



TOHOKU
UNIVERSITY

東北大学大学院理学研究科
化学専攻案内

2018

Department of Chemistry
Graduate School of Science



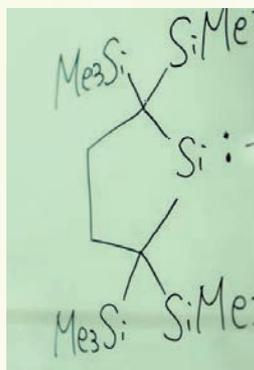
TOHOKU UNIVERSITY



未開

の分野を切り拓く 伝統の創造力と

最先端の研究環境



目次

- ▶ 東北大学大学院理学研究科化学専攻の概要
- ▶ 大学院入試について 1
自己推薦入試・一般選抜入試
入試スケジュール・問い合わせ先
- ▶ 研究室一覧 3
- ▶ 青葉山キャンパス等の各研究室紹介 4
- ▶ 片平キャンパスの概要と各研究室紹介 26
- ▶ アクセスマップ 40

東北大学大学院理学研究科化学専攻の概要



東北大学は1907年（明治40年）に創立された東北帝国大学にはじまります。東北帝国大学には発足以降次々と新しい学部、研究所が設置されて日本有数の総合大学となり、理学部にも新しい学科や附属施設が設置されて大きな発展を遂げました。第2次大戦後学制が改革され、1949年（昭和24年）本学部は新制東北大学理学部として再発足しました。さらに、1953年（昭和28年）には理学部に大学院理学研究科が設置され、化学科には化学専攻が置かれました。1995年（平成7年）に理学部・理学研究科では学内の先頭を切って大学院の重点化整備が行われ、大学院が学部には付属していた体制から大学院を中心とする新しい体制に移行しました。

開学以来“研究第一主義”をモットーとして研究重視の学風を堅持してきましたが、これは、第一級の研究者こそ真に質の高い教育ができるという考えで、東北大学が誇る伝統的な学風です。未開の分野に踏み込んで、道を切り開こうとする創造的研究の学風は東北大学の特徴です。東北大学の化学科でこのような未開の地を切り開き、化学の分野に足跡を残した人は数多くいますが、一例として文化勲章受賞者をあげると眞島利行、赤堀四郎、野副鉄男、中西香爾の4名にもものぼります。

また、日本の大学で最初に女子に門戸を開いたのは東北帝国大学理科大学です。既に大正2年、第3回目の入学者の中に化学科2名、数学科1名の女子学生がいます。化学科に入学された黒田チカ、丹下ウメのお二人は卒業後も研究を続けられ、日本の化学に大きな足跡を残しました。

化学研究の世界的な一大拠点

化学科が発足したときにはわずか3名の教授による3講座が、現在では5つの基幹講座（無機・分析化学講座、有機化学講座、物理化学講座、境界領域化学講座、先端理化学講座）に組織される研究室と、学内の多元物質科学研究所、金属材料研究所、材料科学高等研究所、高度教養教育・学生支援機構に所属する研究室、そして学外の連携・委嘱分野を併せた研究室から構成されています。協力講座含め約90名もの教員が指導にあたります。その研究内容は、生物化学、天然物化学、有機合成化学、有機金属化学、金属錯体化学、超分子化学、ナノ・バイオ分析化学、レーザー分光化学、計算化学などを含み、化学の主要分野を網羅しています。これらの研究室が、研究科付属の巨大分子解析研究センターなどの協力を得て化学研究の世界的な一大拠点を形成しています。

特徴ある研究教育プログラム、グローバル化へ向けて

当専攻では21世紀COEプログラム「大分子複雑系未踏化学」（2002年～2006年）、さらにそれを引き継いだグローバルCOEプログラム「分子系高次構造体化学国際研究拠点」（2007年～2011年）によって、工学、薬学、農学研究科などとも連携が推進され、我が国最大規模のオール化学分野の協力による大学院教育・研究体制が確立されつつあります。また、大学のグローバル化に向けた取組も進んでいます。大学の世界展開力強化事業（日中韓のトライアングル交流事業・キャンパスアジアプログラム）「持続的社會に貢献する化学・材料分野のアジア先端協働教育拠点の形成」（2012年～2016年）により、東北大学のオール化学分野と日中韓五大学との間の教育・研究相互交流を進めました。

化学専攻はますます国際化を進め、世界的に活躍する人材を輩出する世界トップの化学研究拠点としてさらなる飛躍を目指します。



大学院入試について

化学専攻では、一般選抜入試に加え、他大学・他学部等からの受験生に配慮した自己推薦入試を実施しています。

化学専攻では、分子を中心として材料、生命など多岐にわたる自然現象の理解を目指して、研究および教育を実施してきました。しかし、最近の学問の発達に伴い、学際化が急激に進行しております。これからは周辺領域への融合を積極的に図りながら、新たな学問分野を創生する必要があります。

このため自己推薦入試では、従来の筆記試験による選抜とは異なる視点に立ち、様々な特性と才能を備えた多様な学生を選抜します。化学分野のみならず、例えば物理学、応用物理学、薬学、農芸化学、数理科学、情報科学、環境科学、生活科学、理科教育など、異なる分野で十分な基礎学力を習得し、当大学院において複合的視点での学習・研究を達成できる能力を持つ、学習意欲あふれた方を募集します。

自己推薦入試

選考日程

募集要項発表	: 4月
入試説明会	: 5月19日(土)
出願期間	: 6月4日(月)～6月8日(金)
試験日	: 7月7日(土)

試験科目

研究紹介および面接試験

合格内定者の発表

7月7日(土) 午後6時頃

一般選抜入試

選考日程

募集要項発表	: 6月
出願期間	: 7月9日(月)～7月13日(金)
試験日	: 8月21日(火)、22日(水)

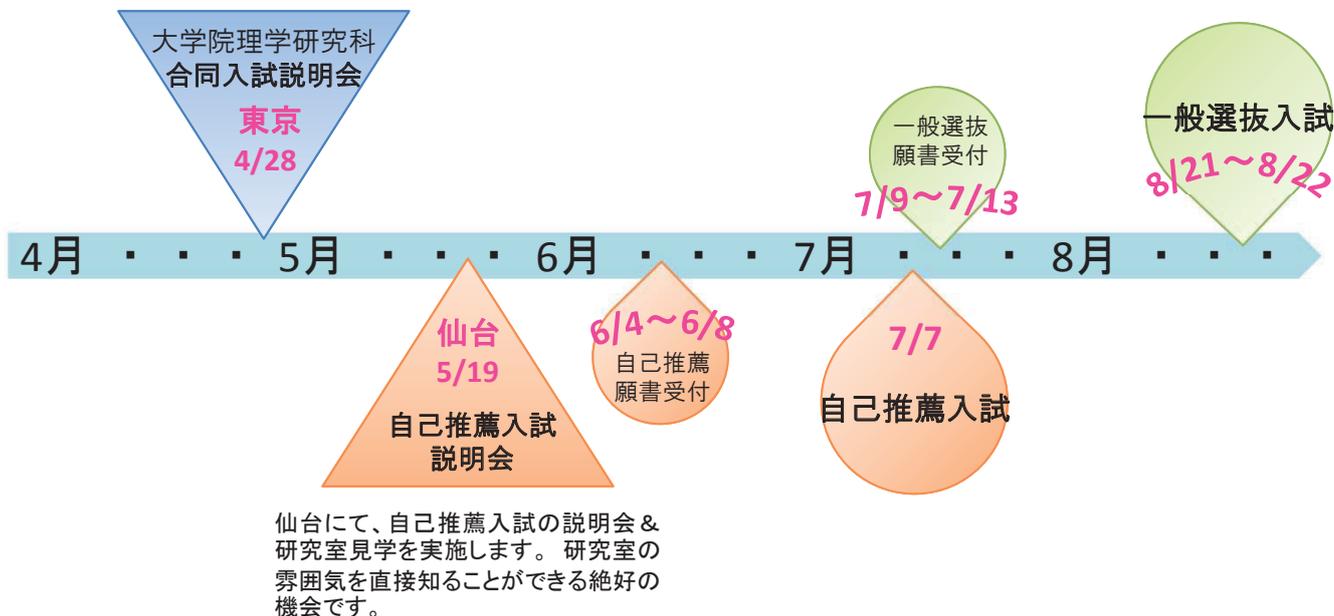
試験科目

筆記試験(英語・化学)および、面接試験

合格内定者の発表

8月22日(水) 午後6時頃

例年、東京分室にて理学研究科合同で説明会を開催しています。東京近郊の方は是非ご来場下さい。



入試に関する全般的問い合わせ先

化学専攻事務室 教務係

〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉6-3
TEL: 022-795-3492/FAX: 022-795-3681
E-mail: chem-jm@grp.tohoku.ac.jp

最新情報はこちら

化学科・化学専攻ホームページ <http://www.chem.tohoku.ac.jp/>

- ・説明会情報
- ・自己推薦入試に関する情報
- ・一般選抜入試に関する情報
- ・専攻パンフレットの請求
- ・入試の過去問題について

学生募集要項の請求はこちら

大学院理学研究科・理学部のホームページ <http://www.sci.tohoku.ac.jp/>

化学専攻研究室一覧

無機化学・分析化学関連研究室

無機・分析化学講座	分析化学研究室	■ 西澤 精一	教授(理) … 5
〃	無機化学研究室	■ 飛田 博実	教授(理) … 6
〃	錯体化学研究室	■ 山下 正廣	教授(材) … 7
境界領域化学講座	無機固体物質化学研究室	■ 福村 知昭	教授(材) … 8
先端理化学講座	放射化学研究室	■ 木野 康志	准教授(理) … 9
固体化学講座	結晶材料化学分野	■ 宇田 聡	教授(金) … 28
〃	錯体物性化学研究室	■ 宮坂 等	教授(金) … 29
化学反応解析講座	ナノ・マイクロ計測化学研究分野	■ 火原 彰秀	教授(多) … 30
先端理化学講座	環境放射化学研究室	■ 関根 勉	教授(高) … 10

物理化学関連研究室

物理化学講座	理論化学研究室	■ 美齊津 文典	教授(理) … 11
〃	量子化学研究室	■ 藤井 朱鳥	准教授(理) … 12
〃	有機物理化学研究室	■ 叶 深	教授(理) … 13
〃	数理化学研究室	■ 河野 裕彦	教授(理) … 14
〃	計算分子科学研究室	■ 森田 明弘	教授(理) … 15
化学反応解析講座	走査プローブ計測技術研究分野	■ 米田 忠弘	教授(多) … 31
〃	電子分子動力学研究分野	■ 上田 潔	教授(多) … 32
〃	ナノ機能物性化学研究分野	■ 組頭 広志	教授(多) … 33

有機化学関連研究室

有機化学講座	有機化学第一研究室	■ 上田 実	教授(理) … 16
〃	合成・構造有機化学研究室	■ 岩本 武明	教授(理) … 17
〃	有機分析化学研究室	■ 林 雄二郎	教授(理) … 18
〃	学際基盤化学研究室	■ 豊田 耕三	教授(理) … 19
境界領域化学講座	有機化学第二研究室	■ 瀧宮 和男	教授(理) … 20
〃	反応有機化学研究室	■ 寺田 眞浩	教授(理) … 21
生体機能化学講座	生命機能分子合成化学研究分野	■ 永次 史	教授(多) … 34
固体化学講座	有機ハイブリッドナノ結晶材料研究分野	■ 及川 英俊	教授(多) … 35
化学反応解析講座	生命機能制御物質化学研究分野	■ 和田 健彦	教授(多) … 36

生物化学関連研究室

先端理化学講座	生物化学研究室	■ 大橋 一正	教授(生) … 22
生体機能化学講座	生体分子構造研究分野	■ 稲葉 謙次	教授(多) … 37
〃	生命分子ダイナミクス研究分野	■ 高橋 聡	教授(多) … 38
〃	細胞機能分子化学研究分野	■ 水上 進	教授(多) … 39

連携・委嘱分野

産業技術総合研究所	分離化学研究室	■ 川波 肇	教授(委) … 23
		■ 金久保 光央	教授(委)
日本原子力研究開発機構	重元素化学研究室	■ 永目 諭一郎	教授(客) … 24
		■ 木村 貴海	教授(客)

関連施設

巨大分子解析研究センター	■ 岩本 武明	教授(兼) … 25
--------------	---------	------------

■ 青葉山キャンパス
■ 片平キャンパス
■ 川内キャンパス
■ 学外

所属：
 (理) 理学研究科
 (多) 多元物質科学研究所
 (金) 金属材料研究所
 (材) 材料科学高等研究所
 (生) 生命科学研究所
 (高) 高度教養教育・学生支援機構



青葉山キャンパス等の 各研究室紹介



- …理学研究科
- …高度教養教育・学生支援機構
- …学外の連携・委嘱分野

分析化学研究室

(Analytical Chemistry)

教授 西澤精一

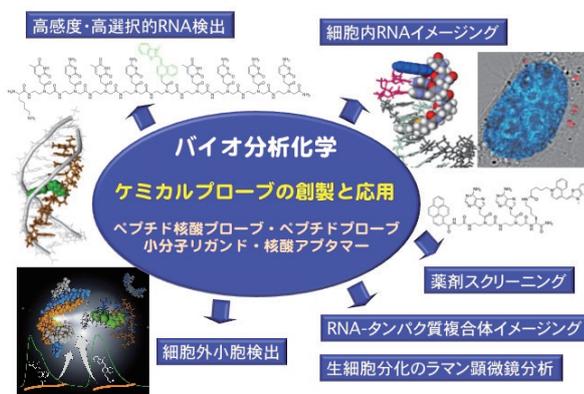
准教授 盛田伸一

助教 佐藤雄介



【研究概要】 生命現象を分子レベルで解明することは、21 世紀の化学が担うべき魅力的な研究課題です。私たちは、高度な生命現象を司るキープレイヤーとしての RNA、特に、これまでガラクタ同然とされていた、タンパク質に翻訳されない RNA (ncRNA) を主要な研究対象として、RNA の新しい機能を明らかにしうる細胞内可視化プローブや検出プローブ、蛍光インジケータの開発を進めています。また、RNA を内包し、細胞間コミュニケーションに重要な役割を果たしている細胞外小胞 (エクソソーム) も主要な研究対象で、細胞外小胞の未知の機能を明らかにしうる検出プローブの開発も進めています。

このように、私たちの研究グループでは、RNA や RNA-タンパク質複合体、細胞外小胞の機能を解明するためのケミカルプローブを創製し、これらに基づく検出・疾患診断・機能解析法や創薬の支援ツールを提案・開発することで、生命科学の発展に貢献することを目指しています。



[Research] Our research interests focus on bioanalytical chemistry based on the advanced design and synthesis of chemical probes that target significant biomarkers such as non-coding RNA and extracellular vesicles. We have created novel probes based on peptide nucleic acids, peptides, small organic molecules, or DNA-based aptamers, and have developed a highly sensitive and selective detection or imaging methods for biological research and drug discovery. By providing such chemical probe-based bioanalytical methods, we are trying to contribute to the further development of life science.

【代表論文】

- 1) T. Sato, Y. Sato, S. Nishizawa, "Optimization of the Alkyl Linker of TO Base Surrogate in Triplex-Forming PNA for Enhanced Binding to Double-stranded RNA", *Chem. Eur. J.*, **23**, 4079-4088 (2017). (Selected as Hot Paper, Highlighted at Inside Back Cover)
- 2) 佐藤貴哉, 佐藤雄介, 西澤精一, "RNA 二重鎖を読み解く新技術-三重鎖核酸形成を利用する蛍光プローブ", *化学*, 72 巻 4 月号, 47-52 (2017).
- 3) T. Sato, Y. Sato, S. Nishizawa, "Triplex-forming Peptide Nucleic Acid Having Thiazole Orange as a Base Surrogate for Fluorescence Sensing of Double-stranded RNA", *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 9397-9400 (2016).
- 4) Y. Sato, H. Saito, D. Aoki, N. Teramae, S. Nishizawa, "Lysine linkage in basic site-binding ligand-thiazole orange conjugates for improved binding affinity to orphan nucleobases in DNA/RNA hybrids", *Chem. Commun.*, **52**, 14446-14449 (2016).
- 5) T. Sato, Y. Sato, K. Iwai, S. Kuge, S. Nishizawa, N. Teramae, "Synthetic fluorescent probes capable of selective recognition of 3'-overhanging nucleotides for siRNA delivery imaging", *Chem. Commun.*, **51**, 1421-1424 (2015).

連絡先 西澤精一 (Seiichi NISHIZAWA)

Tel: 022-795-6549 Fax: 022-795-6552

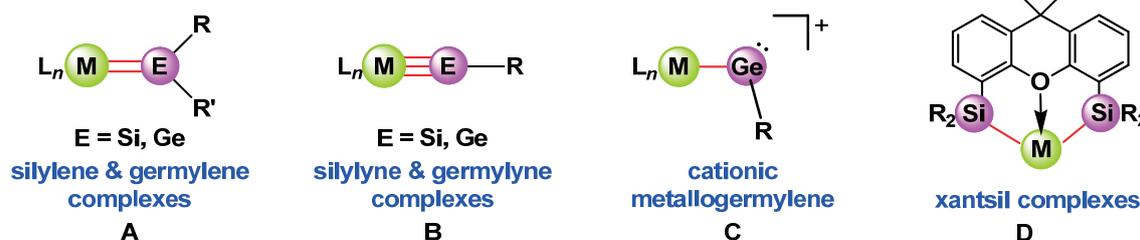
<http://www.anal.chem.tohoku.ac.jp/>

無機化学研究室
(Inorganic Chemistry)

教授 飛田博実
教授 橋本久子
助教 小室貴士
助教 渡邊孝仁



【研究概要】 遷移金属と高周期典型元素（主に 13~16 族元素）との間に多重結合や多中心結合などの特異な結合を持つ錯体、および多座配位子を持つ錯体の合成、構造および反応性について研究しています。これらの錯体では、結合に関わる元素、軌道、相互作用などの種類が多いため、極めて多様な構造が可能であり、新しい結合様式や、それに基づく興味深い反応の発見が大いに期待できます。また、これらの研究から新しい化学変換反応の触媒となる錯体を開発できる可能性もあります。現在の主な研究対象は、金属-ケイ素不飽和結合を持つシリレン錯体 **A** やシリリン錯体 **B** あるいはそれらのゲルマニウム類縁体、カチオン性一置換ゲルマニウム化学種の錯体 **C**、金属上に特異な環境を作り出す新しい多座配位子を持つ錯体 **D** などです。「新しい分子の創製」を通じて、「化学結合とは何か」という永遠の課題に対する新しい答えを一つでも多く見つけたいと思っています。



【Research】 We are studying the synthesis, structure, and reactivity of complexes having peculiar chemical bonds (multiple bonds, multi-center bonds, etc.) between transition-metal elements and heavier main-group elements, and having polydentate ligands. In these complexes, since various elements, orbitals, and interactions participate in the formation of the chemical bonds, extremely diverse structures are possible, and discovery of new bonding modes and interesting reactions based on them is highly expected. From these studies, we can also develop complexes that catalyze new chemical transformations. We are currently interested in silylene complexes **A** and silylyne complexes **B** and their germanium analogs, complexes ligated by cationic mono-substituted germanium species **C**, and complexes bearing new polydentate ligands **D**. Through the development of these new molecules, we are trying to find new answers to the eternal question “What is chemical bonding?”

