

Vol.15 2019

ANNUAL REPORT

Department of Material Science
Graduate School of Science
Josai University

城西大学大学院理学研究科
物質科学専攻

Annual Report

Department of Material Science

Graduate School of Science

Josai University

Vol. 15

March 2019

城西大学大学院理学研究科

物質科学専攻

**The original papers in this issue were reproduced with the permission
of copyright owners.**

目次

研究紹介	
分子設計部門 -----	1
情報科学研究室	
天然物有機化学研究室	
合成有機化学研究室	
有機機能化学研究室	
物質構造部門 -----	5
分子集合体科学研究室	
機能材料分析研究室	
構造化学研究室	
物質機能部門 -----	8
ナノ計測化学研究室	
分子フォトンクス研究室	
ナノ機能化学研究室	
生体物質科学部門 -----	11
分子分光学研究室	
環境生命化学研究室	
生体分子生物化学研究室	
修士論文発表会 -----	14
修士課程中間発表会 -----	15
サイエンスビジネスセミナー -----	16
海外研究渡航報告 -----	18
大学院生海外研究渡航報告 -----	28
2018年 業績リスト	
研究論文 -----	33
書籍 -----	34
学会発表 -----	35
論文抄録 -----	43
論文別刷 -----	50

量子化学に基づく非経験的分子軌道法や高次元アルゴリズムに基づく分子動力学法といった手法を用いた分子の機能や物性の解析が中心的研究テーマである。特に分子構造の変化や化学反応に関する様々な問題についてアプローチを行っている。

最近の研究例を以下に紹介する。

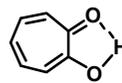
酸化ストレスは、パーキンソン病やアルツハイマー型認知症などの神経変性疾患や、虚血性脳障害の発症・進展に深く関与していることが知られている。近年、この酸化ストレスの軽減を目的として、抗酸化物質の神経保護作用が注目されている。フェルラ酸(FA)は1886年、オーストリアのBarthらによってオオウイキョウ属の *Ferula foetida* から単離・構造決定されたケイ皮酸誘導体の一つであり、比較的強い抗酸化作用を示すことが明らかになっている。本学薬学部の坂本らはFAよりも高い効果を示しかつ毒性の低いFA誘導体の探索を目的として種々の置換基を導入したFA誘導体を合成し、フリーラジカル消去能の測定を行い、消去能は大きく置換基に依存することを発見した。そこで本研究では50%のDPPHフリーラジカル消去濃度(IC₅₀)を元に、FAとその誘導体のフェノール性水酸基から水素を取ったラジカルの電子状態とIC₅₀との関連性を機械学習を用いて考察した[1]。

Ab initio 分子軌道法により、糖鎖とカウンターイオンまで含めたDNAの二重らせん構造について、量子化学計算を行って生体高分子としてバルク状態でのDNAの電子構造を求めることは古くから検討されている。B-DNAは良く知られているように、2重らせん構造を持つ高分子の一種として近似できる。様々なモデルが考えられるが、今回は最も単純なグアニン鎖とシトシン鎖について考察した[2]。

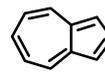
我々は、tight-binding 近似による、この無限鎖の ab initio 結晶軌道法計算を行った。ナトリウムイオンが入っているためか、最低空(LU)バンドの値が0点においてマイナスとなっていることが特徴的であった。そこで0点における電子の有効質量を計算してみるとかなり小さくなることがわかった。ホールの質量はそれほど小さな値にはならないが、電子による伝導が期待される。また最高被占(HO)バンドは他のバンドとかなり離れて存在しており、このことが何らかの物性と関係しているのではないかと推測される。

- 1) 寺前 裕之, 玄 美燕, 山下 司, 高山 淳, 岡崎 真理, 坂本 武史, “フェルラ酸のフリーラジカル消去能に関する理論的研究”, *J. Comp. Chem. Jpn*, 17, 150-152 (2018)
(日本コンピューター化学会春季年会 2018 年精選論文特集選出)
- 2) Hiroyuki Teramae, Yuriko Aoki, “Ab initio electronic structure calculation of polymononucleotide, a model of B-type DNA” *AIP Conference Proceedings* 2040, 020013 (2018)

