を設計・合成して、酸化還元特性を有するユニークな細孔体の研究を行っています。

(2) ナノ空間を利用した反応と見る化学

細孔体を合成するだけでなく、細孔体のナノ空間内で様々な反応を検討し、メカニズムの研究を行っています。特に、我々の主な分析手段の一つであるその場観察構造解析法を利用し、反応を直接「見る」研究を行っています。「百聞は一見に如かず」が本課題のキーワードです。

(3) ナノ空間の物性研究

細孔性ネットワーク錯体は、通常バンドギャップが大きく絶縁体ですが、配位子の酸化還元電位を適切に制御することにより電導性を示すようになります。そのような配位子を金属イオンで無限にネットワーク化することで出現する基礎的な物性の研究を行います。特に、物性の検討は、固体状態の電気化学測定に基づくため、解釈がとても難しいですが、様々な手法と組み合わせることによりチャレンジしていきたいと思います。

(4) ナノ空間を利用したデバイス設計

ナノ空間を有する結晶性材料は、その表面積の広さからシグナル強度の増強による高感度化や基質選択性などが期待できることからデバイス材料として有望です。特に、我々が研究している細孔体は酸化還元特性を有することから電導性を示します。しかも、構造や方向性によって電導度が大きく変化する異方性を示します。これらの特徴を生かして、細孔体で形成された薄膜を作製することにより新しいタイプのセンサーの開発を目指しています。また、新しい設計指針を提供できるように、センシングのメカニズムを分子レベルで検討する基礎的な研究を行っています。

(5) 結晶相やアモルファス相の未知構造研究

物質を合成した後は、回折法による構造決定を行います。また、準安定な構造はよく相転移を起こし、大きな構造変化とともに物性も変化します。構造解析の対象は、単結晶、結晶性粉末、アモルファスと様々です。そのため我々は、放射光や実験室系のX線を用いて未知構造解析を行います。特に、粉末未知構造解析は、原理的に実験から得られる回折情報が単結晶法に比べて少ないことから結晶学の専門的知識が要求されます。実際面白い物性を示す材料は粉末状であることがしばしばあり、粉末未知構造解析法はこれからさらに成熟していくべき研究領域であります。また、全散乱法とEXAFSによるアモルファス相の研究も新たに始め、固体の構造研究をマクロからナノサイズまで横断的にを行います。

3. 学生の皆さんへ

我々の研究室では、構造と物性の解明のために、有機合成から錯体合成、放射光などを利用した高度な構造解析、顕微分光測定・理論計算による電子状態の解明まで、様々な知識が必要になります。まさに化学のあらゆる英知を結集して協奏的に取り組まなければならない「化学の百貨店」です。これまで築き上げてきた幅広い国際的ネットワークを利用して共同研究も積極的に行っています。国際的共同研究・交流を通して、メンバーは新しい知識・文化と接することにより、自然と国際感覚を学ぶことができます。科学に国境はありません。

モットーは、「よく学び、よく遊ぶ」です。化学が好きで、未知の研究分野を開拓することに興味のある方は、「オンリーワンの研究～新たな研究領域の創生～」を是非一緒に追求しませんか？

火原・福原研究室

URL <http://www.chemistry.titech.ac.jp/~hibara/>

E-mail 火原 / ahibara@chem.titech.ac.jp 福原 / gaku@chem.titech.ac.jp



火原 彰秀 教授



福原 学 准教授

分析・計測のフロンティア

1. 分析・計測のフロンティア

分析化学は、物質の定量・定性・物性解明や、時間分解計測・イメージングなどに関する方法論的研究分野です。研究テーマは、自然中あるいは人工プロセス中に存在するナノ・マイクロサイズ物質へのアプローチや、超分子の得意な性質に基づくアプローチなど多岐にわたります。試料や計測手法に関する考え方・思考手段を深く追求し、オンリーワンの研究を展開しています。

2. 研究テーマ

(1) ナノ・マイクロサイズ界面計測法

気液界面や液液界面に自然に発生する「表面張力波の自発共鳴現象」と「その波によるレーザ光の散乱」を用いた世界唯一のリモート表面張力計測法を研究しています。大気中エアロゾル表面、生体膜を模倣したリン脂質二重膜、マイクロバブル表面などの未解明現象が多く残されている表面・界面を計測対象に選び、現象解明・装置開発研究を行います。

(2) ナノ・マイクロ流体分析法

光リソグラフィなどの先端的加工法を用いて化学操作を集積化する研究に取り組んでいます。独自に発明した液晶デバイスによるイメージ解析計測法を用いる蛍光偏光イムノアッセイ法を、原理・応用の両面から研究しています。簡易な健康モニタ・食品分析・環境分析手法実現を目指します。

(3) 有機フッ素化合物の分析化学

有機フッ素化合物は、環境・人体に悪影響があるかもしれず、排出規制が検討されています。しかし、多くの場合、代替化合物がなく、分子会合挙動も解明されていません。固液界面での有機フッ素化合物の会合挙動を明らかにし、それを分離法・回収法へ応用することを目指します。

(4) 生体関連機構であるアロステリズムが関与する計測

アロステリズムとは生体反応でよく見られ、ヘモグロビン4量体が有名な例です。このアロステリズムによって、我々の体では、非常に複雑な夾雑系から特定の重要な生体関連物質のみを取捨選択、すなわち「センシング」しています。この生体関連機構を活用したシグナルを増幅できるセンシング手法を提唱し実践しています。この計測手法によって、人体にとって重要なアミノ酸・ペプチド・オリゴ糖をマイクロ～ナノオーダーでの検知が可能です。最近では、この新計測手法を適用することで高感度な腫瘍マーカーの開発にも展開しています。

(5) 感圧化学センサー

圧力は大別すると、静水圧（均一にかかる圧力）と動圧（不均一にかかる圧力）があります。我々が標的としている生体内・細胞・人体組織内では、静水圧（例えば脳圧や髄膜）と同時に血圧や浸透流に代表される動圧がかかっています。このような圧力を人体組織内でその場計測できれば、癌などの重大な疾病の診断に役立つと言われています。当研究室では、広範囲な感圧化学センサーを有機合成的に構築します。

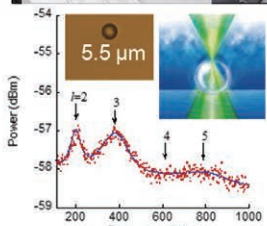
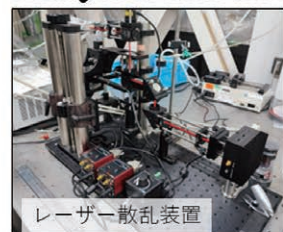
(6) 音響波イメージング

超音波や衝撃波などの音響波は、体外から照射できるため非侵襲であり、放射線による被爆がないことから、患者の負担の少ない(QOLの高い)医療・検査ツールとして応用されています。当研究室では、有機合成的に構築した感圧化学センサーを用い、細胞内にかかる音響波を定量的に可視化する計測手法を開発しています。

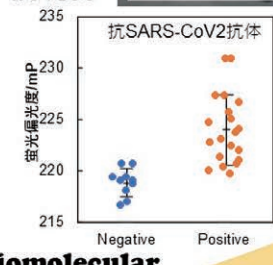
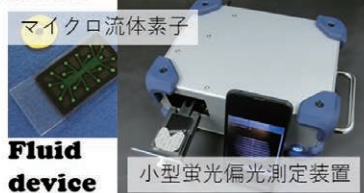
3. 学生の皆さんへ

我々の研究室では、科学の広い分野に対して大きなインパクトを与えられるよう研究に励んでいます。各自が種々の工夫を凝らすことで困難な計測を可能にしています。研究室を見に来てください！

Analytical instrumentation

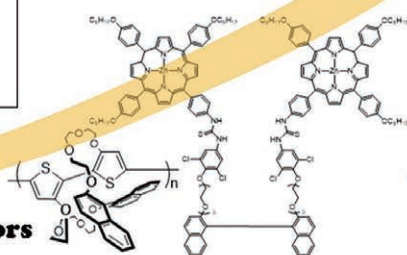


Atmospheric chemistry

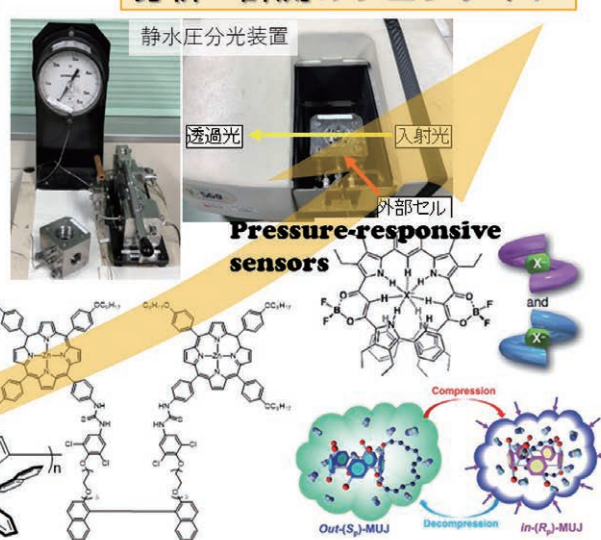


Biomolecular interaction

Chemical sensors



分析・計測のフロンティア



前田研究室

URL <http://www.chemistry.titech.ac.jp/~maeda/>

E-mail maedak@chem.titech.ac.jp



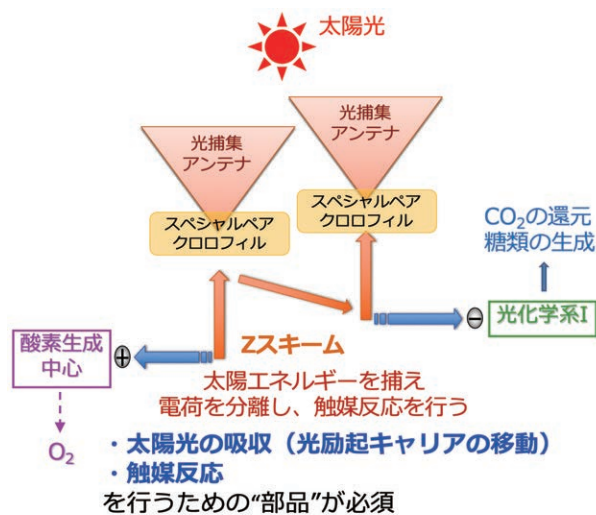
前田 和彦 教授

植物の光合成を学び、真似し、そして超える！ ～人工光合成を実現する化学のチカラ～

1. はじめに

植物が行う光合成は、地球における炭素循環を担う重要なプロセスで、これをヒトの手で行うことは化学者の夢のひとつです。化学の観点で大雑把に捉えると、植物は光エネルギーを吸収する部位と触媒反応（水の酸化とCO₂の還元）を行う部位を有しており、それらは精巧な電子移動経路で結ばれています。すなわち光合成を模倣することは、これらをヒトの手で作出すことに他なりません。また、光合成がエネルギー変換反応である点に着目すると、“人工光合成”は植物が行うCO₂固定のみならず、水の分解による水素製造などにも拡張できます。