【代表論文】

- 1) Recent Advances in the Chemistry of Transition Metal–Silicon/Germanium Triple-Bonded Complexes, Hashimoto, H.; Tobita, H. *Coord. Chem. Rev.* **2018**, 355, 362-379.
- 2) Bifunctional Iron-Amino Complexes: Highly Efficient Catalysts for Dehydrogenation of Ammonia-Borane, Takahashi, H.; Watanabe, T.; Tobita, H. *Chem. Lett.* **2018**, 47, 296-299.
- 3) Tandem Hydrosilylation/*o*-C–H Silylation of Arylalkynes Catalyzed by Ruthenium Bis(silyl) Aminophosphine Complexes, Kitano, T.; Komuro, T.; Ono, R.; Tobita, H. *Organometallics* **2017**, 36, 2710-2713.

連絡先 飛田博実 (Hiromi TOBITA)

Tel: 022-795-6539 FAX: 022-795-6543

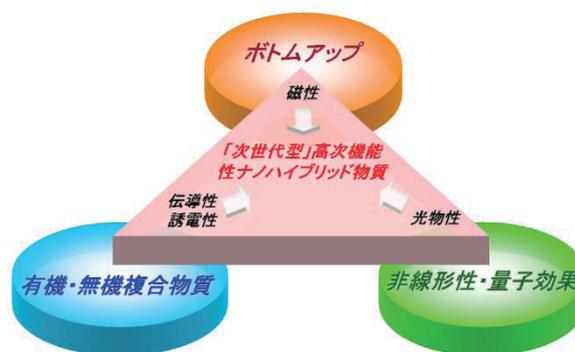
<http://inorg.chem.tohoku.ac.jp/>

錯体化学研究室
(Coordination Chemistry)

教授 山下 正廣
准教授 高石 慎也
Breedlove Brian
助教 加藤 恵一
井口 弘章



【研究概要】 当研究室では、「集積型金属錯体、およびナノ金属錯体の合成と多重機能性・物性の創出」に関する研究を行っています。金属錯体は、電子状態の多様な金属イオンと設計性に富んだ有機配位子から構成されていることから、純粹無機物や純粹有機物では不可能なより高次の機能性や物性が期待されます。また、これらの金属錯体を無限に集積したり、ナノサイズのクラスターにしたりすることにより、単核の金属錯体にはない機能性や物性を発現させることが可能です。当研究室では、磁性と伝導、伝導と光、光と磁性が複合的に作用することにより単独の物性では不可能な機能性の創出、また「ナノサイエンス」においては単独の原子や分子では見られない新奇な「量子効果」や「非線形性」に基づく物性の創出を目的とし、「ナノ金属錯体の物性化学」をキーワードに、新しい学問分野を創出・展開しています。



【Research】 The target of our laboratory is the “Multifunctional Metal Complexes” and “Nanoscale Metal Complexes”. We are creating the novel multi-functionality or physical properties such as the quantum effect, nonlinearity, multifunctionality, etc., by assembling the metal compounds to the infinite lattices or nano-sized clusters.

【代表論文】

- 1) H. Kishida, H. Matsuzaki, H. Okamoto, T. Manabe, M. Yamashita, Y. Taguchi, and Y. Tokura, “Gigantic Optical Nonlinearity in One-Dimensional Mott-Hubbard Insulators,” *Nature*, **405**, 929–932 (2000).
- 2) T. Komeda, H. Isshiki, J. Liu, Y. -F. Zhang, N. Lorente, K. Katoh, and M. Yamashita, “Observation and Electric Current Control of a Local Spin in a Single-Molecule Magnet”, *Nature Commun.*, **2**, 217–223 (2011).
- 3) M. R. Mian, H. Iguchi, S. Takaishi, H. Murasugi, T. Miyamoto, H. Okamoto, H. Tanaka, S. Kuroda, B. K. Breedlove, M. Yamashita, "Multiple-Hydrogen-Bond Approach to Uncommon Pd(III) Oxidation State: A Pd–Br Chain with High Conductivity and Thermal Stability," *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 6562–6565 (2017).

連絡先 山下 正廣 (Masahiro YAMASHITA)
Tel: 022-795-6544 FAX: 022-795-6548
<http://coord.chem.tohoku.ac.jp/~sakutai/>

無機固体物質化学研究室

(Inorganic Solid State Chemistry)

教授 福村 知昭

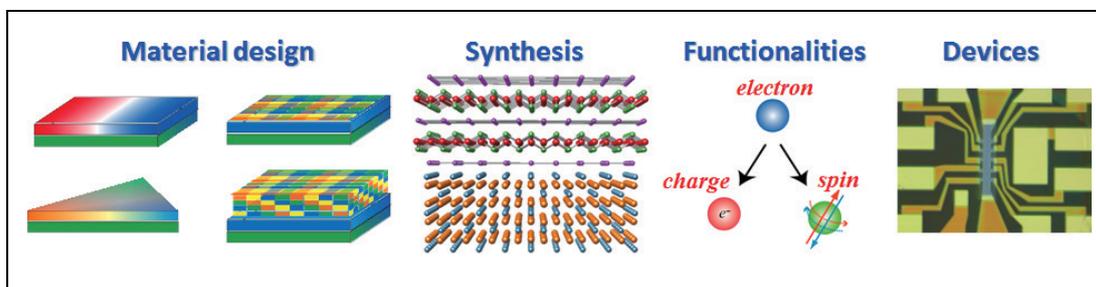
助教 岡 大地

助教 河底 秀幸



【研究概要】 周期表にある元素を組み合わせて化合物を合成すると、想像を超える多様な物性が発現します。超高真空技術や高出力レーザーなど現代の先端技術を駆使して、酸化物を主とする新しい無機固体や非平衡相をエピタキシャル合成し、新奇超伝導や高温強磁性などの物性や機能を創製して、新たな物質化学の学理を構築することを私たちの研究室では目指しています。次世代を担う新物質のマテリアルデザインや合成ルートの開発、極低温強磁場技術や最先端分光技術や微細加工技術などの物性・デバイス計測技術、固体物理も活用した物性・機能デザイン、といった方法論を修得して研究の最先端に挑む人材の育成を行い、現代社会の抱えるエネルギー問題などにも貢献するイノベーションの基盤を樹立することをねらっています。

【Research】 Innovative functionalities are involved in newly synthesized compounds. Our group aims to construct scientific principle of solid state chemistry by synthesizing new inorganic solids and by exploring novel physical/chemical properties and functionalities. Young prospect students will learn material design of novel compounds, development of new synthetic routes, state-of-the-art measurement techniques, and properties design utilizing solid state physics, in order to create scientific foundation of next generation innovations.



【代表論文】

- 1) “Crystal engineering for novel functionalities with oxide thin film epitaxy”, D. Oka, T. Fukumura, *CrystEngComm* **19**, 2144–2162 (2017).
- 2) “Two dimensional superconductivity emerged at monatomic Bi^{2-} square net in layered $\text{Y}_2\text{O}_2\text{Bi}$ via oxygen incorporation”, R. Sei, S. Kitani, T. Fukumura, H. Kawaji, T. Hasegawa, *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 11085–11088 (2016).
- 3) “2D electronic transport with strong spin-orbit coupling in Bi^{2-} square net of $\text{Y}_2\text{O}_2\text{Bi}$ thin film grown by multilayer solid phase epitaxy”, R. Sei, T. Fukumura, T. Hasegawa, *ACS Appl. Mater. Interfac.* **7**, 24998–24501 (2015).
- 4) “Electrically-induced ferromagnetism at room temperature in cobalt-doped titanium dioxide”, Y. Yamada, K. Ueno, T. Fukumura, H. T. Yuan, H. Shimotani, Y. Iwasa, L. Gu, S. Tsukimoto, Y. Ikuhara, M. Kawasaki, *Science* **332**, 1065–1067 (2011).

連絡先 福村 知昭 (Tomoteru FUKUMURA)

Tel/Fax: 022-795-7719 FAX: 022-795-7719

<http://issc.chem.tohoku.ac.jp/FukumuraLabHP/home.html>

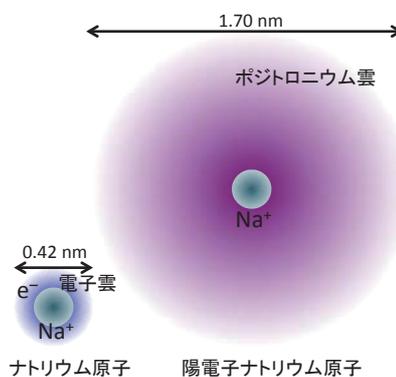
放射化学研究室
(Radiochemistry)

准教授 木野康志



【研究概要】

放射化学研究室でエキゾチック原子分子の反応や構造の包括的な理解を目指しています。エキゾチック原子分子とは、原子分子を構成する電子または原子核が他の粒子（陽電子、ミュオン、パイオン、反陽子、未知の荷電粒子）に置換わった系です。エキゾチック原子分子は、通常の原子分子の隠れた量子力学的多体系の性質に光をあてることができ、物質から原子核までのミクロな構造を調べるプローブとなったり、これまでにない異常な構造をもつ原子分子を作り出ししたりします(右図)。エキゾチック



ナトリウム原子 陽電子ナトリウム原子
ナトリウム原子の概略図。陽電子がナトリウム原子中の価電子と結合しポジトロニウムを形成し、巨大なポジトロニウム雲を形成する。

原子分子の研究は、物質科学、基礎物理学、宇宙論などと関わりを持つ境界領域にあります。本研究室では、理論と実験の両面からエキゾチック原子分子を研究しています。また、放射線測定技術を生かして、福島原発事故の放射能汚染調査を行い、低線量の放射線が生物に及ぼす影響調査のための放射能汚染データの蓄積と線量評価を行っています。

【Research】

The laboratory of radiochemistry aims at a comprehensive understanding of structures and reactions of exotic atoms and molecules. Exotic atoms and molecules are the analog of normal atoms and molecules in which one or more of the electrons or nuclei are replaced by other charged particles, such as a positron, a muon, an antiproton, and hypothetical particles. The exotic atoms and molecules shed a light on hidden properties of chemical compounds. Some of them are used as a probe to investigate the microscopic nature from nucleus to materials. Others drastically change a structure of atoms and molecules as never before. Therefore, the subject of the exotic atoms and molecules is in the interdisciplinary region. It partially covers material science, fundamental physics and cosmology, as well as radiochemistry. In this laboratory, exotic atom and molecule are studied both theoretically and experimentally. Taking advantage of experience in radioactivity measurement, we investigate radioactive contamination of the Fukushima nuclear power plant accident.

【代表論文】

- 1) T. Yamashita, M. Umair and Y. Kino, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **50**, 205002 (11pp) (2017).
- 2) ^{90}Sr in teeth of cattle abandoned in evacuation zone: Record of pollution from the Fukushima-Daiichi Nuclear Power Plant accident, K. Koarai, Y. Kino, *et al.*, Sci. Rep., **6**, 24077 (9pp) (2016).
- 3) Distribution of artificial radionuclides in abandoned cattle in the evacuation zone of the Fukushima Daiichi nuclear power plant, T. Fukuda, Y. Kino, *et al.*, PLoS One, **8**, e54312 (7pp) (2013).
- 4) Gaussian Expansion Method for Few-Body Systems, E. Hiyama, Y. Kino, and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys., **51**, 223-307 (2003).

連絡先 木野康志 (Yasushi KINO)
Tel: 022-795-6596 FAX: 022-795-6597
<http://www.radio.chem.tohoku.ac.jp/>

環境放射化学

(Radio- and Environmental Chemistry)

教授 関根 勉

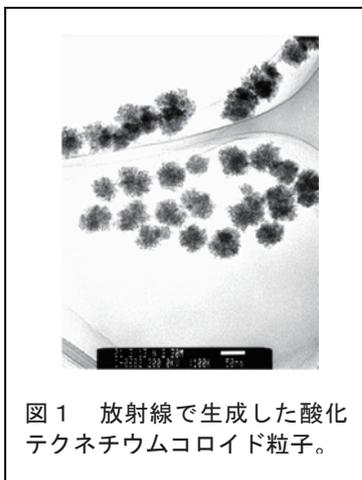


図1 放射線で生成した酸化テクネチウムコロイド粒子。

【研究概要】 社会のエネルギー問題を背景として、原子力発電で生じる高レベル放射性廃棄物に含まれている放射性元素が、どのように環境中を移行するかという疑問に答える研究の重要性が増しています。本研究室ではその基礎過程に着目し、特に、放射性元素テクネチウムを含むコロイドの粒子成長過程や、放射線により誘発されて生成する酸化テクネチウム(IV)粒子(図1)の生成過程などの研究を行っています。また放射線と似たような化学作用を示す超音波を用いたテクネチウムの酸化還元反応も検討しており、ユニークな研究の展開を図っています。

[Research] Our activities have especially focused on the basic research of formation of Tc colloids, because the study of migration of Tc colloids in the environment is of great importance from a viewpoint of high-level radioactive waste disposal in deep underground. Recently, we found the radiolytic formation of TcO_2 colloids and clarified the formation mechanisms including redox reactions between Tc and short-lived radicals produced by radiolysis of water. Oxidative dissolution of TcO_2 colloids by sonolysis was also found, and the research to clarify its reaction mechanisms is in progress.

【代表論文】

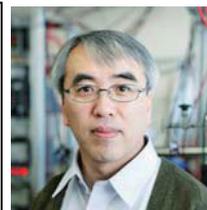
- 1) Sekine, T., Zakir, M., Oxidative Dissolution of $\text{Tc(IV)O}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ Colloids by Sonolysis, *Radiochim. Acta*, **96**, 625–629 (2008).
- 2) Zakir, M., Sekine, T., Takayama, T., Kudo, H., Lin, M., Katsumura, Y., Technetium(IV) Oxide Colloids and the Precursor Produced by Bremsstrahlung Irradiation of Aqueous Per technetate Solution, *J. Nucl. Radiochem. Sci.*, **6**, 243-247 (2005).
- 3) Sekine, T., Narushima, H., Suzuki, T., Takayama, T., Kudo, H., Lin, M., Katsumura, Y., Technetium(IV) Oxide Colloids Produced by Radiolytic Reactions in Aqueous Per technetate Solution, *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*, **249**, 105–109 (2004).

連絡先 関根 勉 (Tsutomu SEKINE)

Tel & Fax: 022-795-7667

理論化学研究室
(Reaction Dynamics)

教授 美齊津文典
准教授 岸本 直樹
助教 大下慶次郎
助教 中野 元善



【研究概要】我々の研究の主題は「**クラスター(原子分子の小集団)を対象とした化学反応動力学の研究**」です。化学反応は、原子・分子・クラスターなどの粒子が衝突する(接近して相互作用することから始まります。その結果、通常の化学反応のほかに、エネルギー・運動量の移行や電子の移動など、様々な現象が起こります。我々は、イオン移動度分析・質量分析や分光法を組み合わせた最先端の実験手法を駆使して、粒子間の相互作用のほか、化学反応の種類とその進み方の詳細、それを決めている要因を明らかにする「**動力学**」の研究を進めています。我々が対象としているクラスター系は、金属酸化物などの**金属原子・分子複合系**、炭素やケイ素などの**共有結合系**、アルカリハライドなどの**イオン結晶**や、**溶媒和された高分子**などです。また、動力学の解明のほかに、フラレン類に続く「**新たな安定化学種の発見**」を目指しています。さらに、「**スパッタリング法で生成した金属クラスターイオンの構造と反応**」「**Li⁺@C₆₀の新規プラズマ合成と物性探索**」に関する研究も進めています。今後も新しい研究テーマを設定して、上記の目標に向けて挑戦していきます。現在の主な研究テーマは以下の四つです。

- (1) **イオン移動度質量分析法と分光法**を組合せたクラスターの幾何構造と化学反応の研究
- (2) 解離イオンの**質量選択画像観測**によるクラスターイオンの光誘起動力学過程の研究
- (3) **パルススパッタリング法**により生成したクラスターイオンの構造と反応性の研究
- (4) **量子化学計算**による様々な分子・化学種の異性化や解離反応機構の解明

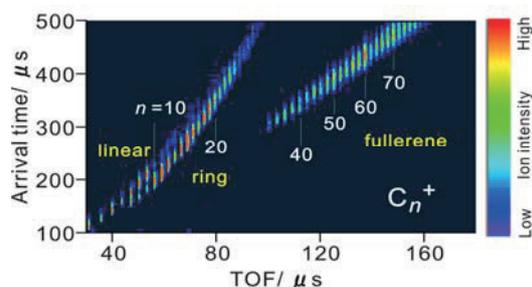


図. イオン移動度質量分析による炭素クラスターイオン C_n^+ ($n = 3-78$) の飛行時間(横軸, 質量に対応)ードリフト到達時間(縦軸, イオンの断面積に対応)二次元図。赤い部分ほどイオン強度が大きい。白数字は炭素原子数 n で、 $n=9$ までは直線、30程度までは環状構造が観測されている。さらに、 $n \geq 32$ ではコンパクトで偶数サイズが安定なフラレン構造が分離されて検出されている。この手法を用いて各異性体を選択することができ、さらにレーザー光を照射して光解離反応や光電子スペクトルを観測することができる。

【代表論文】

- 1) J. W. J. Wu, R. Moriyama, M. Nakano, K. Ohshimo, and F. Misaizu, Compositions and Structures of Niobium Oxide Cluster Ions, $Nb_mO_n^+$, ($m = 2-12$), Revealed by Ion Mobility Mass Spectrometry, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 24903-24914 (2017).
- 2) K. Okutsu, Y. Nakashima, K. Yamazaki, K. Fujimoto, M. Nakano, K. Ohshimo, and F. Misaizu, Development of a linear-type double reflectron for focused imaging of photofragment ions from mass-selected complex ions, *Rev. Sci. Instrum.* **88**, 053105 (2017). (8 pages).
- 3) N. Kishimoto and K. Ohno, Observation of Anisotropic Interactions between Metastable Atoms and Target Molecules by Two-Dimensional Collisional Ionization Electron Spectroscopy, *Int. Rev. Phys. Chem.* **26**, 93-138 (2007).