非ベンゼン系芳香族化合物に属する七員環骨格を有するトロポノイド及び七員環と五員環が縮環したアズレノイドの化学に関する研究を行なっている。特にナフタレンの構造異性体でもあるアズレンは、 $C_{10}H_8$ のような簡単な炭化水素にもかかわらず、鮮やかな青色を持つ化合物である。この特異的な構造に興味を持ち、基礎研究の一端として下記のテーマで研究を行っている。



Tropolone

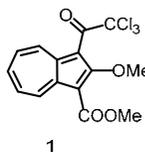


Azulene

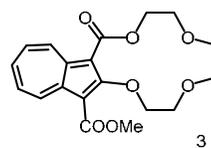
本年度の研究テーマは、

1) アズレン環を含むクラウンエーテルの合とその性状： 一般にクラウンエーテルは、様々な金属と安定な錯体を形成することから多種多様の化合物が合成され、各分野へ応用されている。一方、アズレン環を含むクラウンエーテルの報告例は殆どないことから、ここ数年、アズレノクラウンに興味を持ち、これら化合物の合成をおこなっている。

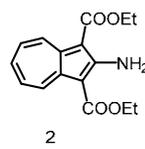
トリハロアズレン類 **1** が強塩基存在下、アルコールと反応して高収率でエステルを与えること、また C-2 位のメトキシ基が容易に反応することから、本年度、これを応用して原料 **1** を水素化ナトリウム存在下、直鎖の異なる種々のエチレングリコール類との反応により、アズレン環を含むクラウンエーテルの合成を計画し、反応条件等を検討した結果、アズレノクラウン **3** が好収率で得られた。また、活性トロポノイドから容易に誘導されるジエチル 2-アミノアズレン-1,3-ジカルボン酸 **2** との同様の反応において 2 位にアミノ基を有するアズレノクラウン **4** (Fig. X-ray) が得られることを見出した。これらの金属錯体の検討もおこなった。



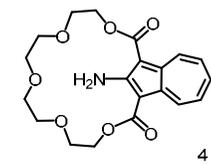
1



3



2

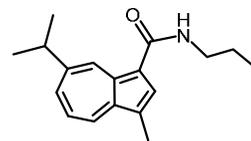


4



Fig.

2) トロポンおよびアズレン類の合成とその薬理活性の研究： アズレン類は、抗炎症・抗菌作用等の薬理活性を示すものが知られており、様々な医薬品として幅広く利用されていることから、当研究室ではアズレン類の抗炎症、抗腫瘍作用等について調べている。今年度、トリクロロアセチルアズレン誘導体を原料とし、各種アミン類との反応を詳細に検討することにより、アズレンアミド誘導体の合成法を確立した。また、合成した 21 種類の N-アルキルアミドアズレン誘導体を正常細胞 3 種と癌細胞 4 種類を用いて細胞傷害活性を測定した、高い腫瘍選択の化合物を 3 種類見出した。



5

磁性、電導性、誘電性などの電子物性、電池材料や発光材料等の機能性材料開発を目標として、安定有機ラジカル・ π 電子共役化合物及びその遷移金属錯体の合成と、それらの機能・物性解析を行っている。物性発現には分子配列が重要であるため、特に各種の分子間相互作用を活用した超分子的手法による分子配列制御に力を入れている。本年度は以下の研究を行った。

[1] 赤色蛍光を示す新規縮合イミダゾール類縁体の合成

昨年、固体で蛍光を示す新規化合物であるアセフェナントロイミダゾール類縁体 **1a-d** を異性体の混合物として得た。本年は **1** の合成法の改良と精製を行った。精製後の **1** は溶液状態で $\lambda(\text{em})_{\text{max}} = 570 \text{ nm}$ の橙色蛍光、固体状態では $\lambda(\text{em})_{\text{max}} = 648 \text{ nm}$ の赤色蛍光を示すことが分かった。

[2] ラジカル電池の活物質を指向した新規ガルピノキシル類縁体の合成

トリラジカルの前駆体としてガルピノール部位でパラ三置換したトリフェニルアミン **2** を合成した。**2** は窒素原子とフェノール性ヒドロキシ基をもつため、スペクトルの吸収極大波長は酸を加えることによって 445 nm から 602 nm に、塩基を加えることにより 599 nm に変化した。この色変化は可逆的であり、ハロフルオクロミズムを示すことがわかった。**2** のサイクリックボルタンメトリーの結果、三段階の可逆的な酸化還元波を示し、**2** の骨格が酸化還元活性であることが示された。また **2** をエーテル中 $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ で酸化して得られた化合物 **2'** は ESR スペクトルによりラジカルが存在することが示唆された。