現在の我々の科学技術では、植物の光合成を完璧に複製することはできません。一方で、精密設計した人工物質を駆使することで、植物の光合成の機能を超越することが可能となります。すなわち、高効率な人工光合成系の構築は地球温暖化・化石燃料の枯渇によるエネルギー危機など、人類が直面する深刻な問題に対するアプローチとなります。当研究室では、可視光吸収能や触媒能など様々な機能をもった固体材料、ナノ材料、分子を自在に組み合わせ、CO₂固定や水分解に有効な人工光合成系の構築に挑戦しています。以下に代表的な研究テーマを紹介します。



植物の光合成を化学のチカラで実現する

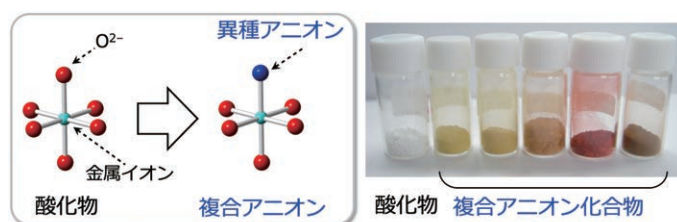
2. 研究テーマ

(1) 複合アニオン化合物を光触媒とした水分解・CO₂固定化

複合アニオン化合物とは、単一の化合物内に複数のアニオン種を含む化合物のことで、単一アニオンの化合物（酸化物など）では見られない革新的な機能発現が期待できます。複合アニオン化合物に特有な可視光吸収能（小さなバンドギャップ）は極めて有用で、人工光合成系を構築するための“部品”となります。一方で、複合アニオン化合物のほとんどは制御された環境下で生み出される人工物質のため、合成は容易ではありません。しかしこのことは、新たな光触媒が複合アニオン化合物の中から見出される可能性を示唆しています。

当研究室では、酸窒化物、酸ハロゲン化物などの様々な複合アニオン化合物の合成とそれらの光触媒機能開拓に取り組んでいます。当研究室で見出した複合アニオン光触媒のいくつかは、既存の光触媒を超える性能を示し、世界の研究者からも注目を集めています。

また最近では、ある種の複合アニオン化合物がCO₂の多電子還元に関与する電気化学触媒となることを見出すなど、既存物質では不可能だった高難度物質変換反応の実現可能性も見えてきました。

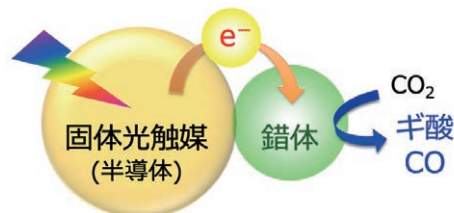


可視光を吸収する複合アニオン化合物

(2) 固体材料と分子の融合光触媒の開発

CO₂還元は関与する電子数の違いにより多様な生成物を与え、かつプロトン（水）の還元と競合します。したがって、CO₂還元を効率良く進行させるには適切な反応場、すなわち触媒活性サイトの構築が不可欠となります。金属錯体はこのような活性サイトとして有用で、例えばルテニウムやルテニウムからなる錯体は、CO₂を一酸化炭素やギ酸へ効率良く還元する触媒として働きます。

高効率なCO₂還元（光）触媒となる金属錯体ですが、光酸化力が弱い場合、単独で水を酸化するには大きな困難を伴います。当研究室では、金属錯体の弱点となる光酸化力を複合アニオン化合物などの半導体に担わせ、同時に半導体光触媒の弱点、すなわち還元力の強化を金属錯体に担わせるというコンセプトで、錯体/半導体融合光触媒の開発に取り組んでいます。



金属錯体/半導体融合光触媒を用いたCO₂還元

3. 学生のみなさんへ

好奇心の赴くまま、楽しく研究すること。これが研究室のモットーです。そして、物質合成、解析、機能評価の全てのスキルを世界トップの水準で身につけることができるのが当研究室の強みです。当研究室はまた、国内外の他の研究室との交流も活発です。一研究室という狭い世界にとどまらず、多くの人との協働を通じて研究能力を養い、高い課題解決能力と豊かな人間性を兼ね備えた人材として、みなさんが社会に羽ばたけるサポートをします。まだ見ぬ新物質や高性能光触媒を発見した時の感動、達成感を一緒に味わいましょう！

八島研究室

URL <http://www.chemistry.titech.ac.jp/~yashima/>

E-mail yashima@cms.titech.ac.jp

見学は大歓迎です！ e-mailで希望日時をご連絡ください。



八島 正知 教授

原子配列とその動き、電子を調べ、新物質を発見して世界を変えよう！

原子・電子レベルでエネルギー材料・環境材料・バイオ材料・電子材料、触媒をデザインしよう！

1. 研究のアプローチと特徴：新物質探索と高温構造物性

現代社会には、エネルギー、環境、バイオなどの分野に多くの課題が山積みです。これらの課題の解決には優れた物質・材料を開発することが必要ですが、そのためには材料の結晶構造（原子配列）と電子の状態を調べ、新しい材料を開発することが鍵となります。当研究室では、近年発展が著しい精密結晶構造解析技術を駆使して、実用材料の結晶構造と電子を調べ、**材料特性の発現機構を解明し、新物質を探索しています**。材料の多くは高温で使用/合成するので、高温下に試料を保持したまま結晶構造を実況中継（その場観察）して材料特性との関係を明らかにする「**高温構造物性**」にも力を入れています。結晶構造を基に次世代の「**新物質・材料をデザイン・開発**」し、**エネルギー・環境問題の解決を目指しています**。八島研では**周期表の安全な元素殆どすべて（72種類以上）を駆使した多彩な材料開発**を行います。

2. 研究室の構成と特徴：多彩な分野の出身者で新分野を開拓

【メンバー】八島教授、藤井助教、特任助教、秘書1名、博士課程院生2名、修士課程院生5名、学部4年生1～2名（2023年度予定）

【出身分野】化学、材料、物理、セラミックス、応用物理、電気、金属等

【就職先】東工大、理研、大連理工大、ラシャヒ大、産総研、福島大、中央大、TMSC、AGC、トヨタ、日立製作所、三菱ケミカル、大阪ガス、リガク、京セラ、昭和電気、パナソニック、東芝、三菱マテリアル、GC、日本軽金属、NTT、大同ホールディングス、JR東日本、三菱重工、NEC、シャープ、オリンパス、横河電気、TDK、三菱自動車、YKK、マツダ、キーエンス、日本原燃、コニカ、ボッシュ、富士電機、住友化学 等約50社

【共同研究】国内約40大学、国立研、民間企業、欧米・アジアの大学

【学会】セラミックス協会、結晶学会、化学会、金属学会、国際結晶学連合IUCr、固体イオニクス討論会・国際会議、中性子科学会など

【使用装置群】中性子回折装置（7台）、（放射光）X線回折・分光装置（10台）、高温回折測定用試料加熱装置（6台）、高温電気伝導・誘電特性測定システム（5台）、熱分析装置（DSC、TG-DTA（2台）、熱膨張）、紫外・可視分光光度計、試料合成用高温電気炉（13台）、水熱合成装置、ボールミル、ガスクロ、顕微鏡、ドラフト（2台）、パソコン・机・椅子（1人1つ以上）等

【受賞】この5年間で47件（2018年13件、19年9件、20年10件、21年8件、22年7件）化学会学術賞・ポスター発表賞2名、結晶学会学術賞・進歩賞・ポスター賞5名、セラミックス協会学術賞・進歩賞2名・発表賞28名、金属学会功績賞・奨励賞、熱測定学会奨励賞、田川賞、PACRIM発表賞4件、触媒工業協会技術賞、Spriggs賞他



3. 教育方針：世界的な研究者・科学技術者を育てる

世界トップレベルの研究（ビジョン：高い目標と大きな夢）を学生自身が（1）立案する、（2）実施する、（3）発表する能力を磨きます。研究室のセミナーでは文献の紹介や英語での研究報告を行っています。研究成果は、**国内外の会議・学会で積極的に発表**しています（スペイン、英国、スイス、韓国、米国、沖縄で開催される学会に参加）。**学生自身が試料の合成、回折測定と精密構造解析、物性測定、量子力学計算などを行い、材料開発に必要な実力と幅広い研究スキルを身につけます**。1年の内10～60日程度**国内外の最先端の大型施設や大学（英国、豪州、韓国、SPRING-8、つくば、東海）**で高温放射光X線・中性子回折などの実験や研究を行います。個々の学生が独立性を持って研究を行います。外部の大型施設では全員が協力して実験を行います。学生が出す研究成果は大きく**新聞や総説・教科書、Nature系やJACS等の国際一流誌に掲載され、物質構造特許に繋がります**。一緒に**ワクワクする研究**を行いましょう。

