

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

◆ **化学専攻** ◆

化学専攻は、吉田北部キャンパスの化学教室を中心に、宇治キャンパスの化学研究所のほか病院地区のウイルス・再生医科学研、阪南地方の複合原子力科学研究所の研究室も加わって運営されている。化学の研究対象は、気・液・固相の物質すべてであり、金属単体や簡単な無機・有機化合物から複雑な生体関連分子まで多岐にわたる。研究の指向性も、物質の特性・挙動を微視的に解明する純粋に探求的な立場と、物質を活用しての社会貢献を目指す立場の両面を含んでいる。化学のこのような多様性・重層性に対応すべく、本専攻の研究・教育分野は、主に、理論・物理化学・環境化学、無機・物性化学、有機化学、生体関連化学の4研究領域からなる。特に、物質現象を原子・分子レベルで実験的にとらえて解明するだけでなく、理論的な概念やモデルに基づく定量的理解のためには量子力学や統計力学などの基本法則の習得が不可欠との認識から理論系研究室2つを有し、実験系研究室とのバランスを保っている。上記4領域の研究統合により、化学反応の完全な記述や任意分子の自在な合成法の確立など、基礎的で革新的な研究を進めるとともに、化学構造と物性の相関解明による新物質の構築や生命現象など高度に複雑な系への化学的基礎概念の拡張を計ることが、本専攻の研究目的であり、それに向かって邁進しうる研究者を育成するための大学院教育を行っている。

ホームページアドレス <http://www.kuchem.kyoto-u.ac.jp/>

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	教員名	研究内容	学生募集課程		
			修士課程	博士後期課程	
			2022年 10月入学	2023年 4月入学	
量子化学					
谷村 吉隆 金 賢得		溶液や生体分子等の凝縮系の化学物理理論の研究を行う。多体分子系の織り成す豊かな化学現象を、シミュレーションや実験事実を基礎として、系の本質に迫るモデルを構築し、経路積分法等の解析的手法、散逸系の動力学方程式の数値積分などの数値的手法を駆使することにより探求する。結果は非線形超高速分光等の最新の実験結果と比較する形で提示し、対象とした系の特徴的性質を実験観測量として議論する。理論の持つフットワークを生かし、有機物導体の電子物性や、生体分子やガラス系の相転移現象やダイナミクス等、既存の枠にとられない研究も行っていく。	×	×	※
理論化学					
林 重彦 倉重 佑輝 山本 武志 西本 佳央		顕著な物質・エネルギー変換を可能にする生体酵素分子や金属分子触媒・機能性分子材料などの分子機能は、分子の物質的振る舞いを規定する物理を基盤とした考察により理論的に理解され得る。しかしながら、そのような顕著な分子機能は、凝縮系内に緻密に織り込まれた多様な分子相互作用による化学反応場や分子ダイナミクスの制御、更に複雑に凝縮退いた量子電子状態が与える高い反応性などにより達成されており、その非常に複雑さの背後に潜む物理を理論的に解き明かし、それに基づく新規な分子機能の理論設計を行うことは挑戦的な課題である。 本分科では、電子状態理論に基づく化学反応理論に複雑な凝縮系の反応場と分子ダイナミクスの分子統計論を接続する理論手法、及び複雑な強相関電子状態に対する密度行列繰込み群を用いた理論手法やプロパティ計算手法の開発に基づき、飛躍的な性能向上を続けるコンピュータ(量子コンピュータを含む)を用いた計算化学的アプローチにより、顕著な分子機能のメカニズムの理論的解明及び新規分子機能の理論設計を行っている。 具体的には、以下の研究を行っている。 (1) タンパク質や溶液中における化学反応機構解析のための量子化学・分子ダイナミクスハイブリッド法の開発 (2) 複雑電子系のための密度行列繰込み群を基盤とする新たな波動関数理論の開発 (3) 分子モーター、光受容タンパク質、金属タンパク質、膜輸送体タンパク質などの酵素反応性と機能的タンパク質構造変化の分子機構の解明と新規機能特性を有する変異体の理論設計 (4) 自己組織化分子の形成過程と分子機能 (5) 多核金属錯体の触媒機能や光励起状態を介したエネルギー変換など複雑電子系の分子機能 (6) 解析的エネルギー微分に関連した理論開発	○	○	※
分子分光学					
渡邊 一也 長塚 直樹		光が引き起こす様々な非熱的過程は、エネルギー変換や物質変換の根幹に関わる素過程であり、その微視的理解は重要である。本研究室では、分子を構成単位とする物質と電磁波との相互作用に基礎をおく分子分光学の立場から、物質の静的な側面のみではなく、むしろその動的な側面を対象とした実験研究を行う。触媒反応や光電変換の舞台であり、学術的にも重要な、固体表面や異種物質間の界面を対象に、分子の吸脱着、界面電子・エネルギー移動、表面化学反応など、特に光により誘起される動的過程に着目した学理構築を目指す。フェムトからミリ秒に至る広い時間領域での時間分解分光を用いて、非平衡過程において機能発現の鍵を握る素過程の理解を目指す。超高真空下の良く規定された表面から、大気圧に近い環境下まで幅広い条件下のもと、通常の振動分光に加えて、様々な光非線形分光(第2高調波発生、和周波発生分光など)を駆使し、界面を含む凝縮層における微視的構造と電子・振動ダイナミクスの相関を明らかにする。 主な研究課題は次の通り。 1. 固体表面上での原子核ダイナミクス 2. 光触媒反応機構の解明 3. 有機半導体表面・界面における分子構造と電子励起状態ダイナミクス 4. 表面・界面における水の構造とダイナミクス 5. 新規表面分光法の開拓	○	○	※