連絡先 美齊津 文典 (Fuminori MISAIZU)
Tel: 022-795-6577 FAX: 022-795-6580
<http://qpcrkk.chem.tohoku.ac.jp/>

量子化学研究室

(Quantum Chemistry Laboratory)

准教授 藤井 朱鳥

助 教 前山 俊彦

助 教 松田 欣之



【研究概要】 我々が日常目にする物質は $\sim 10^{23}$ 個という非常に数多くの分子からなり、その性質は個々の分子だけでなく、水素結合など分子同士の相互作用に大きく依存しています。2～数百個の分子が相互作用により結びついたミクロの集合体を真空中に取り出すことが出来、それらは「クラスター」と呼ばれます。クラスターは巨視的な物質の一部をいわば「切り出した」ものであり、極めて複雑な分子間の現象における本質的な部分のみを取り出すことを可能とします。私たちは様々な先端的レーザー分光法と質量分析手法を用いた実験に量子化学計算を組み合わせ、クラスターの構造や反応の解明を調べています。これにより、数十～数百個の水分子が形成する水素結合ネットワークの構造やイオン化に伴う分子間プロトン移動の様子などについて解明を行っています。

図1 水クラスター(H_2O)_nにおける水素結合ネットワーク構造の発展

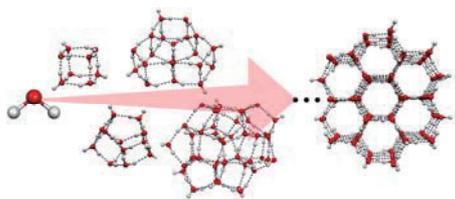
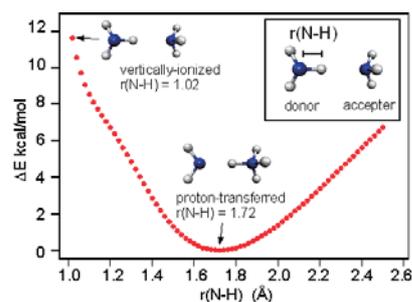


図2 光イオン化に伴うクラスター内プロトン移動



【Research】 A molecular cluster is an isolated system consisting of finite number of molecules. A cluster can be regarded as a microscopic model which enables us to visualize complicated intermolecular structures in the corresponding bulk system. We study intermolecular structures of clusters by laser spectroscopy combined with mass spectrometry.

【代表論文】

- 1) Fujii, A.; Mizuse, K. Infrared Spectroscopic Studies on Hydrogen-Bonded Water Networks in Gas Phase Clusters. *Int. Rev. Phys. Chem.* **32**, 266-307 (2013).
- 2) Matsuda, Y.; Yamada, A.; Hanaue, K.-i.; Mikami, N.; Fujii, A., Catalytic Action of a Single Water Molecule in a Proton-Migration Reaction, *Angew. Chem. Int. Ed.* **49**, 4898-4901 (2010).
- 3) Maeyama, T.; Yoshida, K.; Fujii, A. Size-Dependent Metamorphosis of Electro Binding Motif in Cluster Anions of Primary Amide Molecules. *J. Phys. Chem. A*, **116**, 3771-3780 (2012).

連絡先 藤井朱鳥 (Asuka FUJII)

Tel: 022-795-6572 FAX: 022-795-6785

<http://www.qclab.chem.tohoku.ac.jp/>

有機物理化学研究室

(Organic Physical Chemistry)

教授 叶 深

准教授 柴田 穰

助教 井上 賢一



【研究概要】 触媒反応をはじめ多くの化学反応は、物質の表面あるいは界面で起こる。したがって、物質の表面・界面における微視的構造評価と制御は、化学反応の本質的理解および新機能物質の創出において極めて重要である。本研究室は、古典的な電気化学を基盤としつつ、和周波発生 (SFG) 非線形振動分光や、単分子分光、顕微分光、走査型プローブ顕微鏡などの最先端計測技術を駆使し、物質表面・界面で起こる化学反応の動的挙動を高感度に捉え、表面・界面構造と反応活性との関係を調べている (図1)。なかでも高効率の二次電池電極触媒の開発や表面構造制御によるソフトマターの高機能化を目指して、分子・原子レベルでの理解に基づく研究に取り組んでいる。また、非常に巧妙に制御され組織化されている光合成を中心とした生体中の光反応の機構解明にも取り組んでいる。様々な物質表面・界面の反応場における分子集合体の物性や構造変化、化学反応機構を解明することにより、新規物質の創製も目指す。



図1. 界面物理化学の研究

[Research] Our research interests are focused on the physical chemistry occurring at the surface or interface of various functional materials. Our research approach is based on many highly sensitive measurement techniques, such as sum frequency generation (SFG) vibrational spectroscopy, single-molecule spectroscopy, micro-spectroscopy, scanning probe microscope (SPM), in combination with standard methods in electrochemistry and interfacial chemistry. For example, to develop electrocatalysts for the secondary battery and fuel cell with high energy conversion efficiency, we are unraveling the reaction mechanism and kinetics on the electrode/solution interface. We are also studying the photo-induced chemical reaction in biological systems to understand the physical chemistry principle for photosynthesis. These studies will lead us to deep understanding about the mechanism and dynamics of chemical reactions on the surface/interface and to develop novel materials.

【代表論文】

- 1) Qiao, Y.; Ye, S. Spectroscopic Investigation for Oxygen Reduction and Evolution Reactions with TTF as a Redox Mediator in Li-O₂ Battery. *J. Phys. Chem. C*, **120**, 15830-15845 (2016)
- 2) Ye, S.; Tong, Y.; Ge, A.; Qiao, L.; Davies, P. Interfacial Structure of Soft Matter Probed by SFG Spectroscopy. *Chemical Record*, **14**, 791-805 (2014).
- 3) Yu, L.; Liu, H.; Wang, Y.; Kuwata, N.; Osawa, M.; Kawamura, J.; Ye, S. Preferential Adsorption of Solvents on Cathode Surface of Li-ion Batteries. *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**, 5753-5756 (2013).
- 4) Shibata, Y.; Nishi, S.; Kawakami, K.; Shen, J. R.; Renger, T., Photosystem II Does Not Possess a Simple Excitation Energy Funnel: Time-Resolved Fluorescence Spectroscopy Meets Theory, *J. Am. Chem. Soc.*, **135**, 6903-6914 (2013).

連絡先 叶 深 (Shen YE)

Tel: 022-795-6567 e-mail: ye.shen@tohoku.ac.jp

<http://opc.chem.tohoku.ac.jp/>

数理化学研究室

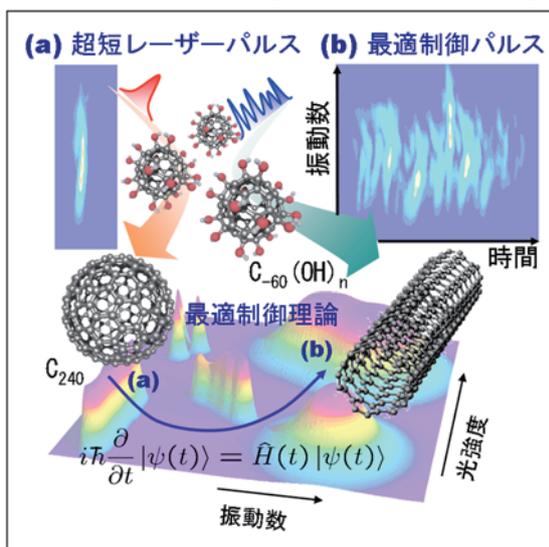
(Theoretical Chemistry)

教授 河野 裕彦
准教授 大槻 幸義
助教 菅野 学



【研究概要】 私たちの研究室では、化学反応がどのようにして起こるのかを理論的に研究しています。これはもっとも基本的で重要な研究課題の一つです。錬金術に象徴されるように、人々は昔から欲しいものを創り出すことを夢見て、これまで多くの実験を行い、その経験の積み上げで合成の技術体系を作ってきました。しかし、最近ではコンピュータの発達により、経験に頼らないで合成の処方せんをつくることができます。コンピュータケミストリーと呼ばれる新しい研究領域です。たとえば、図のようにポリヒドロキシフラーレンから望みのナノカーボンを得るにはどのようなレーザーパルスが最適かを考えるのです。私たちの研究室では、数理化学という名前のように数学的・物理学的理論手法とコンピュータを組み合わせ、化学反応から細胞の光応答まで、それらの理解や制御に関する研究を進めています。より具体的には、気相および界面を含む種々の凝縮相において、フェムト秒からミリ秒の広い時間スケールで起こっている光物理化学現象の解明及び反応・電子ダイナミクスの電磁場による量子制御法の確立を目指しています。

- ・多配置時間依存ハートレーフォック電子動力学法および励起状態動力学理論
- ・高出力レーザー場中の原子・分子の第一原理動力学反応シミュレーション
- ・ナノカーボンの高速変換の化学
- ・レーザー等の外場による反応・電子移動制御の量子設計理論とその応用：分子を用いた量子情報・量子コンピュータおよび光誘起分子配列・配向の最適制御
- ・分子ダイナミクスのイメージング：時間分解×線回折法とクーロン爆発への応用
- ・光駆動分子モーターや結晶性分子コマなど分子マシンの動力学
- ・DNAの鎖切断の反応動力学シミュレーション



【代表論文】

- 1) S. Ohmura, T. Kato, T. Oyamada, S. Koseki, H. Ohmura, and H. Kono, A single-electron picture based on the multiconfiguration time-dependent Hartree–Fock method: application to the anisotropic ionization and subsequent high-harmonic generation of the CO molecule, *J. Phys. B* **51**, 034001 (16 pages) (2018).
- 2) K. Arai and Y. Ohtsuki, Reduced-dynamics Approach for Optimally Designing Unitary Transformations, *Phys. Rev. A* **92**, 062302 (12 pages) (2015).
- 3) A. B. Marahatta, M. Kanno, K. Hoki, W. Setaka, S. Irlle, and H. Kono, Theoretical Investigation of the Structures and Dynamics of Crystalline Molecular Gyroscopes, *J. Phys. Chem. C* **116**, 24845-24854 (2012).

連絡先 河野 裕彦 (Hirohiko KONO)
Tel:022-795-7720 FAX:022-795-7720
<http://www.mcl.chem.tohoku.ac.jp/>

計算分子科学研究室

(Computational Molecular Science
Laboratory)

教授 森田 明弘

准教授 高橋 英明

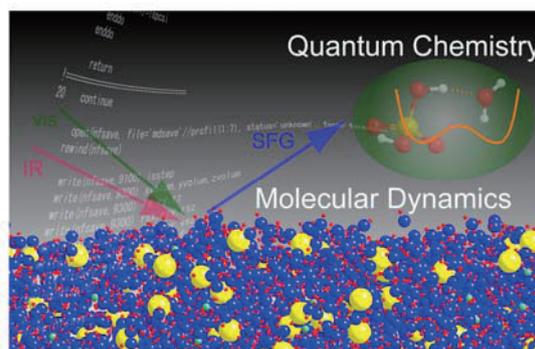
助教 王 琳



【研究概要】 溶液内や界面での分子過程を、電子状態計算や分子シミュレーションに基づく理論計算によって解明する研究を展開しています。最近では溶液中の化学反応やダイナミクスに加えて、不均質系の界面現象を主な研究対象としています。

凝集系での化学現象を分子レベルで理解するには、個々の分子の化学的な特徴と分子間力が織りなす統計的な性質の両方が必要です。私たちの研究グループでは電子状態と分子動力学の両方の知識をふまえて、新しい理論的方法論の開発や応用を図っています。現在の中心的な研究課題に挙げられる**電子分極の理論**や**界面和周波発生**の理論は、その典型的な例です。また新しい計算手法を、スーパーコンピュータを最大限に用いた大規模計算の中に実現していきます。

電子状態に基づく分子モデリングと分子動力学シミュレーションを主な方法とする理論・計算化学は、凝集系を解明する上で応用範囲の広い正攻法といえ、近年の計算機の進歩に伴って、化学の中での重要性を急速に増しつつあります。計算化学の将来を担う学生さんには、実験と協力できる幅広い視野と理論計算の研究手法を身に付け、実験だけでは解明できない領域に答えを与えられる研究を目指してほしいと思っています。



【Research】 Our research activities deal with theory and computation of various molecular processes in solutions and interfaces, on the basis of quantum chemistry of molecular electronic structure and molecular dynamics simulation. We are particularly interested in development of new theoretical and/or computational methods, such as theory on electronic polarization and computation of interfacial sum frequency generation spectroscopy. Massive computations are carried out using advanced computer facilities.

【代表論文】

- 1) Ishiyama, T., Morita, A., “Computational Analysis of Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy,” *Annu. Rev. Phys. Chem.* **68**, 1 (2017)
- 2) Kikkawa, N., Wang, L., Morita, A., “Microscopic Barrier Mechanism of Ion Transport through Liquid-Liquid Interface,” *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 8022 (2015).
- 3) Takahashi, H., Matubayasi, N., Nakano, M., “Development of a Quantum Chemical Method Combined with a Theory of Solutions—Free-Energy Calculation for Chemical Reactions by Condensed Phase Simulations,” *Adv. Quant. Chem.* **59**, 283 (2010).

連絡先 森田 明弘 (Akihiro MORITA)

Tel: 022-795-7717 FAX: 022-795-7716

<http://comp.chem.tohoku.ac.jp>

有機化学第一研究室
(天然物ケミカルバイオロジー)
(Chemical Biology
of Natural Products)

教授 上田 実
 講師 高岡洋輔
 講師 加藤信樹
 助教 石丸泰寛

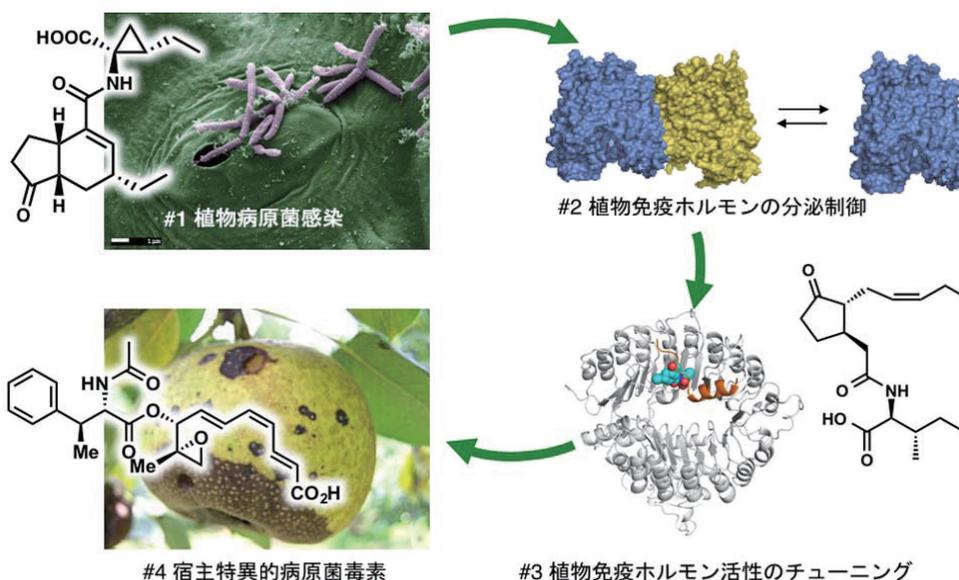


【研究概要】

生物が生産する天然有機化合物は、多彩な構造と生物活性を有しています。近年、欧米を中心に、ケミカルバイオロジー(化学生物学)が化学の中核分野として台頭してきました。当研究室では、伝統的な天然物

化学を最新のケミカルバイオロジーと融合した「天然物ケミカルバイオロジー」を強力に推進しており、その目標は、化学プローブによる生物制御、生物現象の化学的解明です。

特に、世界の食糧生産に被害を与える植物病害の防除につながる植物-微生物間の生物間相互作用や、ダーウィン以来の歴史的研究テーマである生物時計に制御される植物の就眠運動に着目し、創薬化学的手法に基づく天然有機化合物の活性チューニングや生物現象の分子機構機構などに関する研究を行っています。



【代表論文】

- 1) Y. Takaoka, M. Ueda, *et al.*, A rationally designed JAZ subtype-selective agonist of jasmonate perception, revision submitted (2018).
- 2) M. Ueda, *et al.*, The alkyne-tag Raman imaging of coronatine, a plant pathogen virulence factor, in *Commelina communis* and the possible mode of action, *Org. Biomol. Chem.*, in press (2018).
- 3) M. Ueda, *et al.*, Non-canonical function of a small-molecular virulence factor coronatine against plant immunity: An *In vivo* Raman imaging approach, *ACS Cent. Sci.*, **3**, 462-472 (2017). DOI: 10.1021/acscentsci.7b00099.
- 4) Y. Kanno *et al.*, AtSWEET13 and AtSWEET14 regulate gibberellin-mediated physiological processes, *Nature Commun.* **7**, 13245 (2016).
- 5) H. Saito *et al.*, A The jasmonate-responsive GTR1 transporter is required for gibberellin-mediated stamen development in *Arabidopsis*, *Nature Commun.* **6**: 6095 (2015).
- 6) Y. Nakamura, *et al.*, 12-Hydroxyjasmonic Acid Glucoside is a COI1-JAZs Independent Activator of Leaf Closing Movement in *Samanea saman*, *Plant Physiol.*, **155**, 1226 (2011).

連絡先 上田 実 (Minoru UEDA, ueda@m.tohoku.ac.jp)
 Tel: 022-795-6553 FAX: 022-795-6553
<http://www.orgchem1.chem.tohoku.ac.jp/>

合成・構造有機化学研究室

(Synthetic and Structural Organic Chemistry)

教授 岩本武明

准教授 石田真太郎

助教 佐々木茂



【研究概要】 ケイ素やリンなど典型元素を持つ有機典型元素化合物は、多数の元素と多様な結合様式の組み合わせが可能であり、炭素を中心とした有機化合物にはない特異な構造、反応性と物性を示すことから、未来の物質科学に大きなブレークスルーをもたらす「物性と機能の宝庫」として注目されています。私たちは

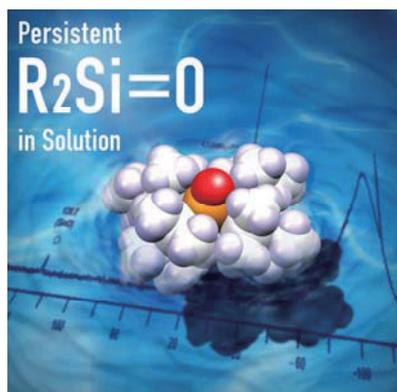


図1. 溶液中安定なケイ素-酸素二重結合化合物 (シラノン、橙 (ケイ素)、赤 (酸素)).