4. 研究テーマ：構造と電子を調べて新材料の探索・開発

（1）独自の高温での精密構造解析システムの開発

当研究室では、「**高温での精密構造解析システム**」をいくつも開発しました（図1、2）。その結果、原子、イオン、電子の広がりや構造を、空気中1900 Kという高温に試料を加熱したまま正確に求めることができ、「**高温での精密構造物性**」、「**新物質・新材料の構造デザイン**」という新分野を切り拓くことに成功しました（図3、4）。

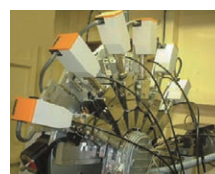


図1 放射光粉末回折計 PF4B2 高温測定システム



図2 中性子回折計 HERMES 高温測定システム

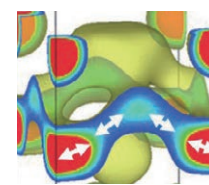


図3 1000°Cで可視化されたイオン伝導経路（矢印）

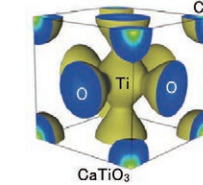


図4 ペロブスカイトの電子密度分布、Ti-O原子間の共有結合が見える（1401°C）

（2）イオンの位置と動きを調べ、新構造の材料を探索・発見

エネルギー・環境分野の鍵を握るのは固体中をイオンが流れるイオン伝導体です。**イオン伝導体**におけるイオンの位置と動きを中性子と放射光で調べています。八島研では、世界に先駆けて**燃料電池**、リチウムイオン電池などにおけるイオンの位置と拡散経路を決定し、**イオン伝導機構**を明らかにしてきました。また、触媒材料などのナノ物質、強誘電体等における結晶構造、相転移、物性との関係を明らかにしています（**構造物性**）。結晶構造に基づいて新しいイオン伝導体や蛍光体などの設計（**新物質探索**）を行い、**物質特許・構造特許**を申請、取得しています（図5、6）。あなたも新物質を発見し、発明者になりましょう。

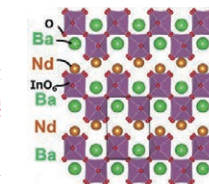


図5 新しい結晶構造を持つ新物質BaNdInO₄を発見して米国・日本特許を取得

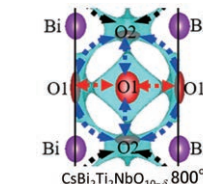


図6 世界最高クラスのイオン伝導体を発見、Nature Commに発表

（3）化学結合・共有結合を可視化：

高分解能放射光X線・中性子回折で複雑な構造を調べる
～結晶・電子構造による新材料設計～

多くの材料では**イオン結合・共有結合と電荷移動（電荷・軌道・スピン・イオンサイズ）や欠陥（空孔や面欠陥など）を自在に組合せて好みの特性をつくり出す**。このような構造中の結合状態は、**精密な電子密度**で明らかにできます。ペロブスカイト（CaTiO₃）では、1401°Cでの放射光X線解析から、Tiと酸素原子の間の共有結合を可視化することに成功しました（図4）。**クリーンで再生可能な水素エネルギー源**として期待されている**光触媒とナノ材料**における化学結合を調べて、**光触媒が可視光にตอบสนองする構造的要因**も明らかにし、新しい光触媒をデザインしています。また、密度汎関数理論（DFT）による第一原理バンド計算を行い、**化学結合と構造、相安定性、光物性、電気的性質、熱物性、生体親和性、機械的性質の本質に迫ります**。その知識を駆使して、**材料の特性と物性を制御し、新物質を探索**します。

一緒に**ワクワクする研究**を行って**明るい未来と社会を作りましょう！**

入試情報

■入試全般に関する正確な情報と詳細は、本学ホームページの受験生向けの入試課ホームページをご覧ください。募集要項は4月に公表予定です。

https://www.titech.ac.jp/graduate_school/

https://www.titech.ac.jp/graduate_school/admissions/guide.html

■化学系の大学院入試に関する情報は、下記化学系ホームページに掲載しています。

<http://www.chemistry.titech.ac.jp>

■TOEFL iBTやTOEIC L&Rの正式の成績証明書(スコアシート)の提出を必須(締切日厳守)としているので、早めの受験をすすめます。

■化学系では、多様な分野を学んでいる方の受験を歓迎します。そのため選択科目には、化学(有機化学、物理化学、無機・分析化学)に加え、物理と生化学の問題も出題します。

■研究活動が中心となる大学院教育では、自分にあった適切な研究室を見極めることが非常に重要です。化学系は、意欲のある学生を広く全国から求めます。積極的に教員に連絡をとって相談してください。

■化学系大学院は、専門とする分野・内容によって化学コースとエネルギーコースがあります。このため志望する教員によっては、化学コースのみを担当している場合と、化学コースとエネルギーコースを兼担している場合があります(募集要項参照)。

■大学院の入試は化学コースとエネルギーコース一括して行われます。兼担している教員に配属される場合、コースの選択は合格者決定後に行われます。従って、コースの選択は可否に一切影響しません。

化学系の大学院修士課程入学試験の特徴

■修士課程学生の選抜は、『口述試験』および『筆答試験』により行います。入学志願票、成績証明書、および志望理由書により、口述試験受験資格者を選抜し通知します。

■理学系だけではなく、工学系・薬学系・農学系の出身者も多く在籍しています。さらに、物理や応用物理、生物を学んでいる方の受験も歓迎します。様々な分野に広く門戸が開かれているのが化学系の特長です。

■化学系では、修士課程学生の約6割が、本学以外の大学出身者で占められています(下図参照)。

■令和4年度(令和4年8月実施)の入試問題を公表していますので、下記のHPからダウンロードしてください。

https://www.titech.ac.jp/graduate_school/admissions/past_exam_papers.html

2023年度
受験者数

87

2022年度
受験者数

77

2021年度
受験者数

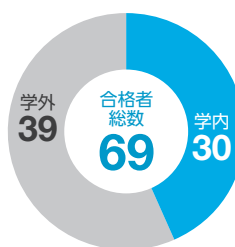
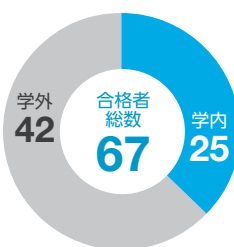
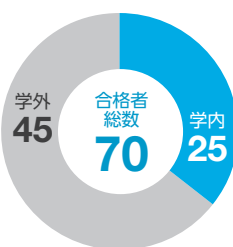
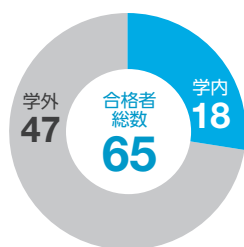
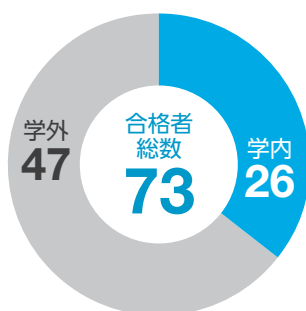
111

2020年度
受験者数

95

2019年度
受験者数

105



合格者出身大学一覧

青山学院大学、アーカンソー大学(米国)、茨城大学、宇都宮大学、愛媛大学、大阪公立大学、岡山大学、お茶の水女子大学、学習院大学、神奈川大学、神奈川工科大学、華北理工大学、関西学院大学、関西大学、北里大学、岐阜薬科大学、九州工業大学、九州大学、京都大学、群馬高専、群馬大学、慶應義塾大学、工学院大学、神戸大学、神戸市立高専、国際基督教大学、埼玉大学、静岡大学、芝浦工業大学、島根大学、上智大学、信州大学、千葉大学、中央大学、中国石油大学(中国 華東)、朝鮮大学校、筑波大学、電気通信大学、東海大学、東京学芸大学、東京工科大学、東京大学、東京電機大学、東京都市大学、東京都立大学、東京農業大学、東京農工大学、東京薬科大学、東京理科大学、東邦大学、東北大学、徳島大学、名古屋大学、名古屋工業大学、長岡技術科学大学、奈良高専、新潟大学、日本大学、日本女子大学、兵庫県立大学、弘前大学、広島大学、武漢工程大学(中国)、法政大学、北海道大学、三重大学、明治大学、明治薬科大学、山梨大学、横浜市立大学、横浜国立大学、立教大学、立命館大学、早稲田大学、浙江大学(五十音順)

修士課程カリキュラム

授業科目を効率的に学修できるように、1年間で4つの期間に分けるクォーター制を導入しています。また、全ての授業科目を、100 番台（導入・基礎科目）、200 番台（基盤科目）、300 番台（展開科目）、400 番台（発展科目）、500 番台（自立科目）、600 番台（熟達科目）にナンバリングし、科目間の学修順序(prerequisite)を明確化しています。

修士課程では、400 番台と500 番台の科目を通して、学士課程で学んだ化学に関する基礎知識をもとに、物理化学、無機・分析化学、有機化学分野に関して、最新の研究に基づくより先端的な知識・技術を体系的に学びます。さらに化学講究および化学専修実験として研究室において最先端の研究に取り組み、専門性を深めるとともに、創造力を高めることができます。これらの学修により、以下の能力の修得を目標としています。

- ・化学に関わる多方面の知見を理解するのに必要な基盤的な専門学力
- ・物質科学に関する高度な専門学力に基づく実践的な問題解決力
- ・新たな課題に主体的に取り組み、化学の深奥を究めようとする探求力
- ・多様な考え方をまとめて新たな方向性を見出す力
- ・国際的に通用するコミュニケーション力