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	研究内容	学生募集課程		
		修士課程	博士後期課程	
教員名		2022年 10月入学	2023年 4月入学	
物理化学				
鈴木 俊法 足立 俊輔 Stephan Thuermer 山本 遥一	<p>化学反応は電子状態によって駆動されるため、反応に関与する電子状態のエネルギーと高速な変化、溶媒効果を理解することは化学反応論の中心課題である。当分科では、電子状態の高速な変化(非断熱遷移)や構造変化のリアルタイムな追跡によって、気相・液相の化学反応の詳細を解明する分光学的研究を進めている。気相と液相を比較することで、分子間相互作用の本質的な役割を抽出する。特に、水は生体細胞の70%を占めると共に、地球表面の70%を占める海洋として重要である他、水素結合、極性、電子・プロトン・水素原子移動の担い手となる難解な溶媒として挑戦しがいがある。集中的な研究を行い、光化学、放射線化学、環境化学などの広範な化学分野に波及する研究を進めている。化学反応を、励起電子状態、基底電子状態、生成物の種類によらず万能に観測するために、あらゆる原子分子をイオン化することのできる極端紫外光(>21 eV)を用いて、10フェムト秒の時間分解能で反応を追跡する。液相の超高速光電子分光では、常温の溶液を真空中に導入して気液界面の観測を行うが、その感度を飛躍的に増大させるマイクロフルイディクスデバイスの開発と応用、Yb高繰り返しレーザー、試料から発生する全光電子を捕集観測する光電子分光装置、テーブルトップの高次高調波光源の開発を進め、これらを駆使した実験研究を開拓している。また、実験結果の解釈においては、高精度な量子化学計算と非断熱熱力学計算との比較検証を行う。</p> <p>主な研究テーマ</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) 溶媒和電子の構造と非断熱反応 2) 核酸塩基を中心とする有機分子の非断熱光化学反応と溶媒効果 3) 気液界面の非断熱化学反応 4) 溶質の存在による溶媒構造の電子状態変化 5) マイクロフルイディクスと結合した超高速光電子分光 6) 軟X線領域・紫外・可視・赤外の超高速過渡吸収分光 	○	○	※
光物理化学				
寺嶋 正秀 熊崎 茂一 中曽根祐介	<p>【修士課程】レーザー分光法やレーザー顕微鏡により分子や分子集合体の構造、動的性質、反応性および分子間相互作用を研究する。具体的には以下のテーマで研究を行う。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ロドプシンや植物の光センサーなど様々なセンサータンパク質において、蛋白質の働きと反応ダイナミクスの間には重要な関係がある。こうした機能が生まれる分子論的メカニズムを探るため、タンパク質のエネルギー変化と構造ダイナミクスを時間分解レーザー分光法を用いて調べ、反応と機能との関係を明らかにする。また、変性したタンパク質が天然構造をとるまでの折りたたみ過程を、新しい手法を駆使して明らかにするなど、タンパク質の機能に関した性質を明らかにする。 ・光合成の初期過程に関わる色素タンパク複合体が示す光化学初期過程（電子移動やエネルギー移動）を吸収や蛍光の時間分解分光法で調べる。また、葉緑体やシアノバクテリア内の光合成膜（チラコイド膜）の吸収や蛍光のスペクトルが示す環境応答ダイナミクスを顕微分光法により解明する。同時に時間分解分光法や顕微分光法の改良を行う。 <p>【博士後期課程】レーザー分光法を用いて、分子の構造、動的性質、反応性、および分子間相互作用を研究する。</p> <p>具体的には以下のテーマで研究を行う。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・生体タンパク質のエネルギーと構造ダイナミクスを明らかにする新しい時間分解レーザー分光法を開発する。 ・タンパク質の折りたたみ反応、あるいは蛋白-蛋白相互作用を時間分解で検出し、その分子論的機構を研究する。 ・揺らぎを含めた動的性質を明らかにし、生体タンパク質の機能を発現するメカニズムを分子科学的に解明する。 ・単一分子検出法、レーザー顕微分光法の装置を開発・応用して、細胞内分子集合・反応活性変化を研究する。 	○	○	※
分子構造化学				
武田 和行 野田 泰斗	<p>固体NMRを用いて化学の諸問題を解く研究を行う。周期表上のさまざまな同位体の原子核スピンをプローブに用いて、NMR実験を行う。特に、化学的・生物学的に重要ではあるが他の手法では情報の取得が困難な粉末や非晶物質をターゲットとして、構造やダイナミクスを解析して物性・機能の発現機構を解明する。また、方法論の研究を行うために、量子力学に基づく原子核スピンのダイナミクスを深く学ぶ。核スピンを操作してNMR信号に構造情報を反映させる実験シーケンスを考案して、数値シミュレーションや実験により手法の有効性を検証する。さらに、新規アイデアを実験的に実現するための装置開発に関する研究を行う。こうして我々にしか出来ない、独自のNMR分析を実現させる。現在行っている具体的な研究例は次の通り。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・固体界面における構造・化学交換の解析 ・多量子NMRによる原子クラスターの解析 ・核スピン-共振器結合に関する研究 ・オプトメカニクスを利用したNMR信号の光変換 ・核四極子共鳴におけるスピン間の相関 	○	○	※
久保 厚	<p>ゲージ最適化法の研究。量子力学的電流密度を保存則に着目し分子の波動関数を精度良く計算する方法を研究する。</p>			