[3] テトラアリアルポルフィリンを構成要素とする金属有機構造体 (MOF) の構築と新規機能開拓

5,15 位に 4-ピリジル基を有する 5,10,15, 20-tetraarylporphyrin **3, 4, 5** と酢酸マンガンの四水和物を用いたソルボサーマル法により $(\text{porphyrin}\cdot\text{Mn})_6(\text{solvent})_n$ の組成をもつ多孔性配位高分子を合成し、空孔に包接された溶媒分子の吸脱着について検討した。空孔内側にピリジル基が向いている **3-Mn, 5-Mn** では昇温によって包接溶媒が脱離し、空気流下に置くことにより水分子を再吸着することが TG-DTA 測定により明らかになった。一方、空孔内側にフェニル基の向いた **4-Mn** では水分子の再吸着は起こらなかった。この違いはホスト格子と水分子の水素結合の有無に起因すると考えられる。

[4] カルボキシ基を有するアリアルフェナントロイミダゾール類の包接と発光挙動

カルボキシ基を有する 4 種のアリアルフェナントロイミダゾール **6,7,8,9** を合成し、包接体結晶、アミン及び酸との共結晶を作製した。合計 12 種の結晶の構造解析に成功し、蛍光顕微分光測定を行った。これらの結果より、同じ分子でも結晶構造の違いにより発光挙動が異なる新しい系を 2 組見つけることができた。

我々は、分子構造と物性の相関を明らかにし機能性分子の設計指針を得ることで、優れた機能を持つ新たな機能性分子の創製を目的とし研究を行っている。特に、分子集合体や光機能性材料を研究対象としており、具体的には、液晶材料、ゲル化剤、増感色素、三重項発光材料に関する研究を進めている。

最近の研究成果を以下に紹介する。

1. ダブルクリック反応を基盤とした低分子オイルゲル化剤の開発

オイルゲル化剤は、身近な製品として利用されており、その一つに一般消費者向けに販売されている食用油固化剤がある。この食用油の固化剤に代表される、低分子量の化合物によるオイルゲル化剤は、低分子材料が水素結合やクーロン力、 π - π 相互作用などの分子間力による物理的な相互作用によって油（有機溶剤）をゲル化する。

一般的なオイルゲル化剤によるゲル化機構は、有機溶媒中に分散したゲル化剤が分子間力によって分子が集合体を作る時に、ファイバーと呼ばれる細い糸状の構造体を形成し、このファイバーが寄り集まることでより太いバンドルと呼ばれる構造体を形成する。このバンドルが、溶媒全体に網状のネットワーク構造を構築し網目状構造体を形成する。最終的にはこの網目構造に溶媒分子が取り込まれ動けなくなり系全体が固化（ゲル化）する。このように、一般的なオイルゲル化剤を用いて有機溶媒をゲル化する時には、加熱の工程が必要となる。

有機溶剤と低分子ゲル化剤の多くは可燃性であるため、ゲル化の手順に必要な加熱工程が発火事故の原因となりうる。そこで、このような問題を解決するために、ゲルの調整時に加熱工程を必要としないゲル化剤が求められている。加熱工程の必要がないゲル化剤は、食用油の固化における事故防止だけでなく、海上事故による原油回収や、工業的なゲルの利用範囲の拡大などが期待できる。

我々は、ゲル化能を持たない2つの原料を有機溶媒中に室温下で溶解させた後に、触媒を加えゲル化能を有する化合物を系中で生成させることで、加熱工程を必要としない新規なゲル化手法の開発に成功している。

本年は、反応点を2つに増やした、ダブルクリック反応をトリガーした加熱工程を必要としないゲル化手法の開発へと研究を展開した。ゲル化のトリガーとなるクリック反応には、様々な溶媒で反応を行う事が出来るヒュスゲン環化反応を選択した。はじめにゲル化能を持たない原料系として、4種のジアジド骨格と5種のアセチレンユニットを用い反応条件の検討を行った。生成物のゲル化能と、原料の溶媒に対する溶解性を比較し、ジアジド骨格を選択した。ジアジド骨格として **1,17-Diazido-3,6,9,12,15-pentaoxaheptadecane** を選択し、ダブルクリック反応をトリガーとするゲル化手法の開発に成功した。