と機能の宝庫」として注目されています。私たちは典型元素の特性を生かした新しい構造をもつ有機典型元素化合物を合成し、それらの優れた物性や反応性を引き出すことを追求しています。特に、ケイ素を基軸とした新しい σ および π 電子系化合物の合成と性質の解明(例: 図1)、特異な電子状態をもつリン化合物の合成と機能解明に取り組んでいます。典型元素を基軸とする新しい物質群の創出と機能性物質への応用、典型元素化合物の構造や反応を系統的に理解するための基盤となる包括的概念の構築により、物質科学の発展に貢献することを目指しています。

【Research】 Our research projects are focusing on the creation of new compounds involving main group elements such as Si, B, P, Sb and Bi to discover the unique structural characteristics and electronic properties that can be applied as new functional materials for the next generation. Recent progress in our group includes the development of unique silicon-based σ/π -electron systems, and phosphorus compounds with unique electronic properties. In our group, we aim to build the systematic view in bonding, structure, reactions, and properties covering the chemistry of the main group elements.

【代表論文】

- 1) Stable Push-Pull Disilene: Substantial Donor-Acceptor Interactions through the Si=Si Double Bond
T. Kosai and T. Iwamoto, *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 18146-18149 (DOI: 10.1021/jacs.7b09989).
- 2) Benzodisilacyclobutadienes: 8π -Electron Systems with an Antiaromatic Silicon Ring
S. Ishida, Y. Misawa, S. Sugawara, T. Iwamoto, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 13829-13832 (DOI: 10.1002/anie.201707553).
- 3) A Two-Coordinate Cyclic (Alkyl)(amino)silylene: Balancing Thermal Stability and Reactivity
T. Kosai, S. Ishida, T. Iwamoto, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 15554-15558 (DOI: 10.1002/anie.201608736).
- 4) Oxidation of tris(2,4,6-triisopropylphenyl)phosphine and arsine, S. Sasaki, K. Sutoh, Y. Shimizu, K. Kato, M. Yoshifuji, *Tetrahedron Lett.*, **2014**, *55*, 322-325 (DOI: 10.1016/j.tetlet.2013.11.004).

連絡先 岩本武明 (Takeaki IWAMOTO)

Tel: 022-795-6558 Fax: 022-795-6562

<http://www.ssoc.chem.tohoku.ac.jp/>

有機分析化学研究室
(天然物合成化学)

(Natural Product Synthesis)

教授 林雄二郎

助教 梅宮茂伸

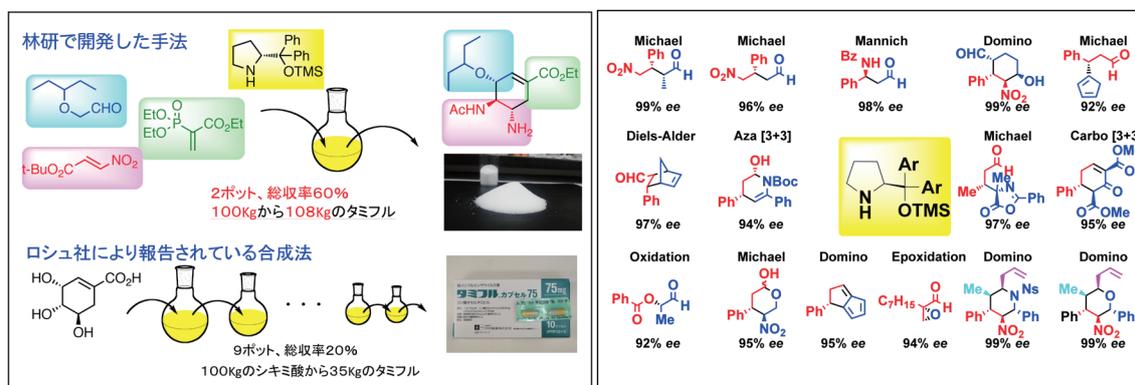


【研究概要】 有機合成化学の最重要課題の一つである、強力な生物活性を有する天然有機化合物の全合成、および新しい反応の開発について研究を行っています。

強い生物活性を有しているのですが、天然からは極微量しか得られない化合物が多く存在します。このような化合物を有機化学の力で全合成を行い、さらに天然物よりも優れた生物活性を有する人工化合物の創製を目指しています。合成に際しては、できるだけ独創的な手法で作る事を心がけています。

また新しい反応の開発では、黄色で示した触媒が多くの反応の優れた活性化剤になる事を見いだしました。現在、世界中の研究者に使っていただいています。

抗インフルエンザ治療薬であるタミフルは、これまで9段階の化学変換を経て合成されていましたが、我々はわずか1つの反応容器だけで、しかも1時間以内に合成が完了するという画期的な手法を開発しました。この合成が可能となったのは、我々の研究室で開発した触媒反応が非常に効果的に作用したためです。本研究は、基礎研究として重要であるだけでなく、人類の健康・福祉に貢献するものです。



【代表論文】

1. Direct Asymmetric Michael Reaction of α,β -Unsaturated Aldehydes and Ketones Catalyzed by Two Secondary Amine Catalysts, Y. Hayashi, N. Umekubo, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57**, 1958-1962 (2018).
2. Pot Economy in the Total Synthesis of Estradiol Methyl Ether by Using an Organocatalyst, Y. Hayashi, S. Koshino, K. Ojima, E. Kwon, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 11812-11815 (2017).
3. TimeEconomical Total Synthesis of (-)-Oseltamivir, Y. Hayashi, S. Ogasawara, *Org. Lett.*, **18**, 3426 (2016).
4. Pot economy and one-pot synthesis, Y. Hayashi, *Chem. Sci.*, **7**, 866-880 (2016).
5. One-pot synthesis of (*S*)-baclofen via aldol condensation of acetaldehyde with diphenylprolinol silyl ether-mediated asymmetric Michael reaction as a key step, Y. Hayashi, D. Okamura, D. Sakamoto, *Org. Lett.*, **18**, 4-7 (2016).

連絡先 林 雄二郎 (Yujiro Hayashi)
Tel: 022-795-3554, FAX: 022-795-6566
<http://www.ykbsc.chem.tohoku.ac.jp/>

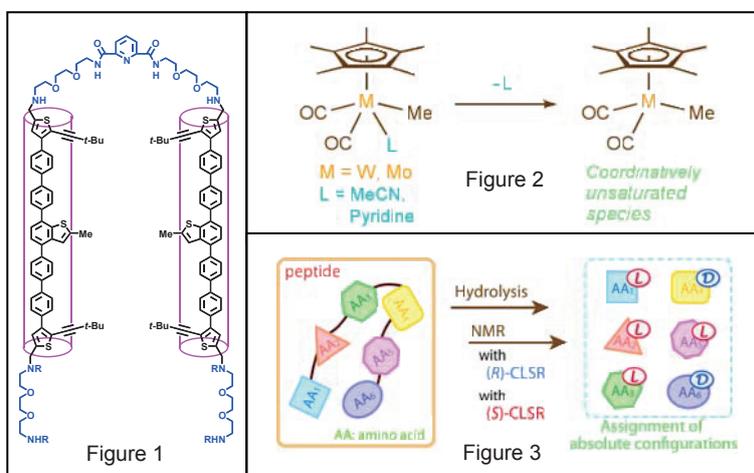
学際基盤化学研究室

(Laboratory of Fundamental
Chemistry)

教授 豊田 耕三
准教授 坂場 裕之
助教(兼) 小俣 乾二
助教 寺内 毅



【研究概要】 我々の研究室では、主として有機金属化合物や遷移金属錯体および配位子の化学の基礎と応用について研究しています。例えば側鎖配列を制御した大規模配位子の構築とその応用について研究しています(図1)⁽¹⁾。また、温和な反応条件で配位不飽和種を生成するタングステンおよびモリブデン錯体の合成と様々な試薬に対する反応性について研究しています(図2)⁽²⁾。最近ではヒドロシラン類との反応により、アセチリド-シリレン錯体、シラプロパルギル錯体、シラアリル錯体等の新規な有機ケイ素配位子を有する錯体を合成し、その構造、結合性および反応性を明らかにしています。また、簡便で装置などの制約が少ないNMRを用いる絶対配置決定法の開発についても研究しています。図3は、ペプチドに応用可能なアミノ酸の絶対配置の一括決定を行えるキラルシフト試薬の例です⁽³⁾。



【Research】 Our laboratory focuses on organometallic chemistry and studies preparations, properties, and applications of various transition metal complexes as well as their ligands. One of our research area is a development of the bio-inspired large ligand systems, which contain sequence-defined side chains: In our ‘linked (ethynylthienyl)oligoarene system’, various side chains can be introduced in a defined order (Figure 1).¹ Another area of research is the study of labile tungsten and molybdenum complexes (Figure 2), showing high reactivity toward various reagents.² The third area is the development of new methods for determining the absolute configuration of organic compounds, using lanthanoid metal-containing chiral NMR shift reagents (Figure 3).³

【代表論文】

- (1) Yamamoto, T.; Katsuta, H.; Toyota, K.; Iwamoto, T.; Morita, N., Preparation of 4,7-Dibromobenzo[*b*]thiophene as a Versatile Building Block and Synthetic Application to a Bis(ethynylthienyl)oligoarene System, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2012**, 85, 613.
- (2) Sakaba, H.; Tonosaki, H.; Isozaki, K.; Kwon, E., η^3 -Silaallyl/Alkenylsilyl Molybdenum Complex: Synthesis, Structure, and Reactivity toward Primary Amines to Form Mo–N–Si Three-Membered Cyclic Complexes, *Organometallics*, **2015**, 34, 1029.
- (3) Omata K.; Fujioka M.; Kabuto K.; Sasaki Y., Use of Sm(III)-{1,2-propanediamine-*N,N,N',N'*-tetra-(α,α -dideuterioacetate)} complex for NMR determination of absolute configuration of each α -amino acid in peptide hydrolysate mixtures, *Chem. Commun.*, **2008**, 4903.

連絡先 豊田 耕三 (Kozo TOYOTA)

Tel: 022-795-7714

<http://www.chem.tohoku.ac.jp/research/laboratory/index.html>

有機化学第二研究室

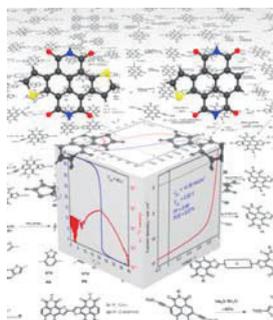
(Laboratory of Organic Chemistry)

教授 瀧宮 和男
助教 川畑 公輔

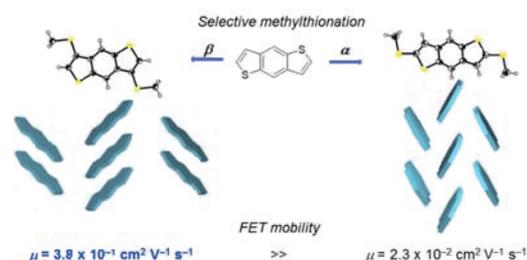


【研究概要】 有機化合物の特徴である「分子構造・電子状態を自在に設計・合成できる」ことを活かし、有機エレクトロニクス（有機トランジスタ、有機太陽電池、導電性材料など）に応用可能な機能性分子を開発し、実際にそれらを集積化することで、スイッチング、光電変換素子などの有機エレクトロニクスデバイスへと応用しています。現在、世界最高レベルの高い移動度を示す低分子有機半導体の開発、新たな電子不足 π 電子系骨格の開発と材料展開などの研究を行っています。

・新しい電子不足 π 電子骨格、チオフェン縮合ナフタレンジイミド類の開発と応用（代表論文 1）



・ π 骨格上の置換基による有機半導体の結晶構造と物性の制御（代表論文 2）



【Research】 Organic molecules can be designed and synthesized as they show desirable functions and properties, and these functional molecules are utilized in fabricating optoelectronic devices such as organic field-effect transistors (OFETs), organic solar cells (organic photovoltaics, OPVs), and thermoelectric (TE) devices. Our research group is currently focusing on developing new key structures for organic semiconductors both with electron-rich or electron-deficient natures and their applications to semiconducting molecules and polymers, which further utilized into p-/n-channel or ambipolar OFETs, OPVs and TE devices.

【代表論文】

- 1) K. Takimiya, M. Nakano, Thiophene-fused Naphthalene Diimides: New Building Blocks for Electron Deficient π -Functional Materials, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **91**, 121–140 (2018).
- 2) C. Wang, H. Nakamura, H. Sugino, K. Takimiya, Methylthionated benzo[1,2-*b*:4,5-*b'*]dithiophenes: a model study to control packing structures and molecular orientation in thienoacene-based organic semiconductors, *Chem. Commun.*, **53**, 9594–9597 (2017).
- 3) M. Nakano, I. Osaka, K. Takimiya, Control of major carriers in ambipolar polymer semiconductor by self-assembled monolayers, *Adv. Mater.*, **29**, 1602893 (2017).
- 4) K. Kawabata, M. Saito, I. Osaka, K. Takimiya, Very Small Bandgap π -Conjugated Polymers with Extended Thienoquinoids, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 7725–7732 (2016).

連絡先 瀧宮和男 (Kazuo TAKIMIYA)

Tel: 022-795-6585

反応有機化学研究室

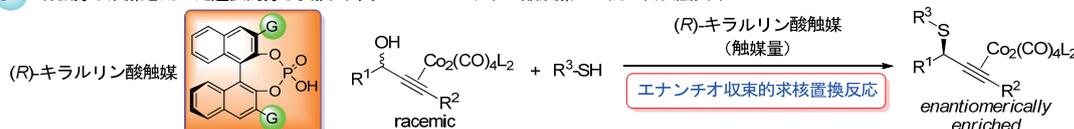
(Laboratory of
Organic Reaction Processes)

教授 寺田 眞浩
准教授 中村 達
准教授 Gridnev, Ilya
准教授 金 鉄男
助教 近藤 梓
助教 菊池 隼

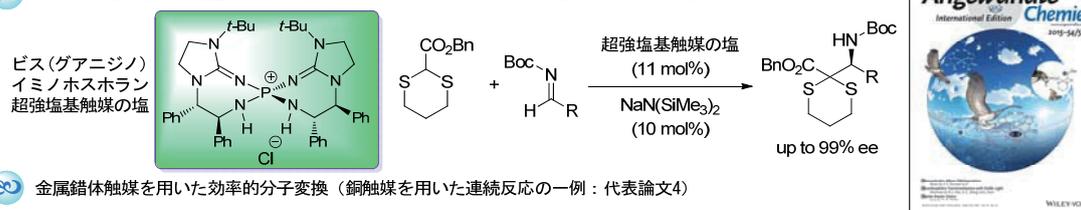


【研究概要】 化学の原点はものづくりにあります。有機化学に求められているのは欲しいものだけを作る選択的な物質変換に加え、効率の追求による環境に配慮した高度な分子変換プロセスの開拓です。我々の研究室では**有機分子**や**金属錯体**の特性を生かした**次世代分子触媒を創製**することで選択性、汎用性、効率に応えうる**新しい分子変換法の開拓**を行っています。さらに、高度分子変換を駆使した有用天然物や生理活性化合物の高効率合成へと展開することで基礎から応用まで一貫した開発研究を目指しています。

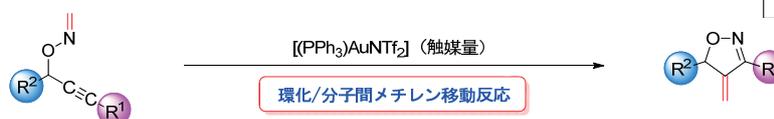
⑧ 有機分子触媒を用いた選択的分子変換（キラルブレンステッド酸触媒の一例：代表論文2）



⑧ 有機分子触媒を用いた選択的分子変換（キラルブレンステッド塩基触媒の一例：代表論文3）



⑧ 金属錯体触媒を用いた効率的分子変換（銅触媒を用いた連続反応の一例：代表論文4）



【Research】 Now a day, the development not only of highly selective reactions leading to desired compounds but also of advanced organic transformations to minimizing the environmental burdens is highly challenging tasks for organic chemists. Our research interests have been focused on the creation of environmentally benign processes using metal complexes and organic compounds as the designed catalyst molecules by taking advantage of the inherent property of these molecules. Furthermore we apply these advanced molecular transformations to selective and efficient synthesis of useful organic materials or biologically active compounds.

【代表論文】

- 1) F. Li, T. Korenaga, T. Nakanishi, J. Kikuchi, M. Terada, Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Enantioselective Ring Expansion Reaction of 1,3-Dithiane Derivatives: Case Study of the Nature of Ion-Pairing Interaction, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 26290-2642 (2018).
- 2) M. Terada, Y. Ota, F. Li, Y. Toda, A. Kondoh, Enantioconvergent Nucleophilic Substitution Reaction of Racemic Alkyne–Dicobalt Complex (Nicholas Reaction) Catalyzed by Chiral Brønsted Acid, *J. Am. Chem. Soc.*, **138**, 11038-11043 (2016).
- 3) A. Kondoh, M. Oishi, T. Takeda, M. Terada, Enantioselective Addition of a 2-Alkoxy carbonyl-1,3-dithiane to Imines Catalyzed by a Bis(guanidino)iminophosphorane Organosuperbase, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **54**, 15836-15839 (2015).
- 4) I. Nakamura, S. Gima, Y. Kudo, M. Terada, Skeletal Rearrangement of O-Propargylic Formaldoximes by a Gold-Catalyzed Cyclization/Intermolecular Methylene Transfer Sequence, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **54**, 7154-7157 (2015).