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	教員名	研究内容	学生募集課程		
			修士課程	博士後期課程	
			2022年 10月入学	2023年 4月入学	
金相学					
吉村 一良 # 植田 浩明 道岡 千城	<p>【修士課程】ここ数十年の間に多くの科学技術はわれわれの予想を遙かに超えて進歩している。それを支えているのは新規な物質 (Material) の開発であり物質化学 (Material Chemistry) の研究無くして現代のような科学技術の発展はありえない。金相学分科 (Solid State Chemistry & Physics Laboratory) では、金属元素を含む無機化合物を対象とし、化学的な見地から、高温超伝導など新たな量子現象を示す新物質を探索、開発することを目標にしている。特に21世紀の材料を担うと期待される強い電子相関をもった系や低次元電子系・フラストレートスピンの系を中心に研究を行っている。新しい合成法の開発も積極的に進めるほか、核磁気共鳴法 (NMR) 等を駆使してミクロな視点から電子物性を理解する。以下に研究課題を列挙する。</p> <p>a) 新しい (高温) 超伝導体や異方的超伝導体、遍歴電子磁性体の探索・合成と物性 b) フラストレーション系低次元系磁性体や量子スピン系化合物の合成と物性 (例: 磁化プラトーやスピングャップ、マグネシウムのボーズ凝縮現象) c) 希土類金属間化合物における価数揺動、高濃度近藤効果、重いフェルミオン状態 d) 新合成手法の開発、それによる新無機化合物の合成と物性</p> <p>【博士後期課程】金相学分科では、金属元素を含む無機化合物を対象とし、相平衡、結晶構造、物性などの研究を主として行なう。新しい構造・新しい性質をもった物質の探索・設計が化学者に課せられた大きな課題であるが、それを達成するには、対象とする物質の相関係を明らかにし、化学的によく性格づけられた物質について、物性を測定するということが基本となる。本分科では、現在、強い電子相関をもった系や遍歴電子系、量子スピン効果、フラストレート効果を有するスピン系を中心に研究を行っている。以下に研究課題を列挙する。</p> <p>a) 高温超伝導、大きなスピン揺らぎの効果、遍歴電子磁性、金属-絶縁体転移などの興味ある物性を示す銅、コバルト、鉄、マンガン、クロム、バナジウム、チタンなどの3d遷移金属酸化物・化合物、ならびにRu、Rh、Re、Irなどの4d、5d遷移金属酸化物・化合物。 b) 混合原子価状態、価数揺動、高濃度近藤効果、重いフェルミオン状態などの興味ある電気的・磁気的性質を示すCeやYbなどの4f遷移金属 (希土類) 化合物。 c) 電子スピン-重項状態、スピンフラストレーション、低次元性や量子スピン効果などを示すパイロクロア化合物、スピネル化合物、ブロンズ化合物、三角格子関連化合物や変調構造などを有した遷移金属酸化物・化合物。</p>	○	○	※	
表面化学					
有賀 哲也 奥山 弘 八田振一郎	<p>【修士課程】固体の表面原子層は、固体内部とは異なる構造、電子状態を示し、あたかも独立の物質相であるかのごとく振る舞うことから、ナノスケールの新物質探索の場となりつつある。また、走査プローブ顕微鏡技術の発展に伴い、単原子、単分子レベルで、触媒反応素過程や単分子物理現象を研究することも可能になってきた。本分科では、固体表面が示すさまざまな興味深い性質を理解することを目指して、物性科学、分子科学の二つの観点から、最先端の計測手法に基づく実験を中心とする研究を進めている。</p> <p>物性科学： 原子レベルで平坦な結晶表面は、さまざまな2次元物質を作製する場としても重要であることが最近あきらかになってきた。本分科では、表面での新低次元物質の開発をすすめるとともに、高分解能光電子分光や電気伝導の精密測定などにより、それら物質の物性や新奇現象の微視的機構を明らかにする研究をすすめている。</p> <p>分子科学： 極低温の結晶表面において孤立吸着分子や少数クラスターを生成し、走査トンネル顕微鏡の応用により、単一分子分光および分子操作の研究を進めている。これにより、少数分子系のダイナミクス、電子注入による反応誘起の機構、単分子接合の電気伝導などについて精密かつ定量的な研究を進めている。また、高感度表面振動分光法である電子エネルギー損失分光による吸着現象や表面化学反応素過程等の研究を進めている。</p> <p>【博士後期課程】固体の表面原子層は、固体内部とは異なる構造、電子状態を示すばかりではなく、グラフェン類縁物質やトポロジカル絶縁体などの二次元物質の合成、探索の場となっている。また、走査プローブ顕微鏡技術の発展に伴い、単原子、単分子レベルでの化学反応や物理現象を研究することも可能になっている。本分科では、固体の表面を舞台とする新しい物質科学の展開をめざし、物性科学および分子科学の両側面から、固体表面に関する実験研究を進めている。</p> <p>表面の物性研究としては、(1) 表面の原子配列、電子状態、表面の反転非対称性由来するスピン軌道相互作用 (Rashba効果) およびこれによる電子スピンの振る舞いなどに着目しつつ、(2) 新しい二次元物質層の創製、表面相転移現象などを主要なテーマとして、(3) 角度分解光電子分光による2次元バンド構造決定、低速電子回折やシンクロトロン放射光を用いた表面X線回折による構造解析、高精度超高真空4端子プローブによる電気伝導測定、走査トンネル顕微鏡による局所原子構造の直接観察などを用いた研究を進めている。</p> <p>表面化学反応については、極低温走査トンネル顕微鏡技術により、単に個々の原子・分子を直接観察するのではなく、(1) 分子一つ一つを操作したり反応を誘起したりする分子マニピュレーションにより、単分子スイッチの作製、単分子コンダクタンスの測定・制御などの研究を進めている。また、(2) 非弾性トンネル効果を利用して特定の分子を選択して振動スペクトルの測定を行い、表面における分子間相互作用、化学反応の研究を進めている。また、(3) 超高感度な表面振動分光法である電子エネルギー損失分光法などを用いることにより、原子・分子レベルで精密に規定された結晶表面上での分子の吸着、反応の素過程を明らかにする研究を展開している。</p>	○	○	※	