化学系大学院科目の例（400 番台・500 番台）

科目名
無機・分析化学基礎特論Ⅰ、Ⅱ
物理化学基礎特論Ⅰ、Ⅱ
有機化学基礎特論Ⅰ、Ⅱ
分離科学特論
固体触媒化学特論
結晶構造特論
地球環境化学特論
光反応特論Ⅰ、Ⅱ
分子化学特論
量子化学特論
生物有機化学特論
合成有機化学特論
有機金属化学特論
構造有機化学特論
固体光物性特論
固体構造物性特論

科目名
エネルギー基礎学理第一～第二
エネルギーマテリアル論第一～第二
エネルギーシステム論
エネルギーシステム経済論
エネルギーデバイス論第一～第二
放射光科学実習
カレントケミストリーⅠ～Ⅳ
化学特別講義第一～第十二
化学プレゼンテーション演習
化学特別演習
化学講究S1およびF1
化学専修実験第一～第二
化学環境安全教育第一～第二
化学講究S2 およびF2
化学専修実験第三～第四

博士後期課程

博士後期課程では、以下の能力の修得を目標としています。

- 化学に関する体系化された幅広く深い知識をもとに、広く物質の関わる現象の本質・普遍性を見抜き、新たな課題を発見・探求し、これを解決に導く力
- 高い見識と倫理観のもとに広く物質の関わる化学のフロンティアを先導する力
- 化学と多方面の知見を化学の視点から有機的に結びつけ、これを活用し、展開する力
- 化学の専門分野において国際的にリーダーシップを発揮する力

大学院の国際化

化学系では、大学院生を含む若手研究者の国際交流を促進し、グローバルに活躍できる人材育成を行っております。機会があれば修士課程の大学院生でも短期留学支援を受けることができます。また、多くの大学院生が国際学会で発表し、海外の研究者と交流しています。

外国人講師による講演会も豊富に企画されており、国内にいながら国際色豊かな環境で、研究・教育を行っています。

経済的支援

希望者の多くが日本学生支援機構奨学金を得ることができます。また、修士課程・博士課程の大学院生を問わず、化学系が担当している学生実験等でのTA（ティーチングアシスタント）の枠も豊富で、経済的支援を得るための様々な機会に恵まれています。経済的支援の概要については学生支援センターのウェブサイトを参照してください。

<https://www.titech.ac.jp/enrolled/tuition/financial.html>

化学系では卓越大学院プログラム「物質・情報卓越教育院、エネルギー・情報卓越教育院」に参加しており、物質・情報卓越教育院に所属し一定の基準をクリアすることで経済的支援を受けられる可能性があります。詳しくはウェブサイトを参照してください。

<https://www.tac-mi.titech.ac.jp> <https://www.infosynergy.titech.ac.jp/Academy/>

修士課程から博士課程への進学

修士論文の内容および博士課程での研究計画に関するプレゼンテーションで、円滑に進学することが可能です。なお、化学系の修士課程を修了した多数の大学院生が、日本学術振興会特別研究員として研究奨励金を受けています。また、経済的な支援を様々な形で受けることが可能です。本学独自奨学金である「東京工業大学つばめ博士学生奨学金」など、博士後期課程学生への経済的支援については本学のウェブサイト参照してください。

https://www.titech.ac.jp/graduate_school/support/support_doctoral.html



代表的な修士論文・博士論文題目一覧

石内研究室

- 冷却イオントラップ法によるバリノマイシンー金属イオン錯体およびその水和クラスターの赤外分光
- アドレナリン受容体部分ペプチド・リガンド錯体の冷却イオン分光
- カリウムイオンチャネル選択フィルター部分ペプチドと金属イオン錯体の冷却イオントラップ分光
- 天然変性タンパク質 α シヌクレイン部分ペプチドー低分子リガンド複合体の冷却イオントラップ分光ーリガンド結合による二次構造誘起

大島・山崎研究室

- イオンイメージング実験をもとにした分子回転波束の再構築法の開発
- 分子ダイナミクス研究に向けた新規光電子・光イオン空間断層イメージング装置の開発
- 2波長レーザーイオン化を用いたベンゼン・水素クラスターにおける結合エネルギーの決定
- アンモニア分子の反転振動に関する状態識別と分布制御
- レーザーを用いた光電子・光イオン同時計測イメージング分光法の開発

北島研究室

- 高分解能しきい光電子分光法によるHDの光電離の研究
- 二電子励起と一電子励起の微分断面積の比に現れる強い角度効果:100 eV電子ー NH_3 衝突
- 低エネルギー電子衝突による解離性イオン化過程研究のための電子・解離イオン同時計数実験手法の確立
- 希ガス原子および水素・重水素分子に関する低エネルギー電子衝突の研究
- 水素分子の光解離により生成するH(2p)原子ペア状態

腰原・沖本研究室

- 時間分解振動分光によるK-TCNQの光誘起ダイナミクスの研究
- フェムト秒時間分解光電子顕微鏡の開発と半導体ナノ空間中での光キャリアダイナミクスの研究
- Primary Photoreaction Processes of Biological Molecules Studied by Femtosecond Time-Resolved Spectroscopy (フェムト秒時間分解分光法による生体関連分子光反応初期過程に関する研究)
- 時間分解非線形光学分光から見た水素結合型有機強誘電体の光励起ダイナミクスの研究
- 時間分解光電子顕微鏡の開発とグラフェン中のキャリアダイナミクスのイメージング

谷口研究室

- Opto-electronic and magnetic characteristics induced by noncentrosymmetry in two-dimensional organic-inorganic hybrid perovskites (二次元有機・無機ハイブリッドペロブスカイトにおける非反転対称性が誘起する光電流特性と磁気物性)
- キラル金属錯体を用いた可視光領域における磁気キラル光学効果の研究
- 酸化還元活性な分子格子の開発とリチウムイオン電池を用いた電氣的磁気物性制御
- リチウムイオン電池を利用した遷移金属化合物の磁性制御
- 銅カルコゲナイドにおけるコンバージョン反応型マグネシウム二次電池正極材料の開発

西野研究室

- 電気伝導度・SERS同時計測システムの開発およびBDT単分子接合への適用
- 電流ー電圧特性計測に基づく単分子接合の電子状態解析法の開発
- 単分子接合の光化学反応の探索
- 多脚分子を用いた分子接合の作製およびその伝導制御
- DNA単一分子の変異検出法の開発

大森研究室

- ベニバナの赤色色素カルタミンの全合成研究
- ナフトキノンの光レドックス反応を用いたスピロキシンCの全合成研究
- コケ類由来の環状ビスビベンジル類の合成研究
- Studies on Total Synthesis of Bisanthraquinone Antibiotic BE-43472B
- 紅ナツメ由来カテキンヘテロオリゴマーの合成と構造解析に関する研究

工藤研究室

- ネオマイシンB生合成におけるラジカルSAM異性化酵素に関する研究
- 炭素-炭素結合形成反応を触媒するラジカルSAM酵素の機能解析
- マクロラクタム抗生物質ヒタチマイシンの類縁体創製に関する研究
- ビセニスタチン生合成におけるアシル基転移酵素とアシルキャリアタンパク質間の相互作用解析
- ポリケチド合成酵素のドメイン間相互作用解析を指向したクロスリンク反応

後藤・小野研究室

- 新規なナノサイズ分子キャビティを活用した高反応性システム誘導体に関するモデル研究
- Bowl型分子キャビティを活用した含セレン抗酸化酵素活性中間体および関連化学種の反応性に関する研究
- キャビティ型分子骨格による速度論的安定化を基盤とした含硫黄高反応性化学種に関する研究
- Bowl型N-複素環カルベン配位子を有する遷移金属錯体の合成と反応
- 動的共有結合を活用した多段階刺激応答性[2]ロタキサンとの合成研究

鷹谷研究室

- 低原子価13族金属含有ピンサー型イリジウム錯体の合成と反応に関する研究
- ルテニウム-後周期遷移金属二核錯体の合成と反応
- 13族金属をZ型配位子として持つシクロペンタジエニルロジウム及びイリジウム錯体の創製とsp²炭素-水素結合活性化反応への利用
- ルテニウム触媒によるアリールホスフィンのオルト位炭素-水素結合ホウ素化反応の開発
- アリールケトンの炭素-炭素σ結合ホウ素化反応の開発

豊田研究室

- アントラセン大環状オリゴマーの合成とフラレーンとの錯形成
- ケージ型アントラセン大環状化合物類の合成とフラレーンとの錯形成
- 複数のアントラセンが縮合した新規らせん形芳香族化合物の合成と性質
- ルビセン構造を高度に集積したπ共役拡張多環芳香族炭化水素の合成と物性
- アザイリド形成を駆動とした新規両親媒性分子の開発と分子集合能

野上・寺田研究室

- 拡散放出ガスの測定法開発のための実験的研究
- 草津白根火山から放出される火口湖水および温泉水の形成過程
- 土壤気体水銀観測から推定される新火口形成域-測定手法の改良と草津白根火山への適用-
- 草津白根山の山頂および東西山麓に湧出する温泉水の化学組成に基づく火山熱水系のモデリング
- アトサヌプリ火山および雌阿寒岳に発達する火山熱水系の地球化学的研究

石谷研究室

- CO₂捕集能を有するレニウム錯体による低濃度CO₂の電気化学的還元反応
- マンガンジイミンカルボニル錯体触媒と銅錯体光増感剤を用いたCO₂還元光触媒反応
- 水を還元剤、可視光をエネルギーとしたCO₂触媒還元反応を駆動する光電気化学反応
- 強発光性リング状レニウム(II)多核錯体の創生とその光物性
- 補酵素NAD(P)モデル化合物の光触媒的ヒドリド還元反応

植草研究室

- 医薬品原薬クラリスロマイシンの新規無水和物相の導出と脱水・水和転移挙動の解明
- キノロン系抗菌剤の色変化を伴う脱水・水和転移挙動の解明
- 粉末未知結晶構造解析による医薬品原薬ジダノシン共結晶の構造モチーフ
- デュアル光反応基を持つコバルト錯体を用いたtrans-cis固相異性化反応の研究
- Photochromic reactivity switching of N-salicylideneaniline derivatives by crystalline environmental change (結晶環境変化によるN-サリチリデンアニリン誘導体のフォトクロミズム発現制御)