連絡先 寺田眞浩 (Masahiro TERADA)

Tel: 022-795-6602 FAX: 022-795-6584

<http://www.orgreact.sakura.ne.jp/index.html>

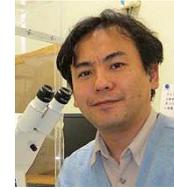
生物化学研究室

(Biochemistry)

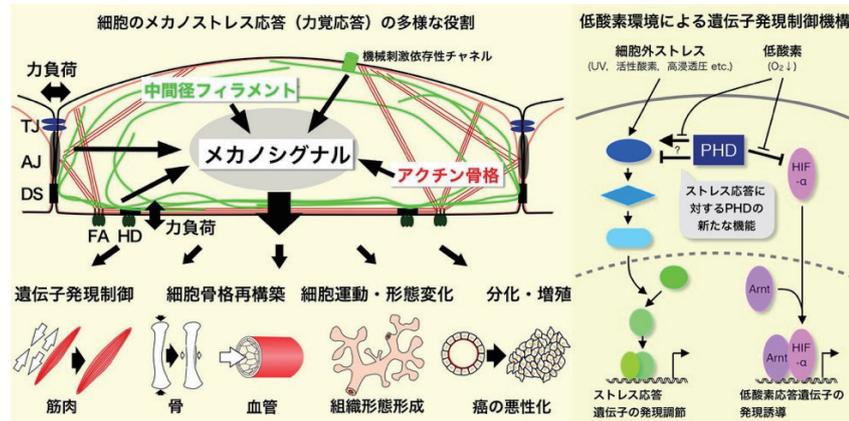
教授 大橋一正

准教授 安元研一

助教 山下和成



【研究概要】 細胞の機械的な力(メカノストレス)と低酸素応答の分子機構について研究しています。筋肉や骨は力の負荷に対応するように構造が変化し、また、組織形態形成時の細胞集団の秩序ある振る舞いにおいても力の作用が重要な働きを持っています。このような応答において細胞が機械的力を感知し、その力に応じた細胞骨格の再構築を行う分子機構の解明を行っています。また、細胞のストレス応答は、細胞の生死を左右する重要なシステムです。低酸素ストレスに適応するための遺伝子誘導機構において、細胞内の酸素センサーとして機能するプロリン水酸化酵素 PHD は低酸素誘導因子 HIF の活性を調節しています。私たちは、PHD が HIF 経路とは異なるストレス応答経路を制御する新たな分子機構の解明も行っています。



【Research】 We are investigating the molecular mechanisms involved in the body's response to environmental stresses, including mechanical forces and energy stresses. It is well known that muscles and bones are properly maintained by exercise and that mechanical responses in epithelial cells are also involved in morphogenesis of epithelial tissues. In our study of mechanical responses, we are examining molecular mechanisms of the actin cytoskeleton reorganization following application of mechanical stresses. Under hypoxic conditions, a large number of genes are induced by hypoxia inducible factors (HIFs) to facilitate adaptations to the low-oxygen environment. Prolyl hydroxylase domain-containing proteins (PHDs), which act as an oxygen sensor, regulate the amount of the HIFs in response to oxygen levels. We are investigating molecular mechanisms of the stress responses through PHDs.

【代表論文】

- 1) Fujiwara S, Ohashi K, Mashiko T, Kondo H, Mizuno K, Interplay between Solo and keratin filaments is crucial for mechanical force-induced stress fiber reinforcement, *Mol. Biol. Cell*, **27**, 954-966 (2016).
- 2) Abiko H, Fujiwara S, Ohashi K, Hiataru R, Mashiko T, Sakamoto N, Sato M, and Mizuno K, Rho-guanine nucleotide exchange factors involved in cyclic stretch-induced reorientation of vascular endothelial cells, *J. Cell Sci.*, **128**, 1683-1695 (2015).
- 3) Hiwatashi Y, Kanno K, Takasaki C, Goryo K, Sato T, Torii S, Sogawa K, and Yasumoto K, PHD1 interacts with ATF4 and negatively regulates its transcriptional activity without prolyl hydroxylation, *Exp. Cell Res.*, **317**, 2789-2799 (2011).

連絡先 大橋 一正 (Kazumasa OHASHI)

Tel:022-795-6590 FAX: 022-795-6594

<http://www.biology.tohoku.ac.jp/lab-www/molbiol/index.html>

分離化学研究室

(Reaction and Separation Processes)

教授 川波 肇

教授 金久保光央

准教授 伊藤 徹二



【研究概要】 私達は、環境にやさしいコンパクトで効率の良い化学プロセスの開発を行っています。例えば、超臨界流体を含む高温高压流体では、各種物性値が容易に大きく変化する性質を利用した新しい化学反応・分離・精製のプロセス開発に取り組んでおり、最近では水素の分離などにも応用しています。また、室温で液体の塩という特徴のあるイオン液体を対象として、その基礎物性や特性を解明しつつ、特異な物質変換や分離技術、ガス分離プロセスの開発などを行っています。近年では、二酸化炭素問題を解決すべくイオン液体を使った Carbon Dioxide Capture and Storage (CCS)にも取り組んでいます。そして、制御した細孔径を有するメソポーラスシリカの膜と酵素を組み合わせ、高速・高感度・長寿命の新しい酵素センサーの開発を行っています。例えばホルムアルデヒドの高速高感度検出及び、コリンエステラーゼを用いた有機リン系農薬などの高感度検出に成功しています。

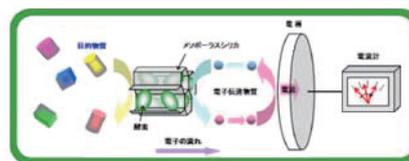
1) 流通式高温高压マイクロリアクターシステム



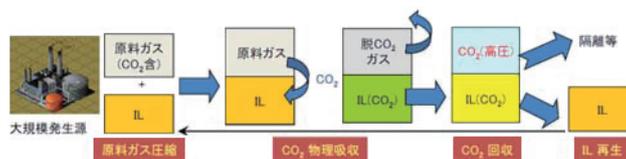
実験室レベル(ミリグラム)から実用プラント(トン)まで
精密制御によるコンパクト反応システム



3) 高感度酵素センサー



2) イオン液体による Carbon Dioxide Capture and Storage



【Research】 Main focus of our research is to strengthen original innovation in the area of effective compact chemical process under the environmentally benign condition. These includes (i) development of different reaction process under the high pressure, high temperature as well as supercritical condition due to its tunable properties, (ii) investigation of the physical properties of ionic liquid (molten salt at room temperature) to exploit its potential in the separation of CO₂ from exhaust gas using the new carbon capture system (CCS) and (iii) investigation of the artificial bio-membrane by encapsulation of enzymes like formaldehyde dehydrogenase, beneficial for high sensitive devices including biosensor and disease diagnostics.

【代表論文】

1. Kinetic Studies on Formic Acid Dehydrogenation Catalyzed by an Iridium Complex towards Insights into the Catalytic Mechanism of High-Pressure Hydrogen Gas Production, *Chemistry – A European Journal*, **23**, 17017-17021, 2017. (Back Cover)
2. CO₂ Solubility in Ether Functionalized Ionic Liquids on Mole Fraction and Molarity Scales, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **4**, 525-535 (2016).
3. High-performance bioelectrocatalysts created by immobilization of an enzyme into carbon-coated composite membranes with nano-tailored structures, *J. Mater. Chem. A*, **5**, 20244-20251 (2017).

連絡先 川波 肇 (Hajime KAWANAMI)
Tel: 022-237-5208 FAX:022-237-5388/5215
<https://unit.aist.go.jp/cpt/>

重元素化学

(Heavy Element Chemistry)

教授(客) 永目 諭一郎

教授(客) 木村 貴海

准教授(客) 目黒 義弘

【研究概要】 自然界に存在する元素は原子番号 92 のウランまでですが, 93 番のネプツニウムから 118 番の元素までが人工的に合成され, その存在が確認されています(2016 年に 113, 115, 117, 118 番元素名が、ニホニウム(Nh), モスコビウム(Mc), テネシン(Ts), オガネソン(Og)に決定)。ネプツニウムより重い元素を超ウラン元素と呼びます。この半世紀の間に人工元素が次々と合成され, これによって自然科学に新しい分野が切り拓かれました。原子力エネルギーの利用, あるいは核物質防護の問題などを通して, 私たちは“重元素”と深く係わり合っています。本研究室では, 次のような重元素の化学に関する研究を進めています。

1	2											13	14	15	16	17	18		
H	He											B	C	N	O	F	Ne		
3	4											5	6	7	8	9	10		
Li	Be											11	12	13	14	15	16	17	18
11	12											Al	Si	P	S	Cl	Ar		
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118		
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og		
ランタノイド		57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71			
アクチノイド		89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103			
		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
		Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

(1) 原子核反応で合成される周期表上で原子番号の上限に位置する重・超アクチノイド元素(原子番号 101 以上)の化学的性質を“シングルアトム”レベルで明らかにするというチャレンジングな研究に取り組んでいます。

(2) 5f 電子が関与するアクチノイド元素の特異な化学的振る舞いを, イオンの構造, 水和・溶媒和状態, 酸化還元, 錯形成, イオン対生成といった観点から溶液化学的手法を用いて調べています。また, 発電用原子炉で燃焼した使用済み核燃料や放射性廃棄物からの種々の元素を分離・回収するための新しい分離法の開発などを進めています。

【Research】 (1) Studies on chemical properties of the heaviest elements are extremely interesting and challenging subjects in the fields of modern nuclear and radiochemistry; chemical characterization of these elements explores the new frontiers of the elements in the 7th period of the Periodic Table. Atom-at-a-time chemistry of the elements at the uppermost end of the Periodic Table is being performed. (2) The actinide elements having 5f electrons are chemically quite interesting elements. Redox properties, complexation ability, and some basic chemical properties in solution are studied. From the view point of nuclear engineering, separation and recovery of actinides from spent nuclear fuel (reprocessing), decontamination of radioactive wastes, analyses of actinides for control of the processes are essentially required. Development of new actinide separation and recovery methods for a design of the separation process is being performed.

【代表論文】

- 1) Sato, T.K., *et al.*, Measurement of the first ionization potential of lawrencium, element 103, *Nature* **520**, 209-211 (2015).
- 2) Kitatsuji, Y., Otake, H., Kimura, T., Kihara, S., Propagation of U(V)-reduction in the presence of U(IV) aggregate in a weakly acidic solution, *Electrochim. Acta* **141**, 6-12 (2014).
- 3) Meguro, Y., Iso, S., Yoshida, Z., Tomioka, O., Enokida, Y., Yamamoto, I., Decontamination of uranium oxides from solid wastes by supercritical CO₂ fluid leaching method using HNO₃-TBP complex as a reactant, *J. Supercritical Fluids* **31**, 141-147 (2004).

連絡先 永目諭一郎 (Yuichiro NAGAMME)

Tel: 029-282-5416 FAX: 029-282-5927

巨大分子解析研究センター

(Research and Analytical Center for
Giant Molecules)

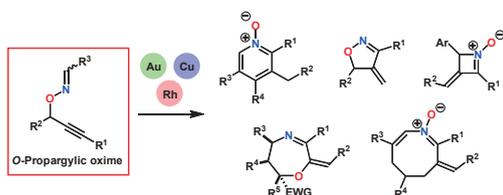
教授 岩本 武明(兼)
准教授 権 垠相
准教授 中村 達
准教授 金 鉄男
助教 近藤 梓
助手 門馬 洋行



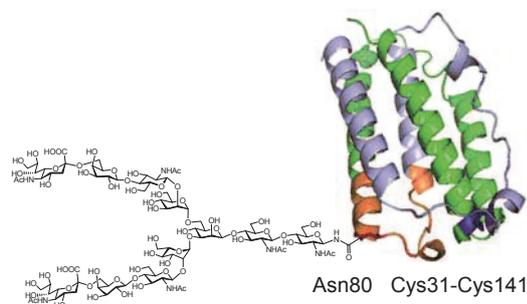
[研究概要]

巨大分子解析研究センターは、新反応の開発や有用化合物の合成、複雑な巨大分子の構造解析などに関する研究を展開している。実験研究部門では、有機分子触媒による選択的不斉合成反応や金属触媒を用いた新合成反応の開発を行っている。解析研究部門には、最新鋭の各種測定機器が揃っており、それらを利用した巨大分子の構造解析や新しい測定手法の開発、研究室から依頼されたサンプルの測定・分析・解析を行っている。

金属触媒による多様なヘテロ環構築反応



Human Interferon Beta



[Research]

The Research and Analytical Center for Giant Molecules consists of two sections for analytical and experimental researches. The analytical section has the latest high-performance instruments for elemental, mass spectrometric (MS), nuclear magnetic resonance (NMR), X-ray crystal structure, and plasma atomic emission (ICP) analyses. These instruments play an important role in determining the structures of small and giant molecules in research on fundamental and applied sciences. The experimental research section investigates the development of new chemical reactions including organic and metallic catalysts, and their application to the synthesis of new functional materials.

[代表論文]

- 1) T. Kosai, T. Iwamoto, Stable Push-Pull Disilene: Substantial Donor-Acceptor Interactions through the Si=Si Double Bond, *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 18146-18149 (2017).
- 2) I. Nakamura, T. Jo, Y. Ishida, H. Tashiro, M. Terada, Cationic *N*-Heterocyclic Carbene Copper-Catalyzed [1,3]-Alkoxy Rearrangement of *N*-Alkoxyanilines, *Org. Lett.*, **19**, 3059-3062 (2017).
- 3) A. Kondoh, T. Aoki, M. Terada, Generation and Application of Homoenolate Equivalents Utilizing [1,2]-Phospha-Brook Rearrangement under Brønsted Base Catalysis, *Chem. Eur. J.*, **23**, 2769-2773 (2017).
- 4) H. Suzuki, M. Ishida, M. Yamashita, C. Otani, K. Kawachi, Y. Kasama, E. Kwon, Rotational dynamics of Li⁺ ions encapsulated in C₆₀ cages at low temperatures, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, 31384-31387 (2016).
- 5) X. Zhang, Z. Xu, W. Si, K. Oniwa, M. Bao, Y. Yamamoto, T. Jin, Synthesis of extended polycyclic aromatic hydrocarbons by oxidative tandem spirocyclization and 1,2-aryl migration, *Nat. Commun.*, **8**, 15073 (2017).

連絡先 岩本 武明 (Takeaki IWAMOTO)

Tel: 022-795-6558 FAX: 022-795-6562

<http://www.kiki.chem.tohoku.ac.jp/index.html>



片平キャンパスの 各研究室紹介



- …多元物質科学研究所
- …金属材料研究所
- …材料科学高等研究所

東北大学大学院理学研究科化学専攻 片平キャンパスについて

東北大学大学院理学研究科化学専攻 片平キャンパスは本学の附置研究所である多元物質科学研究所と金属材料研究所、材料科学高等研究所より構成されています。簡単にそれぞれの研究所・機構についてご説明します。

多元物質科学研究所（略称：多元研、英文名：Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials (IMRAM)）は、2001年4月にそれまでの素材工学、科学計測、反応化学の3研究所が統合・再編して発足した研究所です。「多元」とは「多くの根元や要素があること」を意味しています。金属、無機、半導体、有機、高分子、バイオ関連など、従来は研究組織も学会や企業などにおいてもそれぞれ別々に探求されてきた物質・材料群の壁を取り払い、すべてを同等に扱い、これらをナノレベルで構成要素とする複合ナノ物質・材料を研究対象とすることにより、新規現象の発現、諸特性の革新的向上に繋げることを目的とし、その成果を社会還元することです。

金属材料研究所（略称：金研、英文名：Institute of Materials Research）は1922年に設置された非常に歴史のある研究所であり、1987年5月、東北大学附置全国共同利用型研究所として再発足した研究所です。本研究所では、金属をはじめ、半導体、セラミックス、複合材料などの広範な物質・材料に関する基礎と応用の両面の研究により、真に社会に役立つ新たな材料を創出することを目的とし、社会に貢献することです。

材料科学高等研究所（略称：WPI, AIMR、英文名：World Premier International Research Center, Advanced Institute for Materials Research）は、東北大学の100周年を祝した2007年に文部科学省の「世界トップレベル研究拠点プログラム」としてスタートしました。AIMRでは、「バルク金属ガラス」「ナノ物理」「ナノ化学バイオ」および「デバイス / システム」の4つの領域を中心に物理・化学・エレクトロニクスなど様々な分野を融合しながら、最先端の機能性材料に関する研究を行っています。また、異分野間の共同研究や創造性の促進を通じて、将来有望な若手研究者の育成にも力を注いでいます。

東北大学大学院理学研究科化学専攻 片平キャンパスのすべての研究室では理学部化学科の学部生は配属されておらず、大学院からの進学・入学となっております。

本パンフレットは大学院への進学を希望される学生さん向けに、東北大学大学院理学研究科化学専攻 片平キャンパスに所属する研究室の構成及び各研究室の研究概略を紹介しています。より詳細は各研究室のホームページ（研究概略のページに掲載）にて確認して下さい。本パンフレットが大学院を選択する学生の方々の参考になれば幸いです。

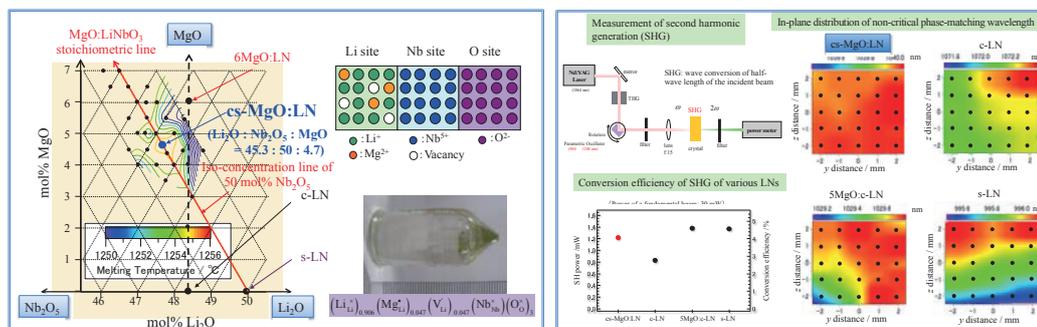
結晶材料化学分野

(Crystal Chemistry)

教授 宇田 聡
准教授 岡田 純平
助教 野澤 純
助教 新家 寛正



[研究概要] 高度情報化社会を支えているエレクトロニクス、オプトエレクトロニクスの分野でそのキーとなる機能性材料やデバイスの発達は、関連する単結晶の探索に大きく依存してきたと言っても過言ではありません。本研究室は、結晶成長過程における界面現象と育成された結晶の特性の関係を明らかにするといった立場から、主として融液からの結晶成長に取り組んでいます。特に、電場、磁場、あるいは応力場といった“外場”を界面に印加したり、また、融液に対し熱処理やあるいは攪拌混合などの機械的操作を加え、結晶—融液間の自由エネルギー関係を調整することで、界面ダイナミクスを人為的に操作するといった全く新しい手法の結晶成長法を目指しています。こうしたアプローチを組み合わせることにより、21世紀高度情報化社会に必要な、光学、圧電、磁性等の分野で有用な新結晶や、あるいは、従来育成が困難とされていた結晶の創製を可能にしていきます。



不純物や空格子を導入するといった従来考えられなかった新しい化学量論の概念を展開し、化学量論組成と調和融解点一致する Mg 添加ニオブ酸リチウムを作製した。非線形光学特性にも組成均質性にも優れた結晶の創出である。

[Research] Development of almost every functional material and device in the area of information technology has been aided by the research of the associated single crystal. This lab is concerned with the novel approach mainly for the growth from melt by studying the relationship between the interface dynamics during growth and properties of grown crystals. Special interests lie in the growth of new crystals via the manipulation of the interface dynamics (1) by the imposition of an interface-electric, -magnetic and -stress fields and (2) by the change of the solid-liquid energy relationship through the thermal or mechanical treatment on the solid or liquid. Combining these approaches will also shed new light on the crystal growth that has never been successful. Crystals developed this way will widen an application opportunity in the piezoelectric, magnetic, optic and other fields related to the highly-networked information society.