弱い van der Waals 力により分子が結合した集合体，分子クラスター，は構成分子数が有限であるため気体や液体・固体とは異なった状態にあり，特有の性質をもつ。このためクラスターの物性の研究は新しい機能性材料の開発につながる可能性がある。本研究室では，数個の分子が集合した van der Waals 錯体の高分解能赤外分光を行うことにより，その構造や分子間ポテンシャルを決定している。さらに，van der Waals 錯体の構造などの量子化学計算を行い，実験結果と比較して van der Waals 錯体特有の性質について研究している。また以上の研究の応用として，最近環境問題として取り上げられてきている揮発性有機化合物（VOC）について，赤外分光などを利用した小型センサの開発を行っている。昨年行った主な研究テーマを以下に示す。

- (1) これまで測定してきた van der Waals 二量体錯体のスペクトル中に三量体のスペクトルと考えられるピークがみいだされている。このピークの吸収波数から三量体のバンドオリジンを求めたところ，三量体 $\text{CO}_2\text{-Rg}_2$ ($\text{Rg}=\text{Kr}, \text{Xe}$) 中の CO_2 の反対称伸縮振動のバンドオリジンの CO_2 単量体のバンドオリジンからの変化（シフト）は，二量体 $\text{CO}_2\text{-Rg}$ 中の CO_2 のバンドオリジンのシフトの 2 倍よりも小さいことがわかった。三量体 $\text{CO}_2\text{-Rg}_2$ 錯体中の $\text{CO}_2\text{-Rg}$ 部分の構造は二量体と全く同じであることから，この小さくなる原因は三量体中の三体力の効果であると結論できる。三体力の効果の割合は $\text{CO}_2\text{-Kr}_2$ と $\text{CO}_2\text{-Xe}_2$ でほとんど等しく，報告されている $\text{CO}_2\text{-Ar}_2$ での割合と一致することがわかった。
- (2) 大気汚染物質である揮発性有機化合物の簡便なセンサの開発を目的として，トルエンの種々のフィルタあるいはナノ孔ガラスへの吸着を小型赤外分光器や小型近赤外分光器を用いて調べ，トルエンの気相濃度を測定する方法を引き続き検討した。

1987年に有機ELが開発され、その後、Ir錯体の燐光発光の優位性が報告されたことを契機に、錯体の発光に関する研究が注目を集めている。これまでに報告されている研究例の多くはRu(II), Ir(III)などの d^6 かPt(II)などの d^8 の電子配置を有する金属種であった。一般に、 $d-d$ 遷移は可視領域に吸収をもつため発光材料としては不利になる。本研究室では、 $d-d$ 遷移による失活を抑制することで発光量子収率を向上させるべく、 d^{10} 金属種に着目した発光性錯体とこれを用いたデバイス開発を研究テーマの一つとし、中でもコスト的優位性の高いCu(I)を用いた錯体の開発に着手している。今期は、一価のハロゲン化銅を中心骨格とし、イソシアニドを配位子とするヨウ化銅(I)錯体を合成し、本錯体が可逆的な発光性メカノクロミズム特性を有することを見出した¹⁾。また、ハロゲンを臭素に変更した臭化銅(I)錯体を合成し²⁾、本錯体はサーモクロミズムを示す他^{3,4)}、可逆的な発光性メカノクロミズム特性を明らかにした⁵⁾。さらに、キャスト法による薄膜化に成功し、今後のデバイス展開に繋がる成果を得た⁶⁾。

本年は上記の研究テーマに加え、開放性空洞にゲスト分子を非共有性結合で挟み込む分子ピンセットに関する研究を新たに立ち上げた。分子ピンセットはゲスト分子を挟み込む力として、水素結合、疎水性相互作用、ファンデルワールス力、 $\pi-\pi$ 相互作用のいずれか又は任意の組み合わせが知られている。今回、3'-Aminofluorene-9-spiro-5'-imidazolidine-2',4'-dithioneを新規合成し、この分子がこれまでに知られていない $\pi-\pi$ 相互作用によりベンゼンを挟み込んだサンドイッチ構造をとることを明らかにした⁷⁾。今後、新規合成した分子をメチレン鎖で繋ぐことにより、分子ピンセットの形状にしていく計画である。