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	研究内容	学生募集課程		
		修士課程	博士後期課程	
教員名		2022年 10月入学	2023年 4月入学	
固体物性化学				
北川 宏 前里 光彦 大坪 主弥	<p>【修士課程】新しい機能・物性を示す無機系、有機系、有機-無機複合系の物質の研究を行っている。スピン、電荷、プロトンが織り成す多彩な新奇物性・新機能の開拓を中心に、具体的には、電気伝導性金属錯体、有機超伝導体の物性研究、低次元強相関電子系における新電子相の創製、混合原子価金属錯体の電子伝導性・磁性・光物性・誘電物性の研究、プロトン伝導体、プロトン共役電子移動反応とそれに基づく新規機能性の発現、電子-プロトン結合に基づく量子物性探索、有機-無機複合系物質における水素吸蔵、機能性金属ナノ粒子の創製、表面多孔性配位高分子の創製および物性解明、エネルギー問題に資する物質の開発、ナノ界面基盤技術の構築、有機電子材料の開発などを行っている。</p> <p>【博士後期課程】</p> <p>1) 電子の相（超伝導、磁性、誘電性、金属、絶縁体など）の自在制御は、従来のエレクトロニクスの枠組みを越える、画期的な科学技術を開拓するひとつの道と考えられる。金属イオンの電子状態の多様性と有機分子の多様な設計性をうまく組み合わせ、「特異な結晶構造・電子構造」をもつ新物質を創製し、「電荷」、「スピン」、「格子」、「陽子（プロトン）」、「各種揺らぎ効果」に基づく新規機能性や物性の発現を目指し、「分子エレクトロニクス」の実現に向けた基盤の確立を最終目標としている。研究対象は、遷移金属錯体、混合原子価化合物、電荷移動錯体、配位高分子、有機伝導体、有機超伝導体、超イオン伝導体などである。</p> <p>2) 直径数～数十ナノメートルの金属ナノ粒子は、バルクとは異なる特異な熱力学的量や量子効果を示す。コア・シェル型、クラスター・イン・クラスター型など特異な合金構造を発現するナノ粒子は、物性研究の対象としても大きな可能性を持つ。当研究室では、後周期遷移金属を中心元素とし、i) 単一金属および多元素ナノ合金の構造および粒径制御法、ii) ナノ粒子中の水素吸蔵特性や金属中水素の量子波動性、iii) 多元素ナノ合金の触媒活性、などについての詳細な研究を行い、水素機能性や触媒能を有する多元素ナノ合金の創製と水素-電子の量子力学的相関に基づく新奇物性・機能の探索を目的としている。</p> <p>3) 固体中をプロトンが伝導する現象は、生体内から無機物にまで、自然界に幅広く存在する現象であるが、ホッピング、分子内構造変化もしくはプロトントンネリング現象などが混ざり合った現象であり、未解明な点が多い。我々は固体中の水素を操る学術分野「固体プロトニクス」の確立を目指している。</p>	○	○	※
分子性材料				
大塚 晃弘 中野 義明	<p>【修士課程】固体、および、液体は、その中で構成成分間の相互作用が有効に働き、孤立原子・分子とは異なる凝縮系に特有な性質を示す。分子を構成成分とする凝縮系は、分子自身の持つ内部自由度と分子間相互作用の組合せにより、多様な構造と物性を発現する事が出来る。これら自由度の大きな、有機分子や配位化合物等、分子を単位とする凝縮系を研究対象とし、導電性や磁性等を示す新規物質を開拓する。それらの構造と物性を研究し、さらなる機能性物質開拓のための指針を得る。具体的には、導電性を持つ電荷移動錯体を主たる研究対象とし、成分分子の合成から、構造解析、基本物性の測定まで総合的な研究を行う。これにより、超伝導転移や金属-絶縁体転移等、固体内の自由電子（遍歴電子）に基づく転移現象が発現する物質を開拓する。転移現象を理解するに当たって、構成成分間の相互作用のみならず、分子内での電荷分布や分子自身の形状等、分子内自由度にも着目した解析を行い、分子が凝縮系物性をどの様に支配しているかの本質を探る。特に、遍歴電子、或いは、これに近い状態の電子が、温度、磁場、圧力、光等の外場に対して敏感に応答する分子性物質の開拓を試みる。これにより、応答過程の非平衡状態を研究する物性科学分野の発展を図る。</p> <p>【博士後期課程】固体、および、液体は、その中で構成成分間の相互作用が有効に働き、孤立原子・分子とは異なる凝縮系に特有な性質を示す。分子を構成成分とする凝縮系は、分子自身の持つ内部自由度と分子間相互作用の組合せにより、多様な構造と物性を発現する事が出来る。これら自由度の大きな、有機分子や配位化合物等、分子を単位とする凝縮系を研究対象とし、導電性や磁性等を示す新規物質を開拓する。それらの構造と物性を研究し、さらなる機能性物質開拓のための指針を得る。具体的には、導電性を持つ電荷移動錯体を主たる研究対象とし、成分分子の合成から、構造解析、基本物性の測定に至る実験を行う。このような総合的な研究により、超伝導転移や金属-絶縁体転移等、固体内の自由電子（遍歴電子）に基づく相転移現象が発現する物質を開拓する。これらの相転移現象を理解するに当たって、構成成分間の相互作用のみならず、分子内での電荷分布や分子自身の形状等、分子内自由度にも着目した解析を行い、分子が凝縮系物性をどの様に支配しているかの本質を探る。特に、遍歴電子、或いは、これに近い状態の電子が、温度、磁場、圧力、光等の外場に対して敏感に応答する分子性物質の開拓を試みる。これにより、応答過程の非平衡状態を研究する、新たな物性科学の分野の発展を図る。</p>	○	○	※
有機合成化学				
畠山 琢次	<p>グラフェン・カーボンナノチューブ・フラーレンに代表されるナノカーボンには、機能性材料として広く研究が行われている。本分科では、その次世代の材料としてナノカーボンの任意の炭素をヘテロ元素に置換した「含ヘテロナノカーボン」の精密合成、また、それを通じた学術分野としての深化を目標に据えて研究を進めている。現在の具体的な研究テーマは以下の通り。</p> <p>(1) 複数のヘテロ元素を高効率かつ高選択的に導入するタンデムヘテロFriedel-Crafts反応の開発</p> <p>(2) タンデムヘテロFriedel-Crafts反応を鍵とした含ヘテロナノカーボン分子の合成</p> <p>(3) 含ヘテロナノカーボン分子を鍵中間体とした含ヘテロナノカーボンの合成</p> <p>(4) (2) (3) で合成した新材料の機能開拓、特に有機エレクトロニクス分野における応用展開</p>	○	○	※