[代表論文]

- 1) Satoshi Uda, "Chapter 4: Stoichiometry of Oxide Crystals", *Handbook of Crystal Growth, Second Edition, Vol. I, Fundamentals: Thermodynamics and Kinetics, and Transport and Stability, Elsevier B.V.*, (2014) 175-214.
- 2) C. Koyama, J. Nozawa, K. Maeda, K. Fujiwara, S. Uda, "Investigation of defect structure of impurity-doped lithium niobate by combining thermodynamic constraints with lattice constant variations", *J. Appl. Phys.*, **117** (2015) Art. No. 014102 (7pages).
- 3) C. Koyama, J. Nozawa, K. Fujiwara, S. Uda, "Effect of point defects on Curie temperature of lithium niobate", *J. Am. Ceram. Soc.*, **100** (2017) 1118-1124.

分野連絡先 宇田 聡 (Satoshi Uda)
Tel: 022-215-2100 FAX: 022-215-2101
<http://www.uda-lab.imr.tohoku.ac.jp/>

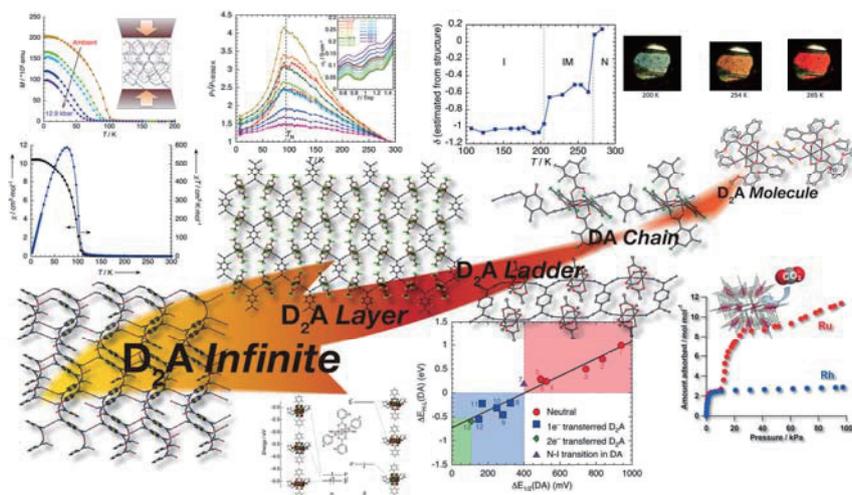
錯体物性化学研究室
(Solid-State Metal-Complex Chemistry)

教授 宮坂 等
准教授 谷口耕治
助教 高坂 亘
助教 関根良博



【研究概要】 金属錯体は、遷移金属イオンとその周りの有機物・無機物（配位子）からなる分子性化合物です。その金属イオンの酸化状態とスピン状態は、金属イオンの選択に加え、配位子と金属周りの幾何構造を制御することによって柔軟且つ多様に変えることができます。例えば、プラモデルを組み立てるがごとく、金属イオンとそれを繋ぐ架橋配位子を組み合わせることによって、磁気的相関や電子共役を媒介する多次元連続格子を設計することができます。当研究室では、金属錯体による多次元格子での電子やスピンの自在制御と非自明電子・磁気物性を発現するソフトマテリアルの探索に取り組んでいます。特に、格子上での電荷移動・電子移動の制御による分子スピントロニクスの開拓、分子性強磁性導電体の開発、酸化還元活性多孔性分子材料の開発とホスト・ゲスト相互作用による電子・スピン協奏現象の開拓などに取り組んでおり、近未来分子格子ソフトマテリアル・ナノマテリアルの新たな提言を発信することを目指しています。

【Research】 We are studying on solid-state physical chemistry based on metal complexes or coordination compounds, in which our goal is directed to control synergistically electronic and magnetic properties/behavior on molecular frameworks and finally to create new soft molecular materials with unique phenomena.



【代表論文】

- 1) W. Kosaka, Y. Takahashi, M. Nishio, K. Narushima, H. Fukunaga, H. Miyasaka, "Magnetic Sponge with Neutral-Ionic Phase Transitions," *Adv. Sci.*, **5**, 1700526(1–10) (2018).
- 2) K. Taniguchi, K. Narushima, H. Sagayama, W. Kosaka, N. Shito, H. Miyasaka, "In Situ Reversible Ionic Control for Non-Volatile Magnetic Phases in a Donor/Acceptor Metal-Organic Framework," *Adv. Func. Mater.*, **27**, 1604990(1–10) (2017).
- 3) H. Fukunaga, H. Miyasaka, "Magnet Design via the Integration of Layer and Chain Magnetic Systems in a π -Stacking Pillared Layer Framework," *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 569–573 (2015).
- 4) W. Kosaka, K. Yamagishi, J. Zhang, H. Miyasaka, "Gate-Opening Gas Adsorption and Host-Guest Interacting Gas Trapping Behavior of Porous Coordination Polymers under Applied AC Electric Fields," *J. Am. Chem. Soc.*, **136**, 12304–12313 (2014).
- 5) H. Miyasaka, "Control of Charge Transfer in Donor/Acceptor Metal–Organic Frameworks," *Acc. Chem. Res.*, **46**, 248–257 (2013).

連絡先 宮坂 等 (Hitoshi MIYASAKA)
Tel: 022-215-2030 FAX: 022-215-2031
<http://www.miyasaka-lab.imr.tohoku.ac.jp/>

ナノ・マイクロ計測化学研究分野

(計測研究部門)

(Nano/Micro Chemical Measurements)

教授 火原 彰秀

准教授 大庭 裕範

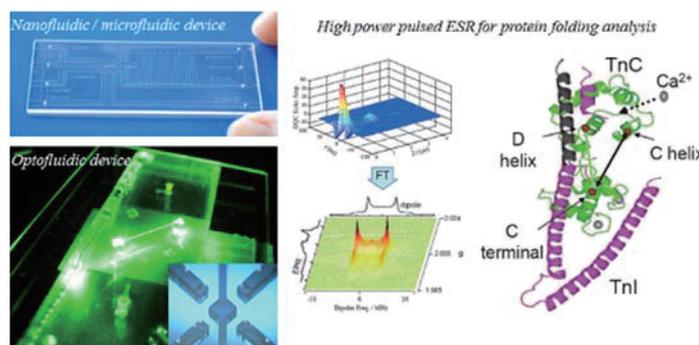
助教 福山 真央



【研究概要】「ナノ・マイクロ世界の計測化学」

ナノ・マイクロ空間を利用した化学・生化学の集積化と高度化に関する研究分野開拓を中心に研究を進めています。生体・環境・食品・工業プロセスなどを対象とした簡便分析・自動分析などの実現が期待できます。

また、単一細胞を対象とする分析、単一分子レベルでの分析、結晶化などの単一事象の分析、高速混合時の物質挙動の追跡など、他の手法からは得られない情報を計測するデバイス・計測技術実現に挑戦しています。このような新しい技術のためには、空間制約下での化学反応・相変化などの特性を明らかにする基礎化学研究が必要となります。そのためのツールとして、顕微イメージング法、顕微レーザー分光法、電子スピン共鳴 (ESR) 法などで、他に例のない高度計測手法の開発を進めています。



【Research】 “Chemical Measurements for Nano/Micro Scale Molecules and Objects”

We study advanced nano-micro technologies in chemistry – biochemistry and their applications to integrated analytical devices. We investigate easy and automated analytical technologies for life science, environmental science, food safety, and industrial process. We also investigate novel analytical technologies such as single cell analysis, single molecule analysis, single event analysis, and molecular behavior in rapid mixing. For the advanced technologies, fundamental chemistry such as chemical reaction and phase transfer in a confined space should be revealed in detail. We study unique advanced measurement tools such as microscopic imaging, laser microscopy, and electron spin resonance (ESR) spectroscopy.

【代表論文】

- 1) M. Fukuyama, M. Tokeshi, M.A. Proskurnin, A. Hibara, "Dynamic wettability of polyethylene glycol-modified poly(dimethylsiloxane) surfaces in an aqueous/organic two-phase system", *Lab on a Chip*, **18**, 356-361 (2018).
- 2) M. Chung, C. Pigot, S. Volz, A. Hibara, "Optical Surface Tension Measurement of Two-Dimensionally Confined Liquid Surfaces", *Analytical Chemistry*, **89**, 8092-8096 (2017).
- 3) M. Fukuyama, A. Hibara, "Microfluidic Selective Concentration of Microdroplet Contents by Spontaneous Emulsification", *Analytical Chemistry*, **87**, 3562-3565 (2015)
- 4) C. Pigot, A. Hibara, "Surface Tension Measurement at the Microscale by Passive Resonance of Capillary Waves", *Analytical Chemistry*, **84**, 2557-2561 (2012).
- 5) J. Abe, S. Ueki, T. Arata, S. Nakazawa, S. Yamauchi, Y. Ohba, "Improved Sensitivity by Isotopic Substitution in Distance Measurements Based on Double Quantum Coherence EPR", *Applied Magnetic Resonance*, **42**, 473-485 (2012).
- 6) Y. Ohba, S. Nakazawa, S. Kazama and Y. Mizuta, "A new pulse width reduction technique for pulsed electron paramagnetic resonance", *Journal of Magnetic Resonance*, **191**, 1-6 (2008).

分野連絡先 火原 彰秀 (Akihide HIBARA) hibara@tohoku.ac.jp
Tel: 022-217-5616, FAX: 022-217-5616
<http://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/hibara/>

走査プローブ計測技術研究分野

(先端計測開発センター)

(Advanced Scanning Probe Microscopy)

教授 米田 忠弘

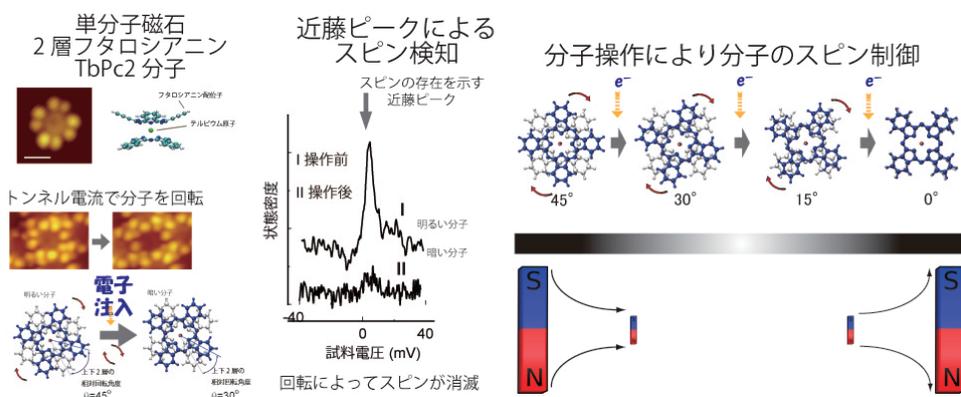
講師 高岡 毅

助教 道祖尾恭之



【研究概要】 次世代の産業を担うと期待されるナノテクノロジーの基礎的な研究を行っている。ターゲットとして環境科学から次世代電子素材まで広くカバーする。ナノ領域での化学分析や分子の表面上での動的過程を明らかにすることで新しい物性や反応を探索しようとする。主に走査型トンネル顕微鏡 (STM) を手法として用いているが、分子を直接観察し、単一分子レベルの操作および分析技術を駆使して次のようなテーマに取り組んでいる。

1. スピンを利用した新しい電子材料としての有機・生体分子探索
2. 環境科学の基礎となる触媒反応の基礎的機構解明
3. ナノ領域での化学反応素過程の研究。
4. 単一分子単位での究極の化学分析手法の開発



【Research】 Nanotechnology has attracted wide attentions and a variety of approaches have been proposed. They cover wide area including environmental catalytic material and post-Si electric materials. Scanning tunneling microscope (STM) is expected to be the most powerful tool for such researches. STM is not a simple microscope to give atomic resolution but is a tool to manipulate an isolated molecule like an atomic scale tweezers. Our study on the molecule dynamics using this tweezers includes single molecule reaction through the excitation of internal vibrational modes, and measuring vibrational spectroscopy of a single molecule by the analysis of tunneling electrons..

【代表論文】

- 1) J. Liu, H. Isshiki, K. Katoh, T. Morita, B. K. Breedlove, M. Yamashita, T. First Observation of a Kondo Resonance for a Stable Neutral Pure Organic Radical, 1,3,5-Triphenyl-6-oxoverdazyl, Adsorbed on the Au(111) Surface *Journal of the American Chemical Society*, 135, 651-658 (2013.12)
- 2) T. Komeda, H. Isshiki, J. Liu, K. Katoh, M. Shirakata, B. K. Breedlove, M. Yamashita, Variation of Kondo Peak Observed in the Assembly of Heteroleptic 2,3-Naphthalocyaninato Phthalocyaninato Tb(III) Double-Decker Complex on Au(111), *ACS Nano* 7 (2013.1) 1092-1099.
- 3) Roberto Robles, Nicolas Lorente, Hironari Isshiki, Jie Liu, Keiichi Katoh, Brian K. Breedlove, Masahiro Yamashita, Tadahiro Komeda, Spin Doping of Individual Molecules by Using Single-Atom Manipulation, *Nano Letters* 12, (2012.5)
- 4) T. Komeda, H. Isshiki, J. Liu, Y.-F. Zhang, N. Lorente, K. Katoh, B. K. Breedlove, M. Yamashita, Observation and electric current control of a local spin in a single-molecule magnet, *Nat Commun* 2 (2011.3) 217.

分野連絡先 米田忠弘 (Tadahiro Komeda)

Tel: 022-217-5368 FAX: 022-217-5371 komeda@tagen.tohoku.ac.jp

<http://cf-d-rism-imram.tagen.tohoku.ac.jp/~sfc/index-j.html>

電子分子動力学分野

(Electron and Molecular Dynamics Lab.)

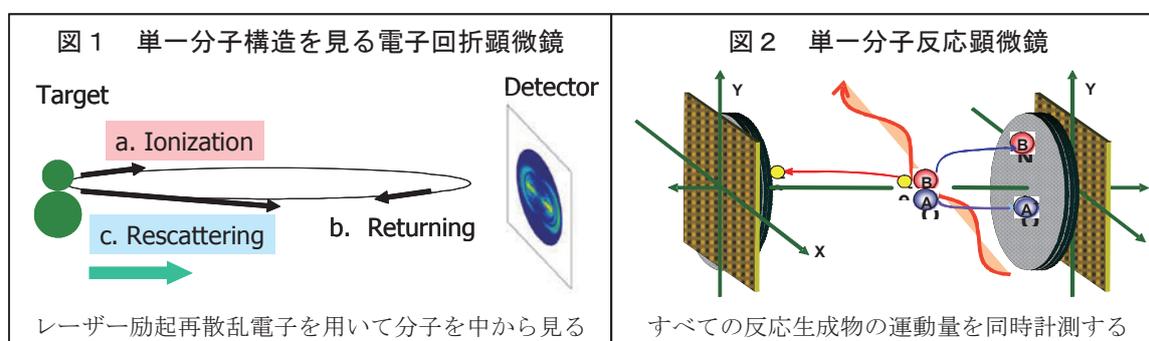
教授 上田 潔

助教 奥西 みさき

助教 福澤 宏宣



[研究概要] 分子やクラスターにおける量子過程は粒子が波としての性質を持つことに由来する量子干渉により古典過程と異なった振舞いを示します¹⁾。このような微小世界では量子干渉を制するものが世界を制するといっても過言ではありません。私たちの研究室では、分子やクラスターにおける電子緩和・電子移動・解離・原子再配列といった**超高速反応を決定付ける量子過程を解析し、制御すること**を目指しています。**単一分子の量子過程を見るために**、私たちは独自の**最先端計測技術**を開発し、研究に供しています。図1・2はその一例です。また、量子過程を引き起こしたり、画像化したり、制御したりするために、超短パルスレーザー²⁾、世界最高分解能軟X線放射光³⁾、X線自由電子レーザー⁴⁾等の**最先端光源**を駆使して、研究を進めています。



[Research] Quantum interference based on wave nature of matters makes quantum processes completely different from classical processes.¹⁾ **We analyze and control quantum processes that determine electron and nuclear dynamics** such as electronic relaxation, charge transfer, fragmentation, and rearrangement in molecules and clusters. For that purpose, we have been developing cutting-edge spectroscopic techniques. To trigger, probe, and control the processes, we use new-generation light sources such as ultrafast laser pulses,²⁾ ultrahigh resolution soft x-ray synchrotron radiation,³⁾ and X-ray free-electron lasers⁴⁾ that have just been constructed in Japan and USA.

【代表論文】

- 1) K. Ueda, To be or not to be localized, *Science* **320**, 884 (2008); K. Ueda, To catch and smash charge on the hop, *Science* **13**, 740-741 (2015); K. C. Prince *et al.*, Coherent control with a short-wavelength free-electron laser, *Nature Photonics* **10**, 176-179 (2016).
- 2) M. Okunishi *et al.*, Extracting electron-ion differential scattering cross sections for partially aligned molecules by laser-induced rescattering photoelectron spectroscopy, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 053001 (2011).
- 3) K. Ueda, High resolution inner-shell spectroscopies of free atoms and molecules using soft X-ray beam lines at the third generation synchrotron radiation sources, *J. Phys. B* **36**, R1-R47 (invited review article) (2003); M. Kimura *et al.*, Controlling low-energy electron emission via resonant-Auger-induced interatomic Coulombic decay, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 1838-1842 (2013); Xiao-Jing Liu *et al.*, Einstein-Bohr recoiling double-slit gedanken experiment performed at the molecular level, *Nature Photonics* **9**, 120-125 (2015).
- 4) H. Fukuzawa *et al.*, Deep inner-shell multiphoton ionization by intense x-ray free-electron laser pulses, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 173005 (2013); T. Tachibana *et al.*, Nanoplasma Formation by High Intensity Hard X-rays, *Sci. Rep.* **5**, 10977 (2015); K. Motomura *et al.*, Charge and Nuclear Dynamics Induced by Deep Inner-Shell Multiphoton Ionization of CHC3I Molecules by Intense X-ray Free-Electron Laser Pulses, *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 2944-2949 (2015).