- 1) Synthesis and characterization of Cu(I) isocyanide complexes exhibiting reversible luminescence, T. Hayakawa, et. al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **57**, 081601, 2018.
- 2) 臭化銅(I)イソシアニド錯体の発光特性, 南山知花, 他, 第65回応用物理学会春季学術講演会, 2018年3月.
- 3) 銅(I)イソシアニド錯体における発光特性の温度依存性, 南山知花, 他, 第79回応用物理学会秋季学術講演会, 2018年9月.
- 4) 銅(I)イソシアニド錯体のサーモクロミズム, 南山知花, 他, 第35回電気学会「センサマイクromaシンと応用システム」シンポジウム, 2018年11月.
- 5) Reversible Luminescent Properties of Copper(I) Bromide Complex with External Stimulus Response, C. Nanzan, et. al., ICRINT 2018.
- 6) PVA Film Containing CuI Complex Exhibiting Mechanochromism, T. Sakata, et. al., ICRINT 2018.
- 7) Reversible Formation of an Inter-molecular Compound Comprising 3'-Aminofluorene-9-spiro-5'-imidazolidine-2',4'-dithione and Benzene, Y. Takazawa et. al., *Heterocycles*, **96** (12), pp. 2087-2095, 2018.

当研究室は、フラーレン・金属内包フラーレンなどのナノカーボン系を扱った構造有機化学・有機結晶・錯体化学の研究を行っている。

当研究室の特徴としては、フラーレン及び金属内包フラーレンの合成を行えるところであり、未知のフラーレン及び金属内包フラーレンの合成・単離・構造解析をメインテーマとしている。フラーレン及び金属内包フラーレンは、それらの特異な構造を反映して、従来の炭素材料にはない優れた化学的及び物理的特性を有している。これまで、このような特性を化学修飾により制御することが盛んに検討されてきた。当研究室では、フラーレン及び金属内包フラーレンを配位子と考え、フラーレン含有金属錯体の構造・物性に興味を持っている。

最近の研究成果を以下に紹介する。

1. C₇₀ポルフィリン共結晶における多形

2017年度、La内包フラーレン含有の抽出液からフラーレンC₇₀の単離を行い、単離したC₇₀と5-(4-Pyridyl)-10,15,20-triphenylporphyrin (pyPP)との共結晶化を行い、単結晶X線構解析により、C₇₀-pyPP共結晶の結晶構造を明らかにした。2018年度、引き続き、C₇₀-pyPP共結晶の構造について再検討したところ、結晶化条件の違いにより、多形が得られた。

2. ルイス酸を用いた空フラーレンの効率的な分取の検討

フラーレンおよび金属内包フラーレンの単離は、これらが含有するすすから有機溶媒により加熱還流で抽出し、HPLCを用いて行うが、HPLCのステップでは多段階のステップを踏む必要がある。2018年度は、ルイス酸を用いた金属内包フラーレンと空フラーレンの分離を行い、空フラーレン含有成分の分析を進めた。その結果、ルイス酸を使用しない場合と比べて、1回のHPLC分離において、C₆₀、C₇₀だけでなくC₇₆、C₇₈、C₈₂、C₈₄の空フラーレンにおいても単離を達成することができた。

これらの研究は、城西大学における「平成29-30年度学長所管研究奨励金」の助成を受けたものである。

単一ナノ粒子および単一分子の発光現象に関する基礎的研究を展開している。具体的には、(1) コア型半導体量子ドットの発光特性に対する溶媒効果, (2) コア-シェル型半導体量子ドットの発光点滅現象の評価とその制御, (3) 単一分子蛍光プローブによる高分子材料の微視的構造の評価。今年的主要研究成果を以下に要約する。

(1) 通常量子ドットは幅の狭い発光スペクトルが特長とする。対照的に幅の広い白色発光スペクトルを示す量子ドットは、当研究室で実績のある室温合成 CdSe コア型量子ドットで観測される。昨年度、反応溶媒(*n*-trioctylphosphine; TOP)の純度を常用のもの(90%)よりも高純度(97%)のものに変更した。90%TOP に含まれる青色発光不純物を避けるためである。その結果、量子ドットの発光量子収率が 0.10 以下に低下した(従来 0.20 以上)。常用の 90%TOP に含まれる不純物が量子ドット表面を適度に被覆することで高い発光収率を与えることが知られている。このため、97%TOP では発光収率が低下した。今年、昨年に続いて 97%TOP でも高い発光効率を得るための条件を探索した。その結果、主に反応温度の制御により、97%TOP を用いて、90%TOP で得られた当研究室の最高値(0.23)を大きく上回る発光収率(0.40)を達成した。