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	教員名	研究内容	学生募集課程		
			修士課程	博士後期課程	
			2022年 10月入学	2023年 4月入学	
有機化学					
依光 英樹 下川 淳 齊藤 颯		斬新な有機合成反応を開発し、新物質の創成と有用分子の効率的合成を目指す。特に、遷移金属触媒・有機金属化学・有機典型元素化学をキーワードとして、以下の課題について研究する。(1) 遷移金属触媒を用いる効率的炭素-炭素結合形成反応の開発。(2) 硫黄やケイ素の特性を活かした有機合成手法の創出。(3) 電子注入を起点とする新反応の開発。(4) 芳香環の部分分解と再構築に基づく骨格構築法「芳香環メタモルフォシス」の追求。反応系の綿密なデザイン、実験化学と計算化学に基づく反応中間体と遷移状態の探求、元素の個性の理解と活用を元に研究を進める。生物活性物質や有機エレクトロニクス材料の合成など他分野への波及効果を意識した展開も自然発生的に行う。	○	○	※
集合有機分子機能					
齊藤 尚平		独自の機能分子を設計・合成・材料化し、物質中における機能分子の動きや集合を制御することで、光・電子・力学的な物性を操る。有機分子の開発を基軸に据えつつ、自然科学の理解を深める分子システムや、科学技術を前進させる有機材料の創出を目指す。研究の出口を幅広く捉え、基礎科学と応用技術を両輪として、次世代の科学技術を担う人材を育成する。最近の研究テーマの例を以下に示す。 (1) 有機合成により、柔軟なπ共役構造をもつ「羽ばたく分子」を開発する。量子化学計算を利用しながら、基底状態および励起状態における分子の羽ばたき運動を解析し、動きに伴う分子構造や発光スペクトルの変化を明らかにする。 (2) 柔軟な発光分子を高分子・液晶・流体などに分散させ、巨視的な物質の変形に伴って起こる分子骨格の動きを発光スペクトルや発光寿命の情報として取り出す。これにより、ナノスケールにおける物質の応力集中や流体の粘度分布など、物質中の環境変化をリアルタイムイメージングで追跡する。 (3) 集合しやすい機能分子を物質中で局所的に凝集させた材料を開発する。光照射、温度制御、電場印加などの外部刺激に対して機能分子が応答することで、色や発光だけでなく、かたさ・接着力・可溶性などを制御できる有機材料を開発する。また、データと計算を活用したマテリアルズインフォマティクスを並行して進める。 以上のように、有機合成、構造解析、量子化学計算、光吸収や発光の分光解析を日常的に行い、さらに、高分子や液晶の合成、熱物性や力学物性評価（かたさ測定や引張試験）、顕微鏡イメージング、データ駆動化学などをテーマに応じて実施する。異分野研究者との共同研究を積極的に進める。	○	○	※
生物構造化学					
深井 周也 竹田 一旗 尾勝 圭		X線結晶構造解析やクライオ電子顕微鏡、X線小角散乱などの立体構造解析法を駆使して、生体内で重要な役割を担うタンパク質の機能メカニズムを理解する。さらに、立体構造情報に基づいて設計したタンパク質変異体を用いて、溶液中での機能を解析するだけではなく、タンパク質の機能が細胞や個体に与える影響を調べることを通じて、タンパク質機能の化学的理解を医学・生物学的な理解へと繋げる。神経機能などの高次の生命機能を担う細胞内外の分子シグナリングや酵素反応、化学的に精密な理解を要する生体内エネルギー変換や電子伝達などを対象とした研究を行う。	○	○	※
生物化学					
板東 俊和		ケミカルバイオロジーは有機合成化学、核酸化学、分析化学などの様々な学問領域を基盤として生まれた学問である。本分科では、デオキシリボ核酸（DNA）を研究対象として、その分子レベルの化学反応性の議論から、細胞内環境におけるマクロな高次構造変化に至るまでの総合的なケミカルバイオロジー研究を展開している。 1) 細胞内の特定遺伝子を制御可能にする人工遺伝子スイッチの創製 DNAの特定塩基配列に対して特異的に結合可能な人工ペプチド分子を活用して、細胞内の特定遺伝子の発現を制御する人工遺伝子スイッチの創製を目的としている。具体的には、DNA塩基配列特異的な結合性リガンド、アルキル化剤、および、ヒストンデアセチラーゼ阻害剤を標的塩基配列に基づいて設計し、細胞増殖阻害活性や遺伝子発現制御能を評価している。将来的にはiPS細胞への初期化と様々な細胞への分化を可能にする人工遺伝子スイッチの実現を目指している。 2) 細胞内DNAのダイナミックな高次構造変化を解析する手法の開発 細胞内でゲノムDNAは様々なダイナミックな高次構造変化が起こしている。特に、グアニン四重鎖の形成は注目されている。本研究室では、最新の解析技術を駆使して、様々な構造依存的な反応性の差違を認識することによる細胞内DNAの高次構造解析を進めている。	○	○	※

