

■ 関連領域研究系

本研究系では、分子科学と関連諸分野とが関連する領域を研究対象としている。有機化学、無機・錯体化学、さらには生体関連化学を視野の中にいれた広範な研究対象に関し、分子レベルでの新たなアプローチを目指している。

関連分子科学第一研究部門

1. ヘム蛋白質の構造、機能及び反応機構の解明

金属酵素の構造と機能発現機構解明を中心課題として取り扱っている。特に、ペルオキシダーゼやチトクローム P-450 など酸化反応に関与しているヘム蛋白質の作用機構に関し、①モデル錯体による不安定中間体の合成及び電子状態と反応性の定量化、②蛋白質やミュータント、さらにはハイブリッド体を用いた研究を展開している。特に、②の課題では、酵素反応の作用機構を化学反応として精密に理解し、人工酵素の分子設計へと発展させることを目指している。



(後列左から) 原 功、山原 亮、油 努
(中列左から) 加藤 茂、小江誠司、上野隆史、吉岡資郎、大橋雅卓
(前列左から) 谷澤三佐子、中井英隆、越山友美、山田雅子、渡辺芳人、牧原伸征

2. 分子性磁性体の開発及び物性研究

①有機ラジカルと遷移金属からなる無機-有機ハイブリッド系を用いた新しい分子性強磁性体の構築研究及び、②有機ラジカルのスピン間相互作用の研究を行っている。①では配位子として高スピンのポリニトロキシドラジカルを用い、遷移金属イオンを介して自己組織化するという新しい分子磁石の構築方法を用いて高温の転移温度を持つ分子磁石や、キラルな分子磁石の構築研究を進めている。②では新規安定ラジカル結晶の磁性を詳しく解析することにより分子間のスピン磁気モーメントの相互作用について研究を行っている。



(後列左から) 熊谷 等、秋田素子、岡 芳美、細越裕子
(前列左から) 鈴木健太郎、加藤恵一、今井宏之、井上克也

相関分子科学第二研究部門（客員研究部門）

色々な金属イオンを利用している金属酵素の構造と機能の理論を目指し、合成モデル系の構築を中心に研究の展開を行う。

分子クラスター研究部門（流動研究部門）

1. 新規な分子クラスターの構造選別と立体反応ダイナミクス解明

分子の配向は化学反応において制御すべき、最後に残された重要な自由度です。分子線レーザー蒸発法により有機金属錯体など新規な中性クラスターを合成し、六極電場法を用いてそのサイズと構造を非破壊的に選別し、引き続きクラスターの配向制御を行います。一方、偏向レーザー励起法によりラジカル・分子のアライメントを行い完全配向状態下の反応を実現します。さらに $AB + CD$ 二分子

反応の遷移状態化学種 $[AB \cdots CD]$ の幾何構造は反応分岐を決定する要因であるので、この構造選別を行い反応の Active Controlを試みます。これらの研究から新しい化学反応論の新展開と近い将来の反応制御の新しい方法論の確立を目指します。



（後列左から）橋之口道宏、福山哲也、清水雄一郎
（前列左から）太田明代、笠井俊夫、久保厚、蔡徳七

2. 固体高分解能NMRによる微粒子の研究

ラジオ波波形制御により金属微粒子の Knight シフトで広がったスペクトルの選択された帯域を励起し、溶液で使用されている 2 次元 NMR の実験に対応する実験を行い、表面の原子と内部の原子の J 結合等を決定する予定。また微粒子あるいは多孔質物質の固体表面と液晶や界面活性剤分子との相互作用を体積磁化率効果等を使って調べる。光を照射すると金属微粒子の集合体は非線型光学効果を示すがその 1 種である逆ファラデー効果や光整流効果が NMR で検出可能か否かを検討する。

3. ゲルの生成過程、脂質二重膜のシミュレーション

当研究室では、化学物理、生物物理の興味深い問題に対して、モンテカルロシミュレーションの方法を用いて研究している。

ゲル生成過程に関しては、モデルを作成し、ラジカル、モノマー、リンカーの比率によるネットワークのでき方の違いを調べる。特徴的な量を定義して、相図を得る。

また、脂質分子のモデルを作成し、二重膜でできた小胞に自己集合する過程や小胞同士の融合のメカニズムを研究している。



（左から）野坂 誠、高須昌子、野口博司