

理論計算化学 (物理化学講座)

担当教員名 麻田俊雄、満田祐樹

連絡先 t_asada@omu.ac.jp, mitsutay@omu.ac.jp

居室 G棟 G316(麻田), G317(満田)

何を行う研究室か？

理論と計算から化学現象を解明する。(普遍的原理に基づく)

複雑な物質であっても電子が主役である以上、量子力学が支配している。

理論が複雑であっても、プログラムを作れば、あとはコンピュータで処理できる。

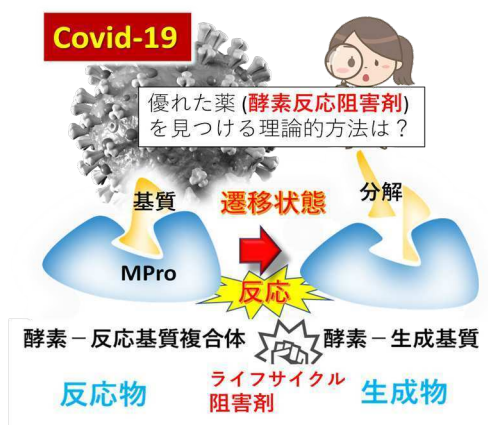
化学反応や物理現象の本質を物理法則に基づいて理解し、理論の発展や活用法を探る。

- ・ 普遍理論の解明 (理論の提案)
- ・ 取扱いうる最適で具体的な理論化学的手法を提案する。(理論モデルの提案)
- ・ コンピュータを用いて既知の現象を再現し発展応用を目指す。(結果の発展応用)

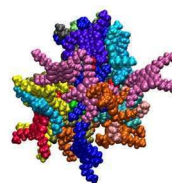
具体的な研究内容

(麻田) 分子の違いは、電子数と原子核の電荷および座標の違いに他ならない。

そこで、興味さえあればすべての物質が研究対象になる。一例を以下に示す。

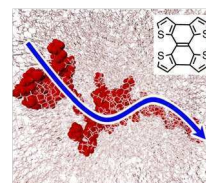


課題1. 酵素反応の反応障壁制御



Marcusの式①

$$W = \frac{2\pi t^2}{h} \left(\frac{\pi}{\lambda k_B T} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{\lambda}{4k_B T} \right)$$



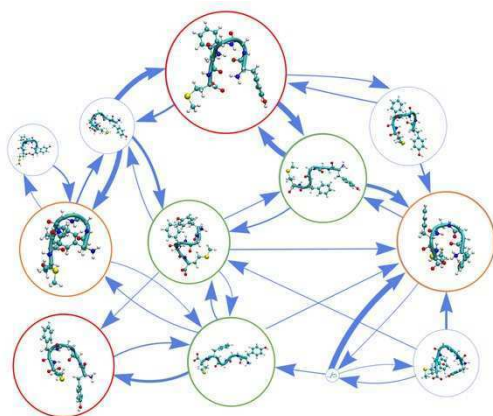
正孔移動度 μ の評価式②

$$\mu = \frac{1}{6} \frac{e}{k_B T} \left(\frac{\text{path}}{\sum_j W_j^{(k)}} \prod_k r_i^2 W_i^{(k)} \right)^{1/N}$$

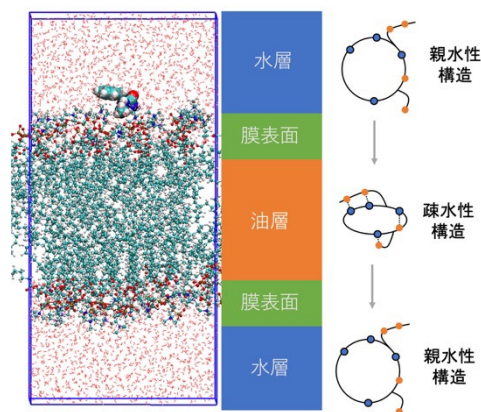
課題2. アモルファス中で電子や正孔の移動が容易な分子設計。(実験グループとの共同研究)

(満田) 生体分子の振る舞いは、複雑な分子構造が多様に変化して起こる。

それを解き明かすため、全原子の分子シミュレーションを行い、その統計的な振る舞いを解明する。



課題3. タンパク質のフォールディング経路の解明



課題4. 薬剤分子の生体膜透過シミュレーション

光物理化学研究室 Photophysical Chemistry



教授 ハツ橋知幸 准教授 迫田憲治



高強度超短パルスレーザーと分子との相互作用

・レーザーの強い電場によって分子から複数の電子を剥ぎ取り、新奇な化学種である多価分子カチオンを創り出すことに成功しました。価数に依存した化学反応などを研究しています。