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	研究内容	学生募集課程		
		修士課程	博士後期課程	
教員名		2022年 10月入学	2023年 4月入学	
（化学研究所）有機元素化学				
水畑 吉行 行本万里子	<p>本分科では、かさ高い置換基による速度論的安定化を用いることにより、通常は安定に存在できない反応中間体や新規な結合様式を有する化学種を安定な化合物として合成・単離し、その性質を解明することを目的として研究を行っている。具体的には以下に示すような高周期典型元素化合物や遷移金属錯体を研究対象とし、周期表上の全元素を視野に入れた幅広い有機元素化学を展開している。</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 含高周期14族元素芳香族化合物 2. 各種高周期典型元素間多重結合化学種など新しい結合様式を持つ典型元素化合物 3. 高周期典型元素を含む新規な活性種 4. 新規な結合様式を有する遷移金属錯体および遷移金属触媒反応モデルにおける反応中間体 <p>これらの新規活性種を合成・単離し、周期および元素の特性の違いにより発現する構造や反応性の変化を研究しその未知なる性質を解明することは、単に有機化学者の好奇心を満たすのみならず、各元素の特徴を活用した有機化学への応用を展開する上で非常に重要な基礎的知見を与えるものと考えている。</p>	○	○	※
（化学研究所）結晶化学				
倉田 博基 # 治田 充貴 根本 隆	<p>高分解能分光型透過電子顕微鏡による原子、分子像の直接観察と高速電子線エネルギー損失分光法（EELS）による極微小領域の分析法を駆使し、結晶の局所構造と結合状態の相関を明らかにする。さらに、高い空間分解能で元素や電子構造に関する情報を得るための新しい手法の開発とその応用を目的とし、最近では、次のような研究内容に重点が置かれている。</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 球面収差補正された走査型透過電子顕微鏡（STEM）による局所構造の精密解析を行うと同時に、原子分解能レベルの高い空間分解能でEELSによる状態解析を行い、固体内界面や構造欠陥近傍の局所電子構造を解明する。 2. 内殻電子励起スペクトルの吸収端微細構造を種々の電子構造計算を用いて解析し、遷移金属酸化物等の局所構造や電子状態を明らかにする。 3. ナノ構造を利用したプラズモニクス材料などの表面電子励起を、高エネルギー分解能STEM-EELS法により解析する。 4. 薄膜やナノ固体の光学的性質を価電子励起スペクトルの解析により明らかにする。 	○	×	※
（化学研究所）分子集合体				
若宮 淳志 MURDEY, Richard 中村 智也 TRUONG, Minh Anh	<p>本分科では、独自の分子設計と物質合成を基軸として、次世代の革新的な機能性材料の開拓に取り組んでいる。具体的には、特異な分子構造や元素の特性を巧みに利用した独自の分子設計を切り口に、モデル化合物群を設計・合成し、これらの基礎特性評価を通して、π電子系化合物の構造—物性相関の解明に取り組む。特に有機・錯体分子や有機無機ハイブリッド材料の薄膜やそれらの界面に焦点をあて、分子の凝集構造と電子・光物性との相関の観点から、様々な分光法を用いてその電子構造と機能発現の本質を捉える。これにより、真に優れた機能性材料を創出するための新たな材料設計の考え方、指導原理を見いだすことを目標とする。</p> <p>主な研究テーマとしては、1) 元素の特性を活かした機能発現、2) π共役および軌道相互作用の高次元化、3) 薄膜中での分子の配向・配列制御をキーワードに、独自の分子設計に基づいて様々な機能性化合物群の開発研究を行う。得られた化合物を用いて、実際にペロブスカイト太陽電池などのデバイスの作製と特性評価までを行い、様々な有機エレクトロニクスに展開可能な基盤材料の開発へとつなげる。材料設計—合成—物性評価—デバイス作製—評価の一連の開発研究を通して行うことで、実用化の観点からも求められる優れた材料を開発するとともに、その材料設計の考え方の有用性を実証する。これらの研究開発を通して、材料化学分野に革新をもたらす基礎化学研究を展開する。</p>	○	○	※
（化学研究所）機能性界面解析				
長谷川 健 下赤 卓史 塩谷 暢貴	<p>材料の物性は、分子の一次構造だけでは決まらず、分子の集合構造が重要な役割を果たし、有機半導体で顕著に見られる。言い換えると、分子の集合構造を自在に制御できれば新たな物性を発現させることができる。またこれは、一分子と分子集合系の物性が大きく異なることも意味し、有機薄膜半導体や有機フッ素化合物はこの典型である。こうした幅広い有機材料の物性制御を視野に、作製した材料の分子集合構造を可視化できる分析手法の開発も並行して進め、有機薄膜の構造・反応化学の世界的拠点を作る。</p> <ol style="list-style-type: none"> a) 高速MAIRS法の開発、およびMAIRS-GIXD法による薄膜構造の定量的可視化と、有機半導体デバイスの物性制御への応用。 b) 有機フッ素化合物の階層双極子アレー(SDA)理論に基づいた分光学的研究と、フッ素化学産業の環境問題解決に向けた研究。 c) 結晶粒界や非晶質表面の分光学的定量解析を可能にする、フォノン・ポラリトンの表面モードの分光学的解析。とくにMAIRS法を活用した新しい分光解析法の開発。 d) 量子化学計算・電磁気学シミュレーション・ケモメトリックスを総合的に応用した新しいスペクトル解析法の開発と界面の物理化学への応用。 	○	○	※