川口研究室

- ニトリド配位子が架橋した[Ti₂N₂]骨格をもつアニオン性チタン二核錯体の合成と反応
- アリールオキシド配位子を用いた前周期遷移金属ヒドリド及び低原子価錯体の合成と反応に関する研究
- アニオン性ニオブおよびタンタル-ヒドリド錯体の反応における対力チオン効果
- アリールオキシド混合型ピンサーおよび三脚配位子をもつ5族金属錯体の合成と反応
- アリールオキシド配位子を用いたタンタルヒドリド錯体の合成と一酸化炭素の反応

河野研究室

- Design of Electronic Devices Using Redox-active Organic Molecules and Its Porous Coordination Networks
- 酸化還元活性配位子を用いた新規ネットワーク錯体の合成戦略と物性評価
- 協奏的活性空間を有する細孔性ネットワーク錯体の創製と応用
- 多点相互作用性配位子を用いた細孔性ネットワーク錯体の合成とそのゲスト吸着
- 多点相互作用性配位子の光物性及びその会合挙動を利用したネットワーク錯体の創製

火原・福原研究室

- マイクロ水滴濃縮法における水分分配解析
- 微小流体界面の自発共鳴振動を利用した分光計測
- マイクロ流体を用いた蛍光偏光イムノアッセイのための表面修飾法の検討
- 動的らせん化学センサーを用いたキラリティー増幅センシング
- 発色団修飾ポリリシンをプローブとする衝撃波イメージング

前田研究室

- 有機半導体C₃N₄を中核としたCO₂還元光触媒系の構築
- 半導体光触媒に対する酸化コバルトナノ粒子の担持効果
- 三種複合アニオン化合物の合成と水分解光触媒系の構築
- 色素増感型酸化ナノシート光触媒によるZスキーム型水分解の高効率化
- 広域可視光を利用可能な酸フッ化物による光電気化学的水分解

八島研究室

- 酸化物イオン伝導性層状金属酸塩化物の構造設計
- Pr₂NiO_{4+δ}系混合伝導体の巨大酸素透過性および光触媒Ga_{1-x}Zn_xN_{1-x}O_xの可視光応答性の構造的要因
- 結合原子価法による新規LaSr₂Ga₁₁O₂₀系イオン伝導体の探索と構造物性
- Proton and Oxide-ion Conduction, and Crystal Structure of BaNdIn_{1-x}Sc_xO₄ (BaNdIn_{1-x}Sc_xO₄のプロトン伝導, 酸化物イオン伝導と結晶構造)
- Anisotropic Thermal Expansion of K₂NiF₄-Type CaAlO₄ (R: Rare Earths) and Electron Density of Perovskite-Type Oxides Studied by Synchrotron X-Ray and Neutron Powder Diffraction (放射光X線および中性子回折によるK₂NiF₄型酸化物の異方性熱膨張およびペロブスカイト型酸化物の電子密度の研究)

学生の受賞／教員の受賞

学生の受賞

受賞者名	受賞した賞	受賞題目
池田 大(D3) 大島・山崎研究室	第22回分子分光研究会 講演賞 (2022年11月11日)	チャープ超短パルス対を用いた一酸化窒素の高効率回転励起
佐々木 徹(M2) 大島・山崎研究室	第22回分子分光研究会 講演賞 (2022年11月11日)	Benzene-methane分子錯体における6次元モデルポテンシャル計算と分子間振動分光
小林 柊司(D3) 西野研究室	第20回 応用物理学会 Poster Award (2022年11月16日)	単分子接合中における酸化還元反応のSERS計測
祝 伊頼(M1) 河野研究室	令和4年度日本結晶学会年会 ポスター賞 (2022年11月26日)	包接ゲスト構造解析用PCNの設計支援を目的としたホスト-ゲスト相互作用の体系的評価
鎌谷 耕平(M2) 大森研究室	第12回CSJ化学フェスタ2022 優秀ポスター発表賞 (2022年12月2日)	抗生物質クワトロミシン類の合成研究
二階堂 誠(D2) 大島・山崎研究室	日本分光学会年次講演会・若手講演賞 (2022年10月13日)	振動波束干渉を用いた2自由度系における大振幅振動の状態分布制御
森川 里穂(M2) 八島研究室	Power of Interfaces 2022 – Early career best poster award (2022年10月7日)	New hexagonal perovskite-related oxides exhibiting high proton conductivity
福田 大輝(M1) 豊田研究室	第32回基礎有機化学討論会 学生ポスター賞(2022年9月22日)	異常接近した水素原子をもつ分子内環化らせん形縮合アントラセンの合成と構造
齋藤 馨(M2) 八島研究室	日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム 特定セッション「先進的な構造科学と分析技術」優秀ポスター (2022年9月14日)	新規ペロブスカイトの高速プロトン伝導と低い化学膨張
矢口 寛(D3) 八島研究室	第38回日本セラミックス協会関東支部研究発表会 ポスター賞 (2022年9月8日)	新規層状酸塩化物の結晶構造と電気伝導
細川 直輝(D1) 石谷研究室	第33回配位化合物の光化学討論会 学生講演賞 (2022年8月17日)	レニウム (I) 錯体の光誘起電子移動反応による一電子還元種生成の量子収率を決定している要因
鴨川 径(D1) 石谷研究室	第33回配位化合物の光化学討論会 ポスター賞 (2022年8月17日)	Ru (II) –Re (I) 二核錯体によるCO ₂ 還元光触媒反応の機構研究
小川 大智(M2) 大森研究室	第120回有機合成シンポジウム 優秀発表賞(2022年6月29日)	プレウソメリンEG類の不斉全合成：1,6-水素移動を経由するナフトキノンの光酸化還元反応の開発
中小原 大志(R3年度卒業) 大森研究室	日本化学会第102春季年会 学生講演賞 (2022年5月9日)	七環式芳香族ポリケチド天然物アクレモキサントンAの全合成
Jian Zhang(D2) 大森研究室	日本化学会第102春季年会 学生講演賞 (2022年5月9日)	Chemo-, Regio- and Diastereoselective Ring-Opening of Epoxy by Utilizing Sulfenate Anions: An Efficient Access to β -Hydroxy Sulfoxides
三谷 拓示(D3) 豊田研究室	第32回基礎有機化学討論会 若手口頭発表賞 Chemical Science Award (2022年9月22日)	アントラセンとトリプチセンで構築した大環状ナノケージによるフラレーン類の錯形成と内包ゲストの動的挙動
濱條 奏真(M2) 後藤研究室	第19回ホスト-ゲスト超分子化学シンポジウム Royal Society of Chemistry, Organic & Biomolecular Chemistry Prize(2022年6月5日)	セレネニルスルフィド結合とイミン結合の2種類の動的共有結合を用いたゲート付きロタキサン合成研究
松崎 航平(M1) 八島研究室	日本セラミックス協会 2022年大会 優秀ポスター発表賞 優秀賞 (2022年5月17日)	Biを含む新構造型酸化物イオン伝導体の発見
福永 悠(D2) 福原研究室	第82回分析化学討論会若手ポスター発表賞(2022年5月15日)	凍結SERS検出薄層クロマトグラフィー
作田 祐一(D2) 八島研究室	日本セラミックス協会 第35回秋季シンポジウム 特定セッション「元素・構造多様性に基づく無機化合物の物質科学」優秀発表賞(2022年10月7日)	Ba ₇ Nb ₄ MoO ₂₀ 系材料の酸化物イオン伝導メカニズム
城島 一暁(M2) 八島研究室	2021年度量子ビームサイエンスフェスタ 学生奨励賞 (2022年3月8日)	六方ペロブスカイト関連構造を持つ高い酸化物イオン伝導体における伝導経路の解明
一色 裕次(D3) 西野研究室	2021年日本表面真空学会学術講演会 講演奨励賞 スチューデント部門 (2022年2月10日)	単分子接合の結合力と電気伝導性

教員の受賞

受賞者名	受賞した賞	受賞題目
小野 公輔 准教授	SHGSC Japan Award of Excellence 2020 (2020年6月)	含ホウ素超分子構造体の構築とその機能開拓
福原 学 准教授	2020年度新世紀賞 (2021年1月7日)	機能性化学センサーを用いるシグナル増幅センシング
石谷 治 教授	令和3年度 錯体化学会賞 (2021年5月24日)	金属錯体を中核とした光機能化学及び光触媒化学に関する研究
大島 康裕 教授	日本分光学会賞(学会賞) (2021年10月14日)	極短レーザー励起による分子運動量子状態の制御と可視化
大森 建 教授	令和4年度文部科学大臣表彰 科学技術賞(研究部門) (2022年4月8日)	高次構造天然ポリフェノール類の実践的合成と機能開拓研究
寺田 暁彦 准教授	2022年度日本火山学会論文賞 (2022年5月13日)	The 2018 phreatic eruption at Mt. Motoshirane of Kusatsu-Shirane volcano, Japan: eruption and intrusion of hydrothermal fluid observed by a borehole tiltmeter network
金子 哲 助教	令和4年度東工大挑戦的研究賞 (2022年9月1日)	構造解析に基づく単分子接合の物性制御への挑戦
前田 和彦 教授	イギリス王立化学会フェロー (2022年10月28日)	長年の研究ならびに英国王立化学会への貢献
山科 雅裕 助教	第35回有機合成化学協会 三井化学 研究企画賞 (2022年12月12日)	自己相補性に基づくメタルフリーな超分子集合体の創製と光機能
豊田 真司 教授	有機 π 電子系学会賞 (2022年12月16日)	芳香環で構築する構造と空間の設計と機能への展開