(2) コア-シェル型単一量子ドットの発光点滅の制御では、昨年、量子ドットをある種の高分子にドーピングして点滅を調べた。その結果、～秒程度の OFF 時間が減少し、ビデオレート(36 ms)以下の OFF 時間が観測された。これは～秒程度の長い OFF 状態が抑制されていることを意味し、他の高分子との比較から使用した高分子に含まれる官能基の特性に依存している可能性がある。この結果から、OFF 状態が量子ドットのカチオン化に起因することも踏まえ、今年、高分子に加え、ある種の還元剤を添加することによって発光点滅が抑制できるという着想を得た。実際、還元性を有する物質を添加することにより点滅を抑制できる可能性を示す結果が観測された。

(3) 単一分子を蛍光プローブとして、ガラス転移温度 T_g 近傍における高分子薄膜のナノ構造の不均一性を解析している。昨年、粘度感受性蛍光色素(Cy3)を用いて T_g が室温付近(315 K)にあるポリ酢酸ビニル(PVAc)の薄膜を用いて蛍光輝点の蛍光強度の温度依存性を調べ、 T_g 近傍の温度で特異的な蛍光強度変化を発見した。今年、上記のデータを詳細に解析した結果、特異的な蛍光強度の変化は 2 次相転移に特有の現象、すなわち高分子構造が大きなゆらぎを示しつつ協同運動しているという結論に到達した。また、Cy3 以外の粘度感受性色素を用いても、PVAc では Cy3 と同様の結果が得られた。さらに高分子としてポリ(メタクリル酸エチル: PEMA, $T_g=65$ °C)、粘度感受性色素 Cy3 を用いた。PVAc と同様に 2 次相転移に特有の現象が観測された。

軽量で低コストの色素増感太陽電池 (DSSC) とペロブスカイト (Pv) 太陽電池は典型的なメソスコピック太陽電池であり、住宅建材やモバイル機器への応用が期待されている。我々は、(1) 柔軟なプラスチック基板上への高効率で長寿命かつ大面積の DSSC の構築、および (2) 鉛フリーで色彩可変の Pv 太陽電池の開発という目標を掲げ、面積 $\sim 0.25 \text{ cm}^2$ でエネルギー変換効率 $\eta \sim 10\%$ のセルの安定供給、分子レベルでの発電機構の解明、およびレーザーと電子顕微鏡による評価技術の確立に取り組んでいる。

1. 粒径の異なる TiO_2 ナノ粒子 P90 と P25 を分散させた高品質ペーストを用いて、3 層または 4 層構造の DSSC の作製と評価を行っている。また、異なる結晶構造と粒径分布を持つ 3 種類の TiO_2 サブマイクロ粒子による光反射層を設けて、実効光路長を伸ばした。作製した光電変換電極は、薄膜の厚みとともに短絡電流密度 J_{sc} が上昇し、8% を超える η が得られている。次に、電流密度-電圧 (J - V) 曲線、交流インピーダンススペクトル、等価回路の理論式を用いて内部抵抗を推定し変換効率への影響を考察した。解析に基づき、電解液の充填面積を考慮した直列抵抗を用いることで J - V 曲線が精度よく再現されることが分かった。さらに内部抵抗値の温度依存性を測定した。
2. Pv 太陽電池の層構成と成膜法を検討した。まず、緻密 TiO_2 層の作製時に電気炉で高温焼成することで TiO_2 層が FTO 基板に強く結合され高効率の電子輸送が実現された。第二に、 TiO_2 懸濁液中の P90 と P25 の組成や分散剤の添加量を変えることで、多孔質 TiO_2 層の間隙率を高めて粒径 50 nm 以上の Pv 結晶が入り込んで三次元的な接合を形成できるようになった。第三に、 PbI_2 溶液の塗布後に基板を真空中に静置し溶媒を除去することで、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ との反応による結晶成長を促進できた。第四に、厚み約 40 nm の金接点を真空蒸着することで Pv 結晶の破壊や劣化を防止できた。以上 4 つの改善の結果、 J_{sc} が格段に上昇し 5% を超える変換効率を得られた。
3. ストリークカメラと分光器から構成されるレーザー励起時間分解発光分光装置を用いて、太陽電池の光電変換電極の過渡発光を観測した。導電性ガラス基板上