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	研究内容	学生募集課程		
		修士課程	博士後期課程	
教員名		2022年 10月入学	2023年 4月入学	
(化学研究所) 水圏環境分析化学				
宗林 由樹 高野祥太郎 鄭 臨潔	<p>持続可能な社会の実現へ向けて、水圏の現在・過去さらに未来を明らかにするために、微量元素・同位体に注目し、分析化学、地球化学、海洋学、陸水学、地質学、環境学などの学際的研究を展開する。</p> <p>1. 微量元素・同位体分析法の開発 ・多元素分析法、同位体比分析法、化学種別分析法、現場分析法など新規分析法の開発</p> <p>2. 微量元素・同位体の水圏化学 ・この研究では、フィールドワークが重要な位置を占める。現在の主な課題は以下のようである。(1) 生物活性金属が海洋生態系へ及ぼす影響、(2) 固体地球および人類の活動と海洋物質循環の相関、(3) 古海洋の環境復元。</p> <p>3. 新規な選択的錯生成系の開発 ・新しいイオン認識機能を持つ配位子や吸着剤の設計、合成、評価と分離技術、センサーへの応用。</p>	○	○	※
(化学研究所) 固体化学				
島川 祐一 菅 大介 後藤 真人	<p>無機酸化化合物材料を中心に、ナノスケールレベルで構造制御された物質の設計・合成・評価に関する幅広い基礎研究を行っている。遷移金属酸化化合物を中心とする無機機能性材料は多くの電子デバイスに使われているが、それらの機能を支える基本物性を結晶構造や電子状態のレベルで解明するとともに、新しい機能性材料の探索・開発を目指している。特に注目しているのは、磁性、電気伝導性、誘電性、光特性などが強い相関を持った新材料で、これらの材料特性を結晶構造や電子状態にまで立ち返って検討する。現在の主な研究テーマは以下のとおりである。</p> <p>1) 新規遷移金属酸化化合物の合成 a. 高圧法による多結晶、単結晶合成 b. 蒸着法によるエピタキシャル薄膜成長 c. トポタクティック反応による物質変換</p> <p>2) 構造・物性評価 a. X線・中性子・電子線による精密結晶構造解析 b. 磁性・輸送特性・誘電性・電気化学特性、などの物性評価 c. 第一原理による電子状態計算</p> <p>研究の第一歩は「ものづくり」である。無機材料を対象に、元素の特性を活かし、興味深い物性を示す物質を様々な手法を駆使して合成する。合成した物質は、その結晶構造を解析し、物性評価結果と併せた構造物性評価を中心に研究を進める。本分科での研究を通して、物質の結晶構造やバンド構造を「美しい」と感じ、多彩な物性に「驚きと不思議さ」を感じ、新しい物質を生み出す「喜び」を感じて欲しい。</p>	○	○	※
(化学研究所) 無機合成化学				
寺西 利治 坂本 雅典 高畑 遼	<p>本分科では、革新的エネルギー機能（高効率フォトン濃縮、長寿命電荷分離、可視光水完全分解、磁気交換結合、協奏触媒・光機能）の開拓を目指し、様々な無機（金属、半導体）ナノ粒子の一次構造（粒径、形状、組成、相分離様式）および二次構造（空間規則配列構造）を液相で精密制御することにより、電荷密度、局在プラズモン共鳴波長、励起子寿命、触媒能、スピン、協奏反応場の制御を行う。主な研究テーマは以下の通りである。</p> <p>1) 高効率な可視・近赤外光エネルギー変換ナノ粒子の創製 2) 革新的水完全分解ナノ粒子触媒の創製 3) 新しい結晶相ナノ粒子の創製と光・触媒機能の開拓 4) 高性能永久磁石ナノ粒子の創製 5) ナノ粒子超構造の創製と協奏機能の創出</p>	○	○	※
(化学研究所) ナノスピントロニクス				
小野 輝男 森山 貴広 塩田 陽一 久富 隆佑	<p>金属・半導体などを組み合わせてナノスケールの人工物質を作り出し、電子の電荷・スピン・位相・コヒーレンスの織り成す多彩な物性の制御を目指した研究を行っている。特に、電子の二つの自由度である電荷とスピンを自在に制御する「スピントロニクス」の実現を目指す。このような研究は、近年の微細加工技術の進展によって初めて可能になったものであり、基礎研究が応用へと直結する物質科学研究として位置づけることができる。</p> <p>人工物質の作製は、超高真空蒸着による原子層単位での多層膜作製と、電子線リソグラフィを用いたナノメートルスケールの微細加工技術を組み合わせで行う。得られた人工ナノ物質を舞台として、電気伝導度・X線回折・磁化率・磁気力顕微鏡・トンネル顕微鏡・メスバウアー分光・中性子回折・テラヘルツ応答・光ヘテロダイン測定などの様々な測定手法を駆使して、新しい物性の探索を行い、電気伝導や磁性などの物性を制御する。現在進行中のテーマは以下の通りである。</p> <p>(1) ナノ磁性体（磁性細線や磁気ナノドットなど）における磁化過程の制御 (2) 磁性体から非磁性体（金属・超伝導体・半導体）へのスピン注入による物性制御 (3) 超低消費電力記録媒体への応用を目指した電界による磁化状態の制御 (4) 強磁性体・反強磁性体の磁化ダイナミクス（磁壁やスキルミオンなど）のスピン流による制御 (5) 強いスピン軌道相互作用を有する磁性多層膜における磁化制御 (6) カイラルフォノン・スピン相互作用の探索とそれを用いた磁化制御</p>	○	○	※