* 職名は受賞当時のものです

修了後の主な進路

博士課程進学 令和3年度9名、令和2年度5名、令和元年度5名、平成30年度6名、平成29年度12名

修士の就職先 (就職時の社名の記載)

化学・鉱業
AGC
DIC
ENEOS グローブ
EIZO
HOYA
JFE スチール
JSR
P&G ジャパン
TOYO TIRE
旭化成
アグロ カネショウ
大阪有機化学工業
王子ファーマ
花王
関東化学
京セラ
クラレ
昭和電工マテリアルズ
信越化学工業
住友化学
積水化学工業
高砂香料工業
大日本印刷
大陽日酸エンジニアリング
帝人
デュポン
デンカ
東洋インキSC ホールディングス
東洋合成工業
東和薬品
凸版印刷
長瀬産業
日亜化学工業

日東紡績
日本触媒
日本ゼオン
日本電気硝子
日本分光
三井化学
三菱ガス化学
三菱ケミカル
三菱ケミカルエンジニアリング
三菱マテリアル
みどり化学
ライオン
電気・精密
ULVAC (CHINA) HOLDING CO., LTD
アンリツ
ウエスタンデジタルテクノロジーズ
エリクソン・ジャパン
キオクシア
新光電気工業
昭和電工
セイコーエプソン
ソニーセミコンダクタソリューションズ
東芝
日本電信電話
日立製作所
ブラザー工業
三菱電機
ヤマウチ
金属・機械
SMC
ボッシュ
食品・医薬
大塚製薬
カゴメ

第一三共
ファイザー
持田製薬
パレクセル・インターナショナル
Meiji Seika ファルマ
森永乳業
日本曹達
通信・運輸・公共
JERA
東海旅客鉄道
東京ガス
千代田化工建設
ブレインズテクノロジー
公務員
産業技術総合研究所
気象庁
一般財団法人 材料科学技術振興財団
その他
Boston Consulting Group
JA全農
アクセンチュア
朝日新聞社
電通
三菱UFJ銀行
リグリティ・パートナーズ
スクウェア・エニックス
住友生命保険相互会社
大和証券
トヨタ自動車
富士ソフト
山崎製パン

博士の就職先

研究機関
ETH Zurich
Max Planck institutes
Pohang University of Science and Technology
University of Geneva
University of North Carolina at Chapel Hill
University of Regensburg
大阪大学
岡山理科大学
産業技術総合研究所
昭和薬科大学
東京医科歯科大学
東京工科大学
東京工業大学
東京大学
東北大学
豊田中央研究所
日本原子力研究開発機構
日本学術振興会 (特別研究員、PD)
分子科学研究所

北京大学
理化学研究所
学習院大学
慶応義塾大学
一般企業
アサヒビール
出光興産
大塚製薬
カネカ
京セラ
興和
塩野義製薬
資生堂
昭和電工
信越化学工業
住友化学
住友ベークライト
セイコーエプソン
第一三共ケミカルファーマ
大正製薬

太陽誘電
田辺三菱製薬
中外製薬
東ソー
東和薬品
日東紡績
日本学術振興会
浜理薬品工業
日立製作所
富士フイルム
マイクロンメモリアージャパン
三井化学
三菱ガス化学
三菱マテリアル
持田製薬
モルフォ
リガク
矢崎総業
Japan Advanced Semiconductor Manufacturing

学生からひとこと

石内研究室 修士課程2年

早川 優里花さん



私は横浜市立大学理学系物質科学コースを卒業後、修士課程から東工大化学系へ進学しました。現在は冷却イオントラップ赤外分光法という手法を用いてイオンを識別する分子のイオン認識メカニズムの研究を行っています。

化学系では整った研究設備と先生方や先輩方の手厚い指導のもとで、最先端の研究を行うことができます。また、研究室内では日々の研究進捗を活発に議論することで新たな知見を得ることができます。さらに様々な学会に参加し研究成果を発表させてもらうことができ、高いプレゼンテーションスキルを身につけることができます。この様に、とても充実した研究生活を送ることができます。

化学系では私の様な他大学出身者が多いですが、大学院の講義は化学について基礎からしっかりと学ぶことができるようになっています。

化学系には様々な分野の研究室があります。充実した研究生活を送るためにも、是非いろいろな研究室を見学してみてください。

大森研究室 修士課程2年

出山 光一さん



私は九州大学工学部物質科学工学科を卒業後、修士課程から本学理学院化学系に進学しました。九大では発光材料の研究をしていましたが、どうしても全合成研究をやりたいという思いから、本系への進学を決意しました。現在は大森研究室にて、大環状骨格を有する天然有機化合物の全合成研究に取り組んでおり、様々な合成実験を行うことができ、非常に充実した日々を過ごしています。

化学系の魅力は、非常にハイレベルな研究環境にあると思います。研究設備が整っており、世界トップレベルの先生方や、高い志を持った学生に囲まれて研究できるため、日々成長していくことができます。

外部からの受験を考えている方の中には、進学後、新たな環境に馴染めるか不安を抱えている方もいらっしゃるのではないのでしょうか。実際、私も進学前は不安でしたが、親切な先輩・先生方のおかげですぐに馴染むことができました。また、本系の修士課程進学者のうち半数以上は外部出身者であるため、アウェー感は全くなく、また内外問わず同期生ともすぐに仲良くなることができました。

河野研究室 博士課程1年

嶋田 光将さん



私は東工大理学院化学系を卒業し、引き続き修士課程に進学しました。現在は河野研究室で、細孔性ネットワーク錯体という超分子構造体を用いたCO₂吸着材の開発に取り組んでいます。

化学系の良いところは、研究室あたりの学生数が少なく、自らの裁量で主体的に研究を進められることです。私の所属する研究室では、1人1人が独立した研究テーマを持っています。自律して研究に取り組むのは大変ですが、先生方や研究室のメンバーからのサポートを受けながら、現状を把握して必要なものを判断する力や、自ら計画を立案して遂行する力、結果を正確に解釈するための論理的思考力を養うことができます。研究設備も整っていて、計画した実験をすぐに実行に移せますし、時には外部の研究機関に出張して測定装置を使わせていただくこともあります。

また学会にも積極的に参加しています。学会発表では他大学の先生方や学生との交流を通じて、成果を俯瞰して見つめ、相手に分かりやすく伝える能力を身につけることができます。

化学はどうしてこの現象が起こるのか、原理を追求し、世界を理解するための学問です。皆さんも化学系で世界の深淵を覗いてみませんか。興味を持った方はぜひ見学に来て、自分の目で確かめてみてください。

前田研究室 修士課程2年

森 せいらさん



私は国際基督教大学を卒業後、東工大の化学系エネルギーコースに進学しました。現在は前田研究室に所属して水酸化鉄の多形体を用いたCO₂光触媒還元の研究を行っています。

私にとって東工大の化学系は、自分の好奇心に従って研究できる貴重な学び場です。充実した研究設備で気になることがあればすぐに実験や分析が行えるため、非常に恵まれた環境だと感じています。先生方も、学生の率先して実験を行う姿勢を後押しするため、自分で考えて行動する力を身につけられる最適の環境です。

研究室では皆さん研究に対して熱意を持っていて、学生同士の話し合いが盛んです。躓いた時は親身にアドバイスをいただけるため、一人で抱え込む心配はありません。他研究室との共同研究やセミナーに参加する機会もいただくことができ、交流を通して常に新しい刺激を受けることができ、とても充実しています。

どんどん新しいことについて学びたい！自分の好奇心に従って実験したい！そう思っているのであれば、是非あなたに東工大の化学系をオススメします。

豊田研究室 修士課程2年

福田 大輝さん



私は北里大学理学部化学科を卒業後、修士課程から理学院化学系に入学しました。現在は豊田研究室に所属し、アントラセンなど芳香環を用いてユニークならせん形構造をもつ有機分子を合成しています。

東工大の化学系では、研究環境が整っているため、研究を円滑に進めることができます。最先端の機器が数多く設置されているため、必要な測定をすぐに行うことができます。また、学生の数に対して教員の数が多いため質問しやすく、研究に対するモチベーションが高い学生も多いことから、学生同士でのディスカッションも活発に行われていることも魅力の一つです。

他大学からの進学に不安を感じる人もいるかもしれませんが、修士課程の学生の半数以上は他大学からの進学者なので、心配せず飛び込んでください。きっと刺激的な日々が皆さんを待っています。

化学系には多くの研究室があります。もし興味のある研究室があれば、ぜひ一度見学に来てください。

火原・福原研究室 博士課程3年

水野 裕彬さん



私は東京理科大学理工学部先端化学科(旧 工業化学科)を卒業後、修士課程から東京工業大学理学院化学系に進学し、博士課程も同じ研究室に所属しています。学部時代は光触媒に関する研究を行っていましたが、現在は水素結合などの分子間相互作用により形成される超分子ポリマーを用いた化学センサーに関する研究に取り組んでいます。

化学系の魅力の一つに、他大学からの進学のしやすさが挙げられ、直近の5年間で外部生の割合が毎年55%以上となっています。一般的に大学院入試は学部時代の授業を受けている内部生が有利となりますが、化学系では口述試験のみで入学が許可されるA日程があるため、学部時代に優秀な成績を取ることで内部生と互角に戦うことができます。

また、博士課程の学生が多いことも魅力の一つです。教員よりも近い存在であり、なおかつ国や企業から生活費や研究費の支援を受けられるほどにレベルの高い博士学生から指導を仰ぐこともできます。

ぜひ化学系の研究室見学をして教員の話や、学生からの生の声を聞くことで自身にあった研究室を見つけてください。

卒業生の声、同窓会組織“東工大理化会”

森川 里穂さん

AGC株式会社（研究員）

R4年度修士課程修了



私は東工大に入学後、化学系を選択し、さらに修士課程（化学系エネルギーコース）へ進学しました。4年生からは八島研究室に所属し、セラミック材料の探索・評価の研究を行う中で、様々な経験を積ませていただきました。