分野連絡先 上田 潔 (Kiyoshi Ueda)
ueda@tagen.tohoku.ac.jp
Tel: 022-217-5381 FAX: 022-217-5380
<http://www.tagen.tohoku.ac.jp/labo/ueda/index-j.html>

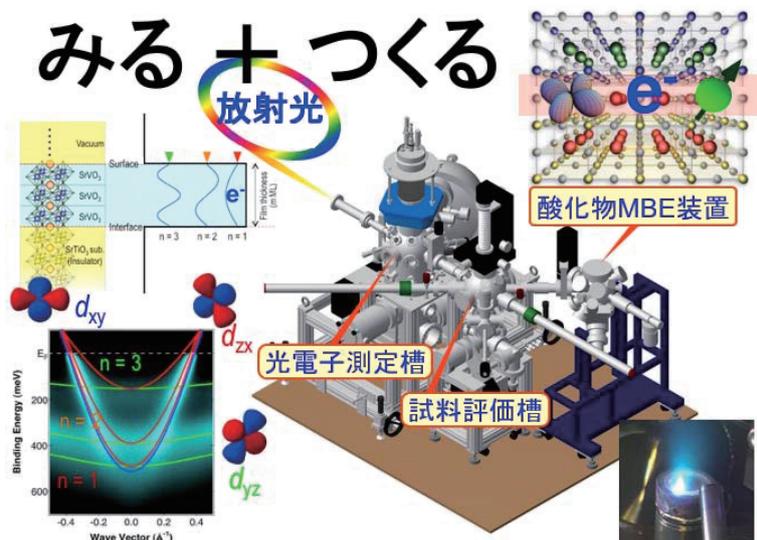
ナノ機能物性化学研究室
(Nano Physical Chemistry)

教授 組頭 広志



【研究概要】 当研究室では、「酸化物ナノ構造の合成と新奇物性の創出」に関する研究を行っています。酸化物の中には、高温超伝導や光触媒などの驚くべき機能物性を示すものがあり、これらをナノ構造化することにより、さらなる多機能性や新奇な機能物性の創成が期待されます。そのために、酸化物分子線エピタキシー（MBE）という酸化物ナノ構造を原子レベルで制御しながら「つくる」技術と、放射光を用いた先端計測というナノスケールでの化学・電子状態を「みる」技術とを

高いレベルで融合することにより、酸化物の類い希な物性を設計・制御しながら新しい機能性ナノ物質の開拓を推進しています。さらには、酸化物ナノ構造を基盤として、有機物質や原子層物質などとのヘテロ構造を設計・合成することで、次世代エレクトロニクスに向けた新機能の創成を目指しています。



【Research】 The target of our laboratory is to create novel functionalities by synthesizing oxide nanostructures and heterostructures between oxides and other materials. For this purpose, we are controlling and designing the nanoscale phenomena appearing in the oxide nanostructures by the best possible combination of the sophisticated oxide growth techniques using molecular beam epitaxy and advanced analysis techniques using synchrotron radiation.

【代表論文】

- (1) M. Kobayashi *et al.*, Emergence of Quantum Critical Behavior in Metallic Quantum-Well States of Strongly Correlated Oxides, *Scientific Report* **7**, 16621 (2017).
- (2) M. Kitamura *et al.*, Spatial distribution of transferred charges across the heterointerface between perovskite transition metal oxides LaNiO₃ and LaMnO₃, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 111603 (2016).
- (2) K. Horiba *et al.*, Isotropic Kink and Quasiparticle Excitations in the Three-Dimensional Perovskite Manganite La_{0.6}Sr_{0.4}MnO₃, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 076401 (2016).
- (3) M. Kobayashi *et al.*, Origin of the Anomalous Mass Renormalization in Metallic Quantum Well States of Strongly Correlated Oxide SrVO₃, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 076801 (2015).
- (4) K. Yoshimatsu *et al.*, Metallic Quantum Well States in Artificial Structures of Strongly Correlated Oxide, *Science* **333**, 319-322 (2011).

連絡先 組頭 広志 (Hiroshi KUMIGASHIRA)
Tel: 022-217-5802
<http://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/kumigashira/>

生命機能分子合成化学分野

(Synthetic Chemistry for Biofunctional Molecules)

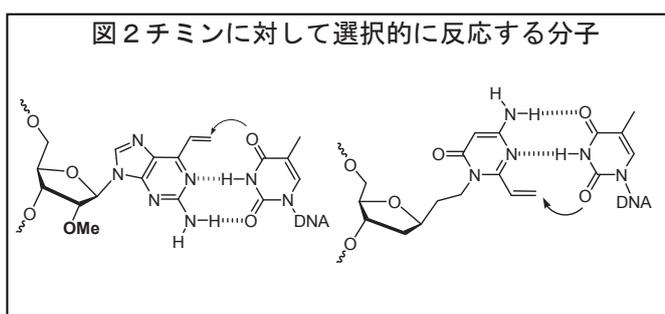
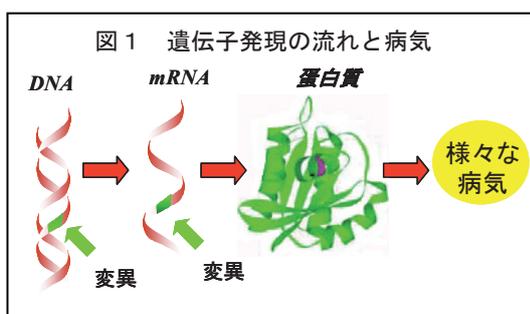
教授 永次 史

助教 鬼塚和光

特任助教 村瀬裕貴



【研究概要】「生命の設計図」に例えられる遺伝子は、たったひとつの細胞から生命をスタートさせ生命活動を維持していくために必要な情報がすべて記録されています。生体内において遺伝子の情報は様々な調節をうけることで、非常に精密にコントロールされ、種々の機能を持つ蛋白質が合成されます。これらの遺伝子の情報が少しでもおかしくなると、合成される蛋白質の性質が変化したり、合成される蛋白質の量が変化することで、様々な病気の原因になることが知られています（図1）。私たちの研究室では、おかしくなった遺伝子だけを選択的に**化学的に制御できる新規の機能性分子**の開発をめざし、計算科学的手法などを用いて**分子設計を行いこれらの分子の合成**を行っています（図2はその一例）。さらに合成した分子機能の評価は様々な物理化学的手法のみならず、細胞内での評価も行い、実際に生体内で遺伝子発現調節に働く新しい手法を目指して、研究を展開しています。



【Research】 Our research activities have focused on the creation of functional molecules that exhibit specific recognition and reaction to the DNA and RNA. The functional oligonucleotides incorporating such an intelligent agent would enable chemical modulation of gene expression with high sequence-selectivity at a single nucleoside level. Recent progress in our group includes achievement of highly efficient cross-linking reaction with specificity toward thymine at the target site. We have applied the new cross-linking agent to antisense inhibition of gene expression in cell.

【代表論文】

- 1) Onizuka, K., Chikuni, T., Amemiya, T., Miyashita, T., Onizuka, K., Abe, H. and Nagatsugi, F. Pseudorotaxane formation via the slippage process with chemically cyclized oligonucleotides. *Nucl. Acids Res.*, **45**, 5036-5047 (2017)
- 2) Yamada, K., Ishiyama, S., Onizuka, K., Nagatsugi, F., Synthesis and properties of cross-linkable DNA duplex using 4-amino-2-oxo-6-vinyl-1,3,5-triazine, *Tetrahedron*, **73**, 1424-1435 (2017) **Cover picture**
- 3) Sato, N., Tsuji, G., Sasaki, Y., Usami, A., Moki, T., Onizuka, K., Yamada, K. and Nagatsugi, F., A New Strategy for Site-Specific Alkylation of DNA using Oligonucleotides Containing an Abasic site and Alkylating Probes, *Chem. Commun.*, **51**, 14885 (2015).
- 4) Kusano, S.; Ishiyama, S.; Lam, S. L.; Mashima, T.; Katahira, M.; Miyamoto, K.; Aida, M.; Nagatsugi, F. Crosslinking Reactions of 4-Amino-6-oxo-2-vinylpyrimidine with Guanine Derivatives and Structural Analysis of the Adducts, *Nucl. Acids Res.* **43**, 7717 (2015)

分野連絡先 永次 史 (Fumi Nagatsugi), nagatugi@tohoku.ac.jp

Tel: 022-217-5633 FAX: 022-217-5633

<http://www.tagen.tohoku.ac.jp/labo/nagatsugi/index.html>

有機ハイブリッドナノ結晶材料分野
(高分子・ハイブリッド材料研究センター)

(Hybridized Organic Nanocrystal Materials)

教授 及川 英俊
 助教 小野寺 恒信



【研究概要】「次世代フォトニック材料を目指した有機系ハイブリッドナノ結晶材料の創成」

π -共役系有機・高分子物質と無機系物質（金属・半導体など）とのハイブリッド材料には、サイズ・内部構造や構成要素に依存した特異な光・電子物性や反応性、新規機能が期待される。当研究室では、次世代フォトニクス材料を目指した様々なタイプのコア-シェル型ハイブリッドナノ結晶材料の創成とその集積化ナノ構造体構築のために、有機・高分子ナノ結晶粒子作製法の開発、有機-無機ヘテロナノ界面の設計・構築、集積・階層化手法の確立、光・電子物性機能の評価を中心に研究展開している。例えば、「光触媒還元法」による共役高分子コア-金属シェル型ハイブリッドナノ結晶の作製(図. 1)、パターン基板上での高分子ナノ粒子の精密配列制御(図. 2)、半導体ナノ粒子や共役系有機・高分子ナノ結晶をコアしたカプセル化とその配列制御(図. 3)などが最近の成果である。また、図. 2 の成果を用いた逆オパール構造の構築と光伝搬特性評価、さらに、電荷移動錯体のナノ結晶化とその光学特性制御にも精力的に取り組んでいる。

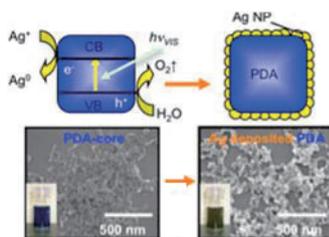


図. 1 光触媒還元法：共役系高分子-金属ハイブリッドナノ結晶

→ 有機非線形光学材料

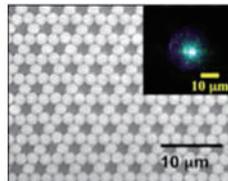


図. 2 パターン基板上での配列制御された高分子ナノ粒子のカゴメ構造による光伝搬閉じ込め効果

→ 光導波路用素子材料

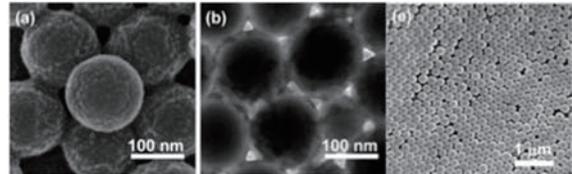


図. 3 ポリスチレンのソープフリー乳化重合によりカプセル化されたジアリールエテン（フォトクロミック物質）ナノ結晶のSEM (a) およびTEM (b) 像と基板上での集積ナノ構造体 (c)

→ 光波制御用素子材料、光スイッチング

【Research】“Organic and Polymer Hybridized Nanocrystals for Photonic Materials”

Hybridization is one of the most important objectives in current nanoscience and nanotechnology. Especially, **core-shell type hybridized nanocrystals** (NCs), composed of π -conjugated polymer NCs and noble metals, may exhibit peculiar properties through optoelectronic interaction at the core-shell interface. Aiming at the building-up of **novel direct-assembled nanostructure for photonic materials**, we have recently succeeded in fabricating polydiacetylene (PDA) - noble metal hybridized NCs. The ordered array structure of polymer nanoparticles (NPs), and encapsulated semiconductor NPs and PDA NCs on a regularly patterned substrate are now in progress for the purpose of developing their optical properties and photonic function. Developments to fabricate an inverse opal and/or random porous structures of polymer thin films, and CT-complex NCs so as to control optical properties are also in progress.

【代表論文】

- 1) N. Sakamoto, T. Onodera, T. Dezawa, Y. Shibata, and H. Oikawa, “Highly Enhanced Emission of Visible Light from Core-Dual Shell Type Hybridized Nanoparticles”, *Part. Part. Syst. Charact.*, **34**, 1700258 1–5 (2017).
- 2) A. Miura, T. Onodera, H. Kasai, T. Imaoka, K. Yamamoto, and H. Oikawa, “Fabrication of Gold Clusters Photoreduced in Gold-Dendrimer Complex Nanoparticles”, *Opt. Mater. Exp.*, **7**, 2224–2229 (2017).
- 3) Y. Iimori, T. Onodera, H. Kasai, M. Mitsuishi, T. Miyashita, and H. Oikawa, “Fabrication of Pseudo Single Crystalline Thin Films Composed of Polydiacetylene Nanofibers and Their Optical Properties”, *Opt. Mater. Exp.*, **7**, 2218–2223 (2017).
- 4) J. Su, T. Fukaminato, J.-P. Placial, T. Onodera, R. Suzuki, H. Oikawa, A. Brosseau, F. Brisset, R. Pansu, K. Nakatani, R. Métivier, “Giant Amplification of Photoswitching by a Few Photons in Fluorescent Photochromic Organic Nanoparticles”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **55**, 3662–3666 (2016).
- 5) R. Suzuki, T. Onodera, H. Kasai, and H. Oikawa, “Nanocrystallization of Insoluble Copper(I) Complex and Formation Mechanism”, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **621**, 150–155 (2015).
- 6) R. Suzuki, T. Onodera, H. Kasai, and H. Oikawa, “Fabrication of Fluorescent Copper Complex Nanoparticles Using the Heterogeneous Reaction Process”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **53**, 06JH03-1-4 (2014).

分野連絡先 及川 英俊 (Hidetoshi OIKAWA) oikawah@tagen.tohoku.ac.jp
 Tel: 022-217-6357, FAX: 022-217-5645
<http://db.tagen.tohoku.ac.jp/php/forweb/outline.php?lang=ja&no=2045>

生命機能制御物質化学研究分野
(Laboratory for Nanobio Functional
Materials/Chemical Biology & Supramolecular
Asymmetric Photochirogenesis)

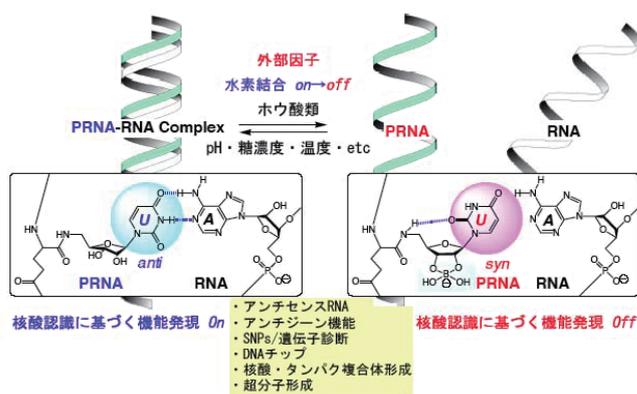
教授 和田健彦
 准教授 荒木保幸
 助教 西嶋政樹



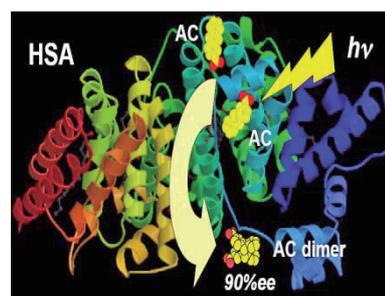
【研究概要】 当研究室では、DNA や RNA などの核酸、そしてタンパク質など生体高分子の、**次世代インテリジェント型ナノバイオ機能材料**への応用を目指し研究を行っています。

ナノバイオ分子において、その優れた機能の *on-off* 制御は、実用化に向け重要な課題であり、我々は外部刺激に応答して**機能発現の *on-off* 制御**が可能な人工核酸の創成に取り組んでいます。さらに、がん細胞や脳梗塞周辺細胞などに特有の細胞内環境に**応答し、正常細胞には副作用を発現せず、がん細胞のみで薬効を発現する、ハイポキシア細胞特異的核酸医薬の開発**や、制限酵素や DNA 組換え酵素の外部刺激による自在な機能制御の実現に向け研究を行っています。

また、タンパク質や二重鎖 DNA など**生体高分子**を不斉光反応の**キラル反応場、ナノバイオリアクター**として活用し、基底状態・励起状態相互作用解明を通じ高効率反応の達成に取り組む、新しい方法論の提案を目指した研究展開や、世界最高の高感度・高時間分解能を有する**新規円二色性 (CD) 測定装置**開発と本装置を活用した有機分子の励起状態特性ならびにその動的特性解明にも取り組んでいます。



ナノバイオ分子機能の *on-off* 制御



ナノバイオキラルリアクター

【Research】 Focusing our research interest mostly on the recognition and complexation behavior control of biopolymers, such as DNA/RNA, proteins, and so on. Another topics are photochemical asymmetric reaction control based on molecular recognition phenomena in both ground and electronically excited states, we are pursuing mechanistic and synthetic studies on Supramolecular Asymmetric Photochirogenesis with biopolymers as chiral reaction medias.

【代表論文】

- 1) Selective and Robust Stabilization of Triplex DNA Structures Using Cationic Comb-type Copolymers, *J. Phys. Chem. B*, **121**, 4015 (2017).
- 2) Regioselective Molecularly Imprinted Reaction for [4 + 4] Photocyclodimerization of 2-Anthracenecarboxylic Acid *Langmuir*, **33**, 2103 (2017).
- 3) Hetero-Selective DNA-Like Duplex Stabilized by Donor-Acceptor Interactions, *Chem. A Euro. J.*, **21**, 15974 (2015). *Front Cover*.
- 4) Mammalian serum albumins as a chiral mediator library for bio-supramolecular photochirogenesis: optimizing enantiodifferentiating photocyclodimerization of 2-anthracenecarboxylate, *Chem. Comm.*, **50**, 14055 (2014) *Front Cover*
- 5) Structural basis of a Ni acquisition cycle for [NiFe] hydrogenase by Ni-metallochaperone HypA and its enhancer, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **112**, 7701(2015).
- 6) Planar-to-Planar Chirality Transfer in the Excited State. Enantiodifferentiating Photoisomerization of Cyclooctenes Sensitized by Planar-Chiral Paracyclophane, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 10379 (2011).
- 7) Highly Enantiomeric Supramolecular [4 + 4] Photocyclodimerization of 2-Anthracenecarboxylate Mediated by Human Serum Albumin, *J. Am. Chem. Soc.*, **129**, 3478 (2007).