【世界最小の4価イオン: 世界最小の芳香族4価イオン: 世界初の有機物5価イオン】

・レーザーを用い、分子やイオンを原料とするボトムアップ法ならびにバルク材料を原料とするトップダウン法でナノ粒子を作製しています。合金組成の変化、表面の改質機構、発光に与える条件などを研究しています。

【ミディアム・ハイエントロピー合金、ペロブスカイト、酸化物の表面改質】

複雑分子システムにおける機能発現機構の解明

・マイクロメートルサイズの微小液滴の中で進む化学反応は、バルク溶液中の化学反応とは全く異なることが知られています。私たちは独自の顕微分光装置を開発し、微小液滴が示す特異な光共振効果を利用した分光計測を駆使することで、この謎の解明に取り組んでいます。

・液滴などの微小環境におけるキラリティーの発現と制御およびその機構の解明は生命のホモキラリティーの謎とも関連した未踏の領域です。私たちはキラリティー検出のための顕微分光装置を独自に開発することで、微小反応場におけるキラリティーの謎の解明に挑戦しています。

伝導性、磁性、発光特性等の電子機能性を有する有機分子材料の開拓と構造物性の解明、
気相反応を用いた分子間相互作用と化学進化の研究

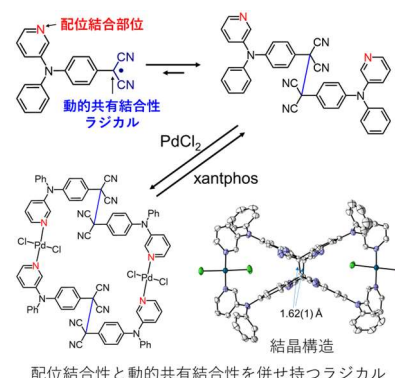
担当教員：教授：藤原秀紀（G301）、准教授：酒巻大輔（G304B）、准教授：藤原亮正（G312）

藤原^秀・酒巻グループ（連絡先：hfujii@omu.ac.jp, sakamaki@omu.ac.jp）

我々のグループでは、酸化還元特性、電気伝導性や磁性、吸光・発光、円偏光発光などの各種光機能性、動的共有結合性などの様々な機能性の発現を目指した、新しい有機分子の分子設計、有機合成を行い、その物理化学的性質の評価を行います。また、それら合成した分子を用いて単結晶や薄膜試料などの分子集合体を作製し、集合体の構造と様々な機能性について、種々の測定手段を用いて解明し、新しい機能性を有する有機分子材料の開拓を行います。

主な研究プロジェクト

- ・ 電子供与性（ドナー）部位と電子受容性（アクセプター）部位の両方を有する分子の開発を行い、電気伝導性を光によってスイッチングしたり、溶媒極性や温度によって吸収・発光波長が変化するクロミズム機能性を有する有機材料の開発を行います。
- ・ 分子内に有機ラジカル部位を内包する分子を用いることにより、磁性と電気伝導性という二つの機能性を併せ持つ有機材料の開発を行います。
- ・ 含窒素平面π電子系分子であるアザアセンおよびフタロシアンを鍵骨格とした機能性分子を開発し、分子の幾何学構造の巧妙なデザインによって、これまでにない分子集合体を構築し、新機能・新現象を探求します。
- ・ ラジカルの結合生成-開裂反応に基づいた動的共有結合を利用した機能性分子の開発を行います。



以上のように、複数の機能性を併せ持つ分子を開発し、個々の物性を超えた”協奏的な”複合機能性を発現する新しい機能性物質の創出を目指します

藤原^亮グループ（連絡先：fujihara@omu.ac.jp）

地球外物質からアミノ酸や糖、核酸塩基が検出され、生体関連分子の地球外起源説が有力となってきています。星間分子雲で生成した有機分子はその構造に応じた分子認識能を有することから、生成後に分子雲の反応性に影響を与えられと考えられます。我々のグループでは、分子認識とエナンチオ選択的反応、生体関連分子の生成過程の関係を調べるため、水素結合などの比較的弱い分子間相互作用で形成する気相クラスターを模擬星間分子雲とした化学進化の実験研究を進めています。そして、そのような物理化学的研究を進める中で、独自の装置を有用な分析機器として科学分野全体で利用できるように開発しています。

分子物理化学研究室(物理化学講座)

Molecular Physical Chemistry, Quantum Chemistry &
Spin Science/Spin Technology

担当教員: 佐藤和信(sato@omu.ac.jp)、塩見大輔(daisukeshiomi@omu.ac.jp)

豊田和男(ktoyota@omu.ac.jp)

居室: G210 室(佐藤)、G208 室(塩見)、G209 室(豊田)