専攻（系・分野）分科等の教員及び研究内容
募集分科等については、各学生募集要項で必ず確認の上、出願してください。

※博士後期課程2023年4月入学の学生募集の有無は、2022年11月中下旬頃に更新します。

分科名	研究内容	学生募集課程		
		修士課程	博士後期課程	
教員名		2022年 10月入学	2023年 4月入学	
（医生物学研究所）生体分子動態化学				
秋山 芳展 森 博幸 檜作 洋平	<p>遺伝子産物が機能的構造体として細胞構造を形づくり、維持される過程を研究する。特に、生体膜を場とした、タンパク質の折りたたみ、分泌(膜透過)、膜組み込み、局在化および分解、さらにはそれらの異常に対応するストレス応答などの諸過程やこれらに関わる遺伝子の発現制御等に注目して、それらをグローバルな「品質管理機構」としてとらえる。細菌細胞においてこの品質管理機構を構成する要素が機能的ネットワークを形成し、相互のバランスをとりつつ的確に起こるために細胞に備えられている仕組みを、生化学、生物物理学、遺伝学、構造生物学等様々なアプローチにより解析することで、表層タンパク質の機能発現と秩序維持機構を明らかにする。</p> <p>最近では主に以下の項目について研究を進めている。</p> <p>1) タンパク質膜透過装置と機能発現機構</p> <ul style="list-style-type: none"> ・Sec 膜透過装置の作動機構の解明 ・翻訳アレストを介した膜透過装置の発現制御機構の解明 <p>2) ストレス応答制御とタンパク質分解の分子機構</p> <ul style="list-style-type: none"> ・膜内切断プロテアーゼの構造と機能制御機構の解明 ・細菌外膜の品質維持機構の解明 <p>3) 新たに開発した手法を用いた、細胞内タンパク質動態の解析</p>	○	×	※
（複合原子力科学研究所）放射線生命化学				
高田 匠 木野内忠稔 齊藤 毅	<p>【修士課程】本分科では、高齢化社会において深刻な数多くの加齢性疾患(白内障、アルツハイマー病など)の発症機序解明に取り組んでいる。我々は、新しい研究の切り口として「加齢による蛋白質構成アミノ酸の自発的、または外部刺激に応じた翻訳後修飾(D-化、脱アミド化、酸化など)」と、その結果生じる「蛋白質の異常凝集機構」の理解が重要であると考えている。これらの課題に対して、本分科では加齢類似の現象を惹起する放射線や、これまでにない人工の被修飾アミノ酸含有蛋白質を利用した下記研究を進め、加齢性疾患の発症機序の解明に取り組む。主な研究テーマは下記のとおりである。</p> <p>1) 放射線・紫外線被ばく、熱・酸化ストレス、酵素などによって促進されるタンパク質中のD-アミノ酸生成機構の解明</p> <p>2) タンパク質内部アミノ酸の翻訳後修飾が引き起こす蛋白質構造変化、凝集、それらに起因する疾患の防御・修復機構に関する研究</p> <p>3) ヒト眼内のクリスタリン蛋白質のmisfoldingが引き起こす加齢性白内障の発症機構の解析</p> <p>4) D-アミノ酸含有タンパク質を特異的に分解する酵素の研究</p> <p>5) 放射線耐性細菌の放射線耐性機構</p> <p>当研究室では世界に先駆け、老人性白内障の水晶体に、生体内には存在しないと考えられてきたD-アスパラギン酸(Asp)が多量に蓄積されていることを明らかにし、その存在が生体内における普遍的であることを示した。しかし一方で、D-Asp含有タンパク質の生成機構は不明である。この部分を明らかにすることで、そのD-Asp含有タンパク質の生成抑制を標的とした、加齢性疾患防御手法の開発につながると考えており、そのための研究を進める。</p>	○	○	※
	<p>【博士後期課程】本分科では、高齢社会において深刻な問題となっている数多くの加齢性疾患(白内障、アルツハイマー病など)の発症機序解明に取り組んでいる。我々は、新しい研究の切り口として「蛋白質構成アミノ酸の自発的、または外部刺激に応じた修飾(D-化、脱アミド化、酸化など)」と、その結果生じる「蛋白質の異常凝集機構」の理解が重要であると考えている。本分科では加齢類似の現象を惹起するため各種の放射線照射や、これまでにない人工の被修飾アミノ酸含有蛋白質を利用した下記研究を進め、加齢性疾患の発症機序の解明に取り組む。</p> <p>1) 放射線・紫外線被ばく、熱・酸化ストレスなどによって促進される蛋白質中のD-アミノ酸残基生成機構の解明</p> <p>2) 蛋白質内部アミノ酸の翻訳後修飾が引き起こす蛋白質構造変化、凝集、それらに起因する疾患の防御・修復機構に関する研究</p> <p>3) ヒト眼内のクリスタリン蛋白質のmisfoldingが引き起こす加齢性白内障の発症機構の解析</p> <p>4) D-アミノ酸含有蛋白質を特異的に分解する酵素の研究</p> <p>5) 放射線耐性細菌の放射線耐性機構</p> <p>当研究室では、加齢後ヒト眼の水晶体中に、生体内には存在しないと考えられてきたD型アスパラギン酸残基(D-Asp)を見出している。D-Asp含有蛋白質の生成機構や機能は不明であるため、その部分を解明するための研究を進める。見出した知見を、D-Asp含有蛋白質の生成抑制を標的とした新たな加齢性疾患防御手法の開発へと応用・展開する。</p>			

注) 氏名の後に「#」が付いている教員は、2022年度に退職予定です。また、他の教員についても、他大学等への異動等により退職することもあります。