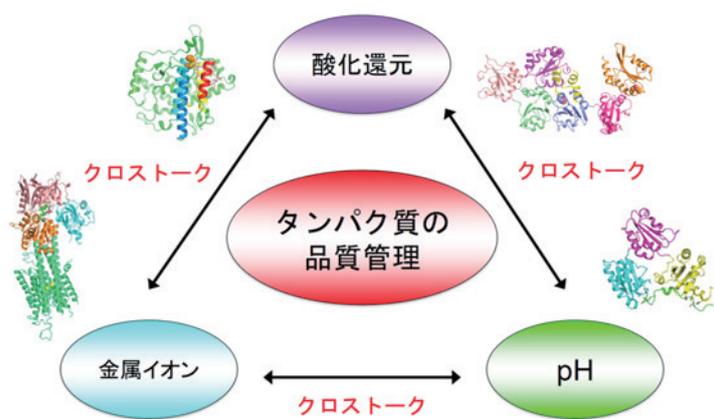
分野連絡先 教授名 : 和田健彦 (Takehiko WADA)
 Tel&FAX: 022-217-5608 ; E-Mail : hiko@tohoku.ac.jp
<http://www.tagen.tohoku.ac.jp/modules/laboratory/index.php?laboid=25>

生体分子構造研究分野 (Biomolecular Structure)

教授 稲葉謙次
准教授 門倉 広
助教 渡部 聡



【研究概要】 細胞内には、蛋白質が正しく立体構造を形成するための巧妙な仕組みが備わっている。我々は、細胞内のタンパク質恒常性維持に関わるレドックス、pH、金属イオン濃度制御機構に着眼し、構造生物学・生化学・プロテオミクス・細胞生物学的手法を駆使した研究を展開している。特に最近、ヒト細胞の分泌経路におけるタンパク質品質管理機構に焦点をあて、そのメカニズムの解明に大きな進展がみられた。本研究により、細胞内で蓄積するミスfoldタンパク質が引き起こす種々の病態の分子レベルでの成因解明にもつながると期待している。



【Research】 Cells have evolved elaborate systems to maintain the protein homeostasis, in which chemical parameters such as redox, pH and metal ion concentrations play critical roles. Employing structural, biochemical, proteomic and cell biological approaches, we aim at deep understanding of how these cellular systems operate to ensure the protein quality control in the early secretory pathway. This work will reveal molecular mechanisms underlying the protein and redox homeostasis in cells and provide molecular insights into neurodegenerative diseases caused by misfolded proteins.

【代表論文】

- 1) Watanabe, S., Harayama, M., Kanemura, S., Sitia, R. and Inaba, K.* Structural basis of pH-dependent client binding by ERp44, a key regulator of protein secretion at the ER-Golgi interface, *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A.* 114, 3224-3232 (2017)
- 2) Arai, K., Takei, T., Okumura, M., Watanabe, S., Amagai, Y., Asahina, Y., Moroder, L., Hojo, H.*, Inaba, K.* and Iwaoka, M.* "Preparation of selenoinsulin as a long-lasting insulin analog" *Angewandte Chemie* 56, 5522-5526 (2017)
- 3) Maegawa, K., Watanabe, S., Noi, K., Okumura, M., Amagai, Y., Inoue, M., Ushioda, R., Nagata, K., Ogura, T. and Inaba, K.* "The highly dynamic nature of ERdj5 is key to efficient elimination of aberrant protein oligomers through ER-associated degradation" *Structure* 6, 646-857 (2017)
- 4) Vavassori, S., Cortini, M., Masui, S., Sannino, S., Anelli, T., Caserta, I., Fagioli, C., Mossuto, M., Fornili, A., van Anken, E., Degano, M., Inaba, K. and Sitia, R. "A pH-Regulated Quality Control Cycle for Surveillance of Secretory Protein Assembly" *Mol. Cell* 50, 783-792 (2013)
- 5) Hagiwara, M., Maegawa, K., Suzuki, M., Ushioda, R., Araki, K., Matsumoto, Y., Hoseki, J., Nagata, K.* and Inaba, K.* Structural basis of an ERAD pathway mediated by the ER-resident disulfide reductase ERdj5. *Mol. Cell* 41, 432-444 (2011)
- 6) Inaba, K.*, Murakami, S., Suzuki, M., Nakagawa, A., Yamashita, E., Okada, K. and Ito, K.* Crystal structure of the DsbB-DsbA complex reveals a mechanism of disulfide bond generation. *Cell* 127, 789-801 (2006)

連絡先 稲葉 謙次 (Kenji INABA)
Tel: 022-217-5604 FAX: 022-217-5604
<http://www.bioreg.kyushu-u.ac.jp/labo/pgpc/>

生命分子ダイナミクス研究分野

(Laboratory of Biological and
Molecular Dynamics)

教授 高橋 聡

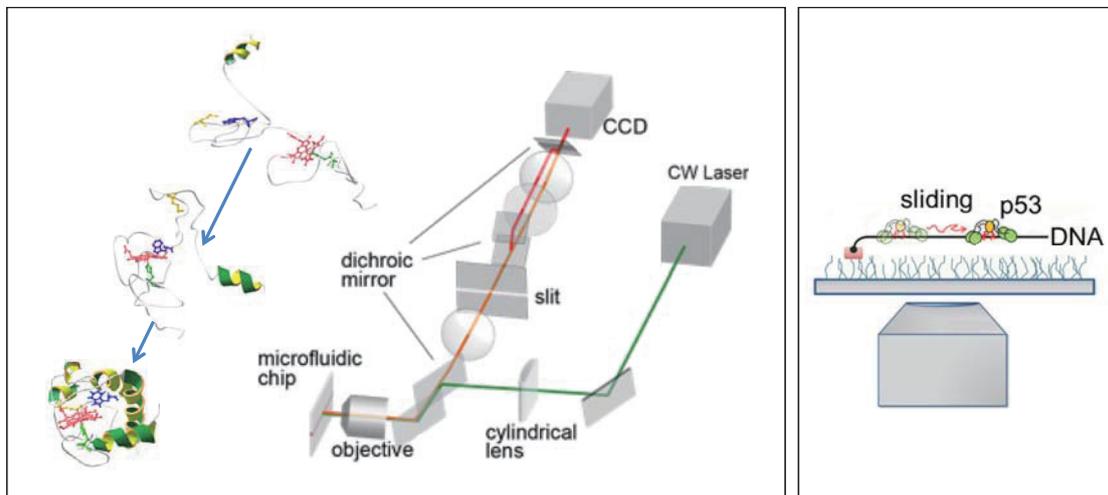
助教 鎌形 清人

助教 小井川浩之



【研究概要】 タンパク質は、生体におけるさまざまな機能を効率よく果たす万能の分子機械です。しかも、機能を発揮するために必要な構造に自発的に折り畳むという驚異的な特性を持っています。将来においてタンパク質を効果的に利用するためには、タンパク質が折り畳む特性や機能を発揮するダイナミクスを理解する必要があります。

当分野では、第一に、タンパク質が折り畳まれる過程を解明することを目指し、タンパク質を一分子レベルで観察する研究を展開しています（図左）。第二に、タンパク質をデザインする新しい方法の開発に取り組んでいます。第三に、発ガン抑制タンパク質である p53 が DNA 上を滑り標的配列に結合する過程の解明を目指した研究を行っています（図右）。



図：（左）タンパク質が折り畳まれる過程を観察するための一分子蛍光観察装置。（右）ガン抑制タンパク質 p53 の DNA 上における滑り運動。

【Research】 To understand the principles of protein folding and function, we observe the dynamic processes of protein folding and function based on single molecule fluorescence techniques. Furthermore, we are developing a new method of protein design based on single molecule observations.

【代表論文】

- 1) Igarashi C., Murata A., Itoh Y., Subekti D. R. G., Takahashi S., Kamagata K. “DNA garden: A simple method for producing arrays of stretchable DNA for single-molecule fluorescence imaging of DNA binding proteins” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **90**, 34-43 (2017).
- 2) Saito M., Kamonprasertsuk S., Suzuki S., Nanatani K., Oikawa H., Kushiro K., Takai M., Chen P.-T., Chen E. H.-L., Chen R. P.-Y., Takahashi S. “Significant Heterogeneity and Slow Dynamics of the Unfolded Ubiquitin Detected by Line Confocal Method of Single-Molecule Fluorescence Spectroscopy” *J. Phys. Chem. B.* **120**, 8818-8829 (2016).
- 3) Itoh Y., Murata A., Sakamoto S., Nanatani K., Wada T., Takahashi S., Kamagata K. “Activation of p53 Facilitates the Target Search in DNA by Enhancing the Target Recognition Probability”, *J. Mol. Biol.* **428**, 2916-2930 (2016).

分野連絡先：高橋 聡 (Satoshi Takahashi)
Tel: 022-217-5842

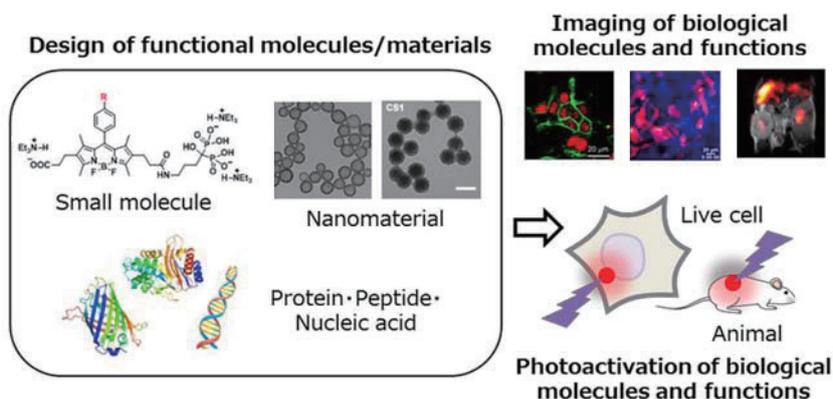
細胞機能分子化学研究分野
(Cell Functional Molecular Chemistry)

教授 水上 進
准教授 松井 敏高
助教 小和田俊行



【研究概要】「機能性分子創製を通して生命・疾患の機構解明に挑む」

生体内では多くの生体分子が相互作用することで、多様な機能を発現しています。生物を正確に理解するには、生体分子の挙動や機能を他の分子との相互作用が保たれた状態、すなわち生きた状態で調べることが重要です。当研究室では、有機化学・高分子化学・蛋白質化学等に基づいて新たな機能性分子を設計・合成し、生体機能の探索技術を開発しています。具体的には、酵素活性や細胞内シグナル伝達などの生体機能を選択的に可視化する蛍光プローブ、ケージド化合物／フォトクロミック化合物を用いた蛋白質活性の光制御技術などの開発に取り組んでいます。これらの機能性分子を最先端の光学顕微鏡技術と組み合わせることにより、生きた状態における生体分子の機能や疾患機構の本質に迫ります。



【Research】“Chemical Biology through Development of Functional Molecules”

In a living body and cell, various biomolecules function by interacting with other molecules. To understand the precise biological functions occurring within a living body or cell, it is important to investigate the activities or behaviors of the target molecules in living systems, where all of these interactions with other biomolecules are maintained. Using organic chemistry, macromolecular chemistry, and biochemistry, we design and synthesize functional molecules, apply them to image behaviors or activities of target biomolecules, and then regulate the functions of these targets by utilizing light. By combining these functional compounds with optical microscopy, we aim to clarify essential mechanisms in life and diseases.

【代表論文】

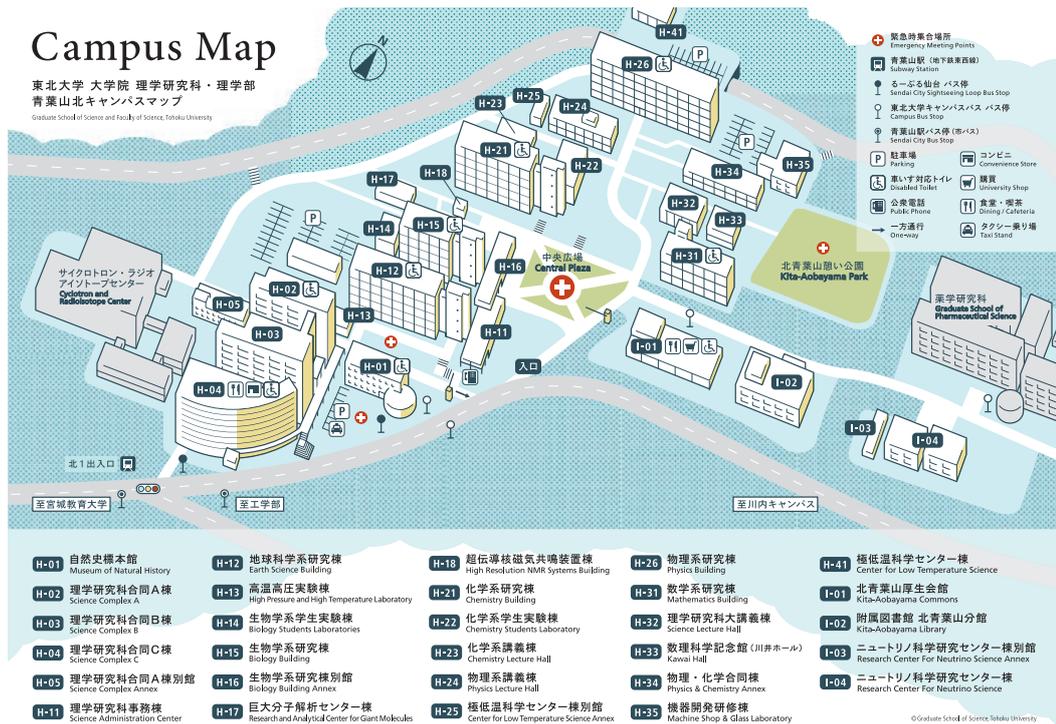
- 1) Y. Matsui, Y. Funato, H. Imamura, H. Miki, S. Mizukami, K. Kikuchi, “Visualization of Long-term Mg²⁺ Dynamics in Apoptotic Cells with a Novel Targetable Fluorescent Probe”, *Chem. Sci.*, **8**, 8255–8264 (2017).
- 2) H. Maeda, T. Kowada, J. Kikuta, M. Furuya, M. Shirazaki, S. Mizukami, M. Ishii, K. Kikuchi, “Real-time Intravital Imaging of pH Variation Associated with Osteoclast Activity”, *Nat. Chem. Biol.*, **12**, 579–585 (2016).
- 3) T. Nakamura, H. Matsushita, F. Sugihara, Y. Yoshioka, S. Mizukami, K. Kikuchi, “Activatable ¹⁹F MRI Nanoparticle Probes for the Detection of Reducing Environments”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **54**, 1007–1010 (2015).
- 4) S. Mizukami, Y. Hori, K. Kikuchi, “Small-Molecule Based Protein-Labeling Technology in Live Cell Studies: Probe-Design Concepts and Applications”, *Acc. Chem. Res.*, **47**, 247–256 (2014).

分野連絡先 水上 進 (Shin MIZUKAMI)
shin.mizukami@tohoku.ac.jp, Tel/Fax: 022-217-5116
<http://www2.tagen.tohoku.ac.jp/lab/mizukami/>

青葉山キャンパス(理学研究科)

Campus Map

東北大学 大学院 理学研究科・理学部
青葉山北キャンパスマップ
Graduate School of Science and Faculty of Science, Tohoku University

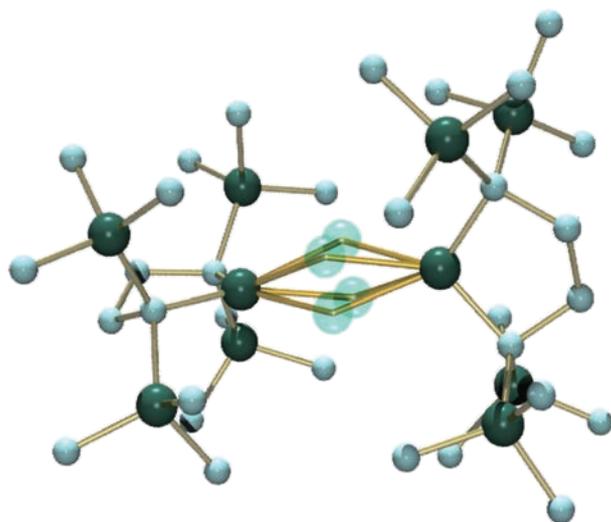


片平キャンパス



片平キャンパス内の、各研究所への詳細なアクセスは下記URLをご確認下さい

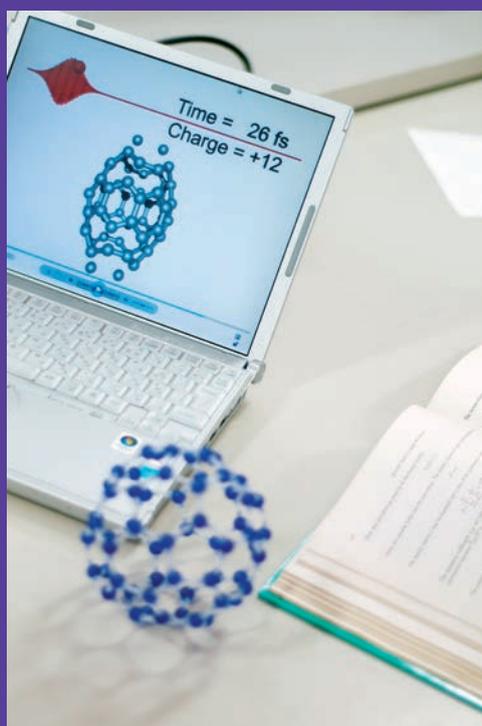
- ▶多元物質科学研究所 http://www.tagen.tohoku.ac.jp/modules/public/index.php?content_id=33
- ▶金属材料研究所 <http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/access.html>
- ▶材料科学高等研究所 <http://www.wpi-airm.tohoku.ac.jp/jp/about/access/>



東北大学大学院理学研究科化学専攻
「化学専攻案内2018」

編集
発行 東北大学大学院理学研究科化学専攻

〒980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉6番3号
TEL 022-795-6600/FAX 022-795-3681



<http://www.chem.tohoku.ac.jp/>