研究内容: 分子内の不対電子スピに着目し、分子が生み出す多様な磁気物性の解明と分子論的理解に実験と理論の両面から取り組んでいます。

安定ラジカルや高スピン有機分子、常磁性金属錯体や多孔性金属錯体など新規(磁気)機能性物質の電子状態・分子構造を解明するために、液体ヘリウムを利用して極低温から 200°C の広い温度範囲でのスピン磁気測定を行っています。

(佐藤) 分子スピン量子コンピュータ(QC)の実現を目指し、新たな分子スピン量子ビットの探索と分子のスピン状態を利用する量子状態制御/変換技術確立し、新たな分子スピン情報科学の開拓を目指しています。

(塩見) 分子の集合体を示す磁気物性を、超伝導量子干渉計(SQUID)を用いて調べます。3He 同位体を使った超低温環境で、これまでにない新しい“分子磁性体”を見つけることを目指しています。

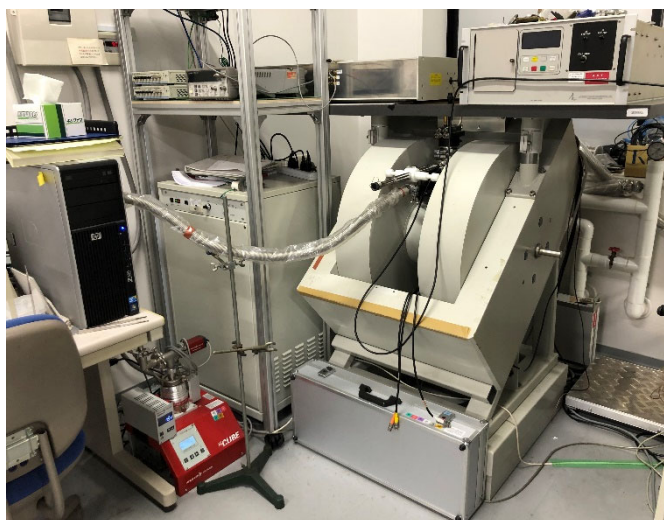
(豊田) 量子力学の原理に基づきコンピューターを使って分子中の電子の状態を計算します。分子が持つ磁性などの性質を精密に計算する方法を創ることを目指しています。

実験装置:

ESR/ENDOR 分光器、
パルス ESR/ELDOR/ENDOR 分光器、
SQUID 磁束計、真空ラインなど

計算機器:

Linux PC ほか



生命物理化学研究室

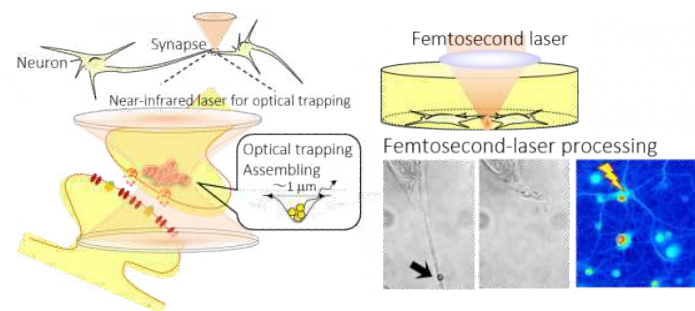
生体分子構造から細胞機能に至る分子ダイナミクスを解明



細川 千絵 教授, 宮原 郁子 准教授, 増井 恭子 講師, 谷本 泰士 特任助教
連絡先 : hosokawa@omu.ac.jp (細川) 居室 : 理学部G201

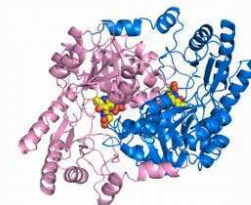
レーザー擾動による細胞内分子機能の解明

細胞機能を明らかにするためには、細胞内分子動態を高精度に操作し、分子ダイナミクスを計測する手法が必要となります。私たちの研究室では、集光レーザービームの光擾動により細胞機能を局所的に操作する手法の開発を進めています。培養神経回路網を対象として、神経情報処理システムの分子レベルでの理解を目指しています。



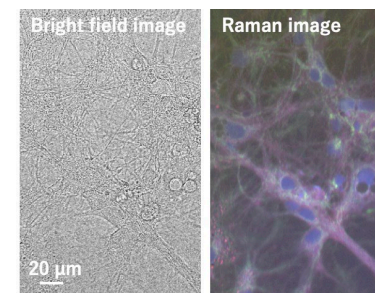
酵素タンパク質の立体構造と機能の解明

様々な生命現象を担う酵素タンパク質の構造と機能の関係を分子レベルで明らかにすることを目指しています。具体的には、単結晶X線構造解析法により目的とするタンパク質の3次元立体構造を明らかにし、分光学などを用いてタンパク質の誘導適合や触媒反応機構のメカニズムを明らかにしています。