テーマを自ら立案して、実験や解析の計画を立てて試行錯誤しながら研究を進めていきました。主体的に研究を行うことで自ら科学を切り開いていく楽しさを感じることができました。高度な実験や解析で頂くこともありましたが、先輩や先生への相談がしやすい環境で進められ、終えたときには大きな達成感があります。研究生活の中で実験に必要な技術・知識だけでなく、粘り強さや研究に向かう姿勢も身につきました。大学以外にも国内外の最先端の装置を使った回折実験や、特許の出願、国際学会における他大学の先生や外国人研究者との交流を通して、視野を広げることができました。ぜひ化学系の恵まれた教育環境で、自ら研究を進める力を磨き将来に役立ててほしいと思います。

長岡 麻衣子さん

BASF ジャパン株式会社

H29年度修士課程修了



私は学士課程の頃から関心のあった豊田研究室に進学し、新規芳香族化合物の合成と物性に関する研究を行いました。東工大には手厚く指導して下さる先生方に加え、充実した設備等、素晴らしい環境の中で研究を進めることができました。研究の途中でテーマに対してどのように進めていくか悩んだこともあり、とても厳しく感じる2年間でしたが、研究者としても人間としても大きく成長させて頂きました。特に自ら考えて研究を進めていく能力が鍛えられたと感じています。また学校生活ではユニークな友人が沢山おり、様々な面で互いに切磋琢磨し、支え合いながら充実した研究生生活を送ることができました。卒業した現在でも多くの仲間と交流を深めています。

現在はBASFジャパン株式会社で、研究に関心を持った「色」に関する開発業務に従事しています。学んだ知識の全てが業務に直結はしていませんが、これまでの経験が大いに活かされており、改めて東工大で過ごした日々感謝しています。ぜひ、みなさんも東工大化学系に進学し、かけがえのない仲間とともに充実した研究生生活を送ってください！

岡崎 めぐみさん

産業技術総合研究所 博士研究員

H31年度修士 R3年度博士課程修了



私は東工大に入学後、光化学を専門とする研究室にて学部4年生から大学院博士課程修了までの6年間を過ごしました。研究室では、実験の進め方や発表の仕方等、研究に対する基礎的なスキルを身に付けただけでなく、研究の楽しさを知ることができました。日本だけでなく世界的にも活躍されている先生方の下で取り組む研究は、決して簡単なものではありません。時にはまったく進展せず、むしろ後退することもある大変な思いをすることもあります。実験がうまくいったときの喜びは何事にも代えがたいものです。私自身、そういった経験を積み重ねていく中で、研究者を志すようになり、現在も楽しみながら研究を続けられています。

化学系は、理論から実験まで多種多様な分野をご専門とする先生方が集っています。化学に興味のある皆様であれば、化学系にはご自身が面白そうと心から思える研究室が必ずあると思います。そして様々なご経験や知識を持つ先生方から直接、講義や研究指導を受けられる環境では、ご自身の教養を深められるだけでなく、幅広い知識や視野を得られるはずです。ぜひ化学系で素晴らしい先生方・優秀な仲間とともに研究を楽しんで、将来へと羽ばたいてください！

鈴木 レオナさん

株式会社ルーデル

令和3年度修士課程修了



私は東工大の第一類に入学後理学院化学系を選択し、4年生から修士2年生まで寺田研究室で火山に関する研究を行いました。具体的には、火口湖水の火山性成分濃度に対して時系列解析を行うことで、単純な濃度測定ではわからない情報を読み取り火山活動の理解に生かすという試みです。化学系の研究室はどれも実験設備が充実していて最先端の研究を行っています。火山化学の研究室には独自の楽しさがあります。それは、研究対象が「火山」というダイナミックなものであることです。自分で実際に火山に向かい、手法にもこだわりながらサンプリングをする、それを分析して、さらには物理学・地質学などの知識を合わせる。これにより、直接見ることでできない地下深くで起きることを理解することは、他のどの研究室でも味わえない面白さだと思います。

現在は頭書の会社で働いており、「様々な情報を合わせて多角的に物事を考える」、「自分には当たり前でも他人にはよくわからないことを理解できるように説明する」など、研究室で鍛えられたことが活かしています。

是非東工大の化学系に来て、全力で楽しんでください。その経験は必ずその後の人生でも役に立ちます。

中西 勇介さん

東ソー株式会社 無機材料研究所研究員

H27年度修士 H30年度博士課程修了



私は、東工大の応用化学専攻を修了後、化学専攻の博士課程に進学しました。修士・博士課程では共に、前周期遷移金属錯体の合成と反応に関する研究を行ってきました。金属錯体の研究が徐々に楽しいと感じるようになり、毎日研究に没頭してきました。その結果、国内外問わず数多くの学会に参加する機会も与えてくださり、そのおかげで幅広い経験を積むことができました。特に、学会先では他大学の学生と交流する機会も多々あり、今となってはとても良い思い出です。

企業に入社後は、大学時代とは異なる分野の研究に従事することになりましたが、研究に対する基本姿勢は同じです。冷静に状況分析をし、自力で改善策を生む力や、結果を整理して分かりやすく伝えるプレゼン能力などの、これまで培ってきた力が現職でも大いに役立っています。

あらゆる状況に対応できる「柔軟な研究力」を、少しでも大学院在籍中に養っておくと良いと思います。そのことはきっと、卒業後の自分のキャリアをより充実したものにしてくれるでしょう！

野田 聡さん

旭化成株式会社

H29年度修士課程修了



私は、立教大学を卒業後、東工大化学系の修士課程で有機典型元素化学を学びました。研究室生活では、教授・助教の先生方や先輩方に手厚く指導していただき、研究を進めていく力が身に付きました。また、学会発表についても国内外で多くの発表機会があり、異なる研究分野の方に、自身の研究を正確に伝える力も養われたと思います。

現在、旭化成株式会社で機能樹脂の材料開発から材料使用メーカーへの提案まで行っています。研究開発・性能分析・お客様への技術説明と川上から川下まで、様々な仕事をカバーするために、研究推進力と研究・材料に関する説明能力が必要とされます。大学院で身に付けた研究を進める力と伝える力は、日々の業務の中で非常に役に立っています。

東工大は、どの研究室も最先端の研究を行っており、優秀な学生ばかりなので自分自身を大きく成長させることができる環境だと思います。是非、東工大で研究の基礎を固め様々な舞台上で活躍できる研究者になってください。

江尻 智一さん

セイコーフューチャークリエーション株式会社

H30年度修士課程修了



私は東工大理学部に入學後、2年次に化学科に進学し、4年次から修士課程2年までの3年間、北島研究室にて研究を行いました。研究テーマは、研究室独自の実験装置による化学反応過程の観測を目指すものでした。大変なことも多かったですが、元々化学反応のメカニズムに興味があり化学を志した私にとっては非常に面白い研究でした。時には高エネルギー加速器研究機構の放射光を利用して実験することもあり、企業での研究開発では得難い経験をすることもできました。

現在は、頭書の企業に所属し、セイコーの機械式腕時計に使用される金属材料の研究開発に携わっています。化学を直接的に扱うことはない分野ではありますが、主体的に仮説・検証する能力や、機器分析の原理や理解、化学の専門知識や考え方など、大学院で培ったものは今でも非常に役に立っていますし、やりがいのある仕事もできています。

化学系を目指すみなさんには、化学系の恵まれた環境や設備を活用し、思う存分化学を探究していただければと思います。

宮川 晃尚さん

筑波大学 数理物質系 助教

H29年度修士 R2年度博士後期課程修了



私は外部の大学から東京工業大学理学院化学系の修士課程へ入学し、博士後期課程修了までの5年間、分析化学の研究を行ってきました。研究室に所属した当初は周りの学生やレベルの高い研究についていけない心配でしたが、研究室の先輩・同期・後輩はもちろん、先生方の手厚いサポートのおかげで楽しく研究を行うことができました。修士課程の最後には、自分の研究に誇りを持ち、難しい質問にも自信をもって答えられるようになり、さらに研究を続けたいという思いから博士課程に進学しました。

東工大化学系の最大の特徴は、最先端の研究に参加できるだけでなく、研究の本質的な楽しさを学べる場所だと思います。自分の発想した実験や研究を自由に挑戦させてもらえるため、それが結果につながったときは自分の成長を実感できるとともに、自分の手で研究を進める楽しさを知ることができます。このような環境で培われた知識や研究力、論理的思考力はこの先、社会に出たときに大きな力になるとと思います。皆さんも東工大化学系で充実した研究生生活を送ってみて下さい。

中澤 雄一郎さん

カゴメ株式会社

H29年度修士課程修了



横浜市立大学を卒業後、東工大化学系の修士課程に進学し、江口・工藤研究室では、微生物が生産する抗生物質の生合成研究を行いました。開始当初は、学部時代には学んでこなかった研究分野であったこともあり、なかなか思うように成果を上げることが出来ませんでした。先生方には最後まで熱意を持って指導して頂きました。専門知識のみならず、研究者にとって一番大切な、研究に取り組む姿勢について教えて頂いたことは大変貴重でした。そして、研究に対して熱い情熱を持った研究室の仲間達と、納得がいくまでとことん議論し、切磋琢磨し合った日々も忘れられません。

現在はカゴメ株式会社の研究員として、食品に関する研究を行っております。修士時代の研究分野とは異なる分野であっても、自信を持って研究業務を進めることが出来るのは、やはり東工大化学系で研究に打ち込んだ修士時代の2年があったからだと思います。

佐近 彩さん

製薬会社 研究員

H24年度修士 H27年度博士課程修了



私は大学院博士課程に進学し、植草研究室で機能的な性質を持つ物質を結晶構造の観点から設計する研究を行いました。溶媒蒸気によって可逆的に色が変わる(バイポクロミック)物質を有機結晶で実現し、その変化のメカニズムを分子レベルで明らかに出来た際には非常に感動しました。