顕微ラマン散乱分光計測による細胞機能の解明

生きたままの細胞内の生体分子の分子動態を非染色かつ低侵襲で計測することが可能な顕微ラマン散乱分光法を軸に、細胞機能の解明に向けた研究を行っています。細胞を非接触で自在に操作することのできる光トラッピング技術と組み合わせ、神経細胞のシナプス伝達過程を分子レベルで明らかにすることを目指しています。





構造物理化学研究室

研究室: G211~214



URL : <https://www.omu.ac.jp/sci/chem-cluster/>
e-mail : takuya.nakashima@omu.ac.jp

教授 中嶋 琢也



光化学、ナノ物質科学、超分子など
九州大学(2004、博士)
→奈良先端大院大(助教・准教授)
→2022.4より現職

講師 武藤 克也



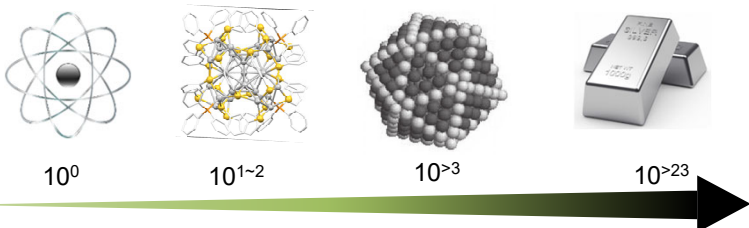
光化学、フォトクロミズム、スピン化学
青山学院大学(2015、博士)
→青山学院大学(助教)
→2022.10より現職

構成員(2025年度予定)

M2 1名、M1 3名(うち学外からの進学者1名)、B4 2~4名 技術スタッフ 1~2名

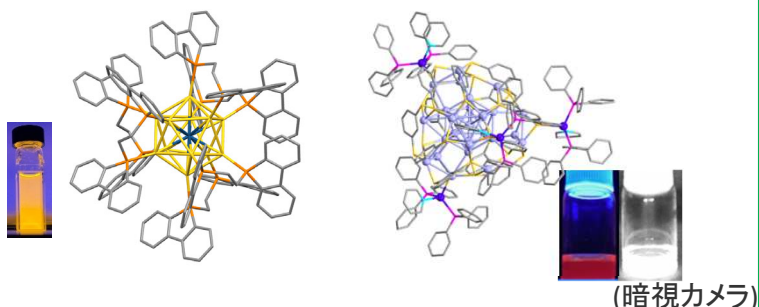
構造物理化学研究室では光とナノ物質の相互作用について研究を行っています。
物質の性質に潜む構造化学的要因を追求し、新物質創製を推進します。

ナノ粒子・クラスターの科学



金や銀を微細化していくと、サイズが小さくなるに従って、その色や物性が大きく変化します。物質を構成する金属原子数が $10^0 \sim 10^2$ 個のスケールになると、ユニークな原子配列を取り、構造特有の物性を発現します。

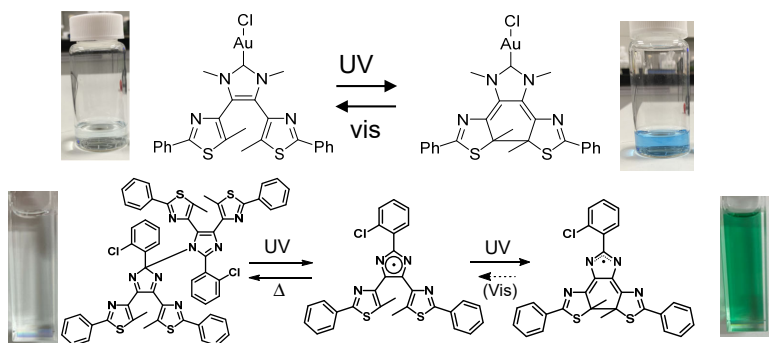
研究室では、可視域で鮮やかに光るクラスターや目に見えにくい近赤外で光るクラスターを合成しています。



合成したクラスターは、様々な手法で構造を特定し、光物理化学特性の解明を行います

光スイッチング分子の創製

有機合成により、光照射に応答して、色や構造・種々の物性を変える光応答性分子を創成します



構造物理化学研究室では、こちらに示した研究に留まらず、有機化学・錯体化学・超分子化学・高分子化学のツールにより創出した物質群に対して、物理化学(光化学)的手法によりアプローチし、その構造-物性相関を詳らかにします。

参加学会:

日本化学会、光化学討論会、ナノ学会など
共同研究先

奈良先端大、東京大学、京都工芸繊維大学、分子科学研究所、京都大学、立命館大学、物質材料研究機構、九州大学など
パリサクレ大学(フランス)、インド科学教育研究大学ティルパティ校など