現在は製薬会社の研究員として医薬品の研究・開発を行っており、大学で主に学んできた結晶学や物性評価の知識が役立てられています。また、大学時代から研究内容が変わっても、研究室で身につけた、主体的に研究を行う姿勢や研究の進め方が非常に活かされているということを実感しています。

化学系という研究を行うのにすばらしい環境で、自由な発想を持って楽しみながら研究を行ってください。

森 湧真さん

三菱電機株式会社 住環境研究開発センター 研究員

H27年度修士課程修了



私は東工大理学部に入學後、2年生で化学科を選択し、4年生から修士2年生までの3年間、独自の実験装置による化学反応過程の観測を目指し日々研究を行いました。研究室は学生が主体的に仮説を立て検証する能力を養成でき、また気軽に先生へ相談できる、この上なく恵まれた場所でした。

現在は、三菱電機の製品安全性・信頼性に関する評価技術開発を担う部署に属しています。分野は異なっても、主体的に研究に取り組んだ経験は自分の財産であり、仕事において不可欠なものとなっています。

みなさんには、目の前の課題に対し諦めることなく取り組む姿勢を大切にしてほしいと思います。真剣に取り組めば、役に立たないことはありません。実際に、私も学生時代に得た知識・経験が意外な場面で直接役立つことが多々あります。長いようで短い大学生活ですが、恵まれた環境をフル活用し、ぜひ自分の夢へ繋げてください。

松下 龍二さん

日本学術振興会

H24年度修士 H27年度博士課程修了



私は理学部化学科から化学専攻の修士課程・博士課程に進学しました。学部時代を含めた6年間の研究テーマはナノスケールの系の物性計測を通じた原子・電子構造解析です。卒研配属当初はわからないことだらけでしたが、いろいろと調べたり、様々な方々に知恵を借りたりしながら自分なりに考えて研究を進めたというのは、大変良い経験であったと思います。

現在は化学から離れ、日本学術振興会で事務職員として働いています。業務で化学の知識を使うことはないですが、東工大での研究経験があることに生きていると感じます。資源の少ない日本にとって、分野を問わず多様な知恵を出し続けることはとても重要なことですが、その源泉たる「学術」の振興に、行政という立場から微力ではありますが尽くしていきたいと思っています。

東工大理化会より

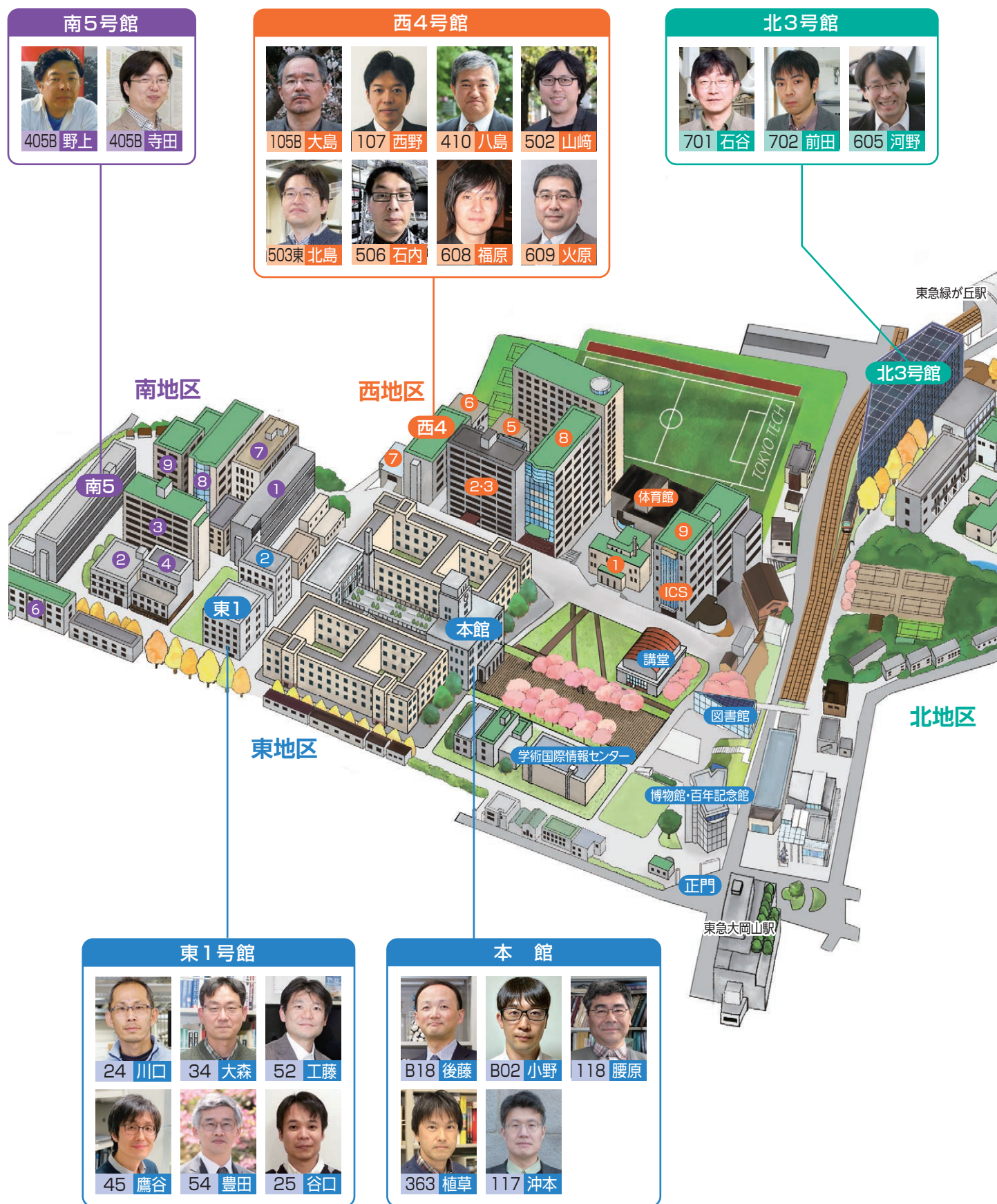
「東工大理化会」は、東京工業大学の理系化学の同窓会組織です。化学系、化学専攻、物質科学専攻(理系)、化学科の卒業生および修了生の中で、本会趣旨に賛同し登録した者を会員とし、ネットワークを基本とした組織運営を行っています。情報ネットワークを通じて会員の意見を集約・共有しながら、同窓会と

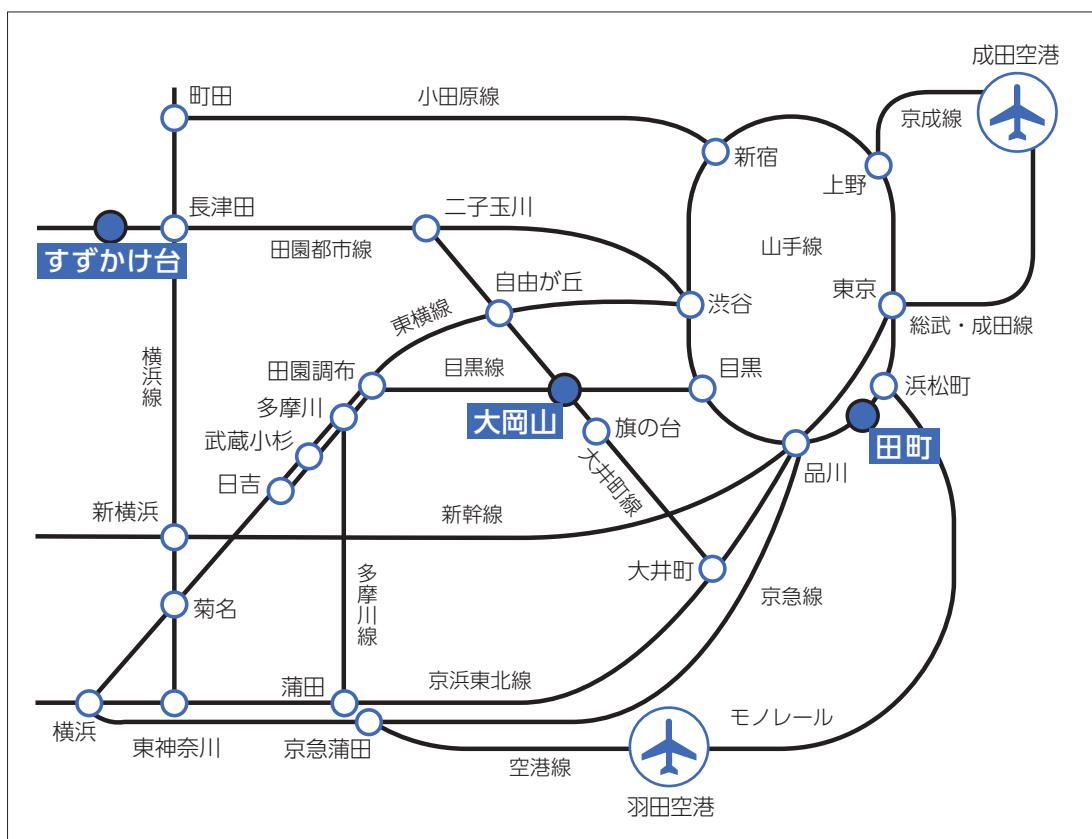
しての連帯感と活力を高めることを目的としています。詳細はホームページ

http://www.chem.titech.ac.jp/~chem_alumni/

をご覧ください。今後卒業する皆様には、是非「東工大理化会」にご登録の上、同期生・同窓生の連帯感醸成、情報の共有などに本会の人的ネットワークおよび情報ネットワークをご活用下さい。

化学系教員マップ





Department of Chemistry

School of Science

化学系事務室 (大岡山キャンパス本館1階170号室)

〒152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1 H-58

TEL : 03-5734-2660 E-mail : office@chem.titech.ac.jp

<http://www.chemistry.titech.ac.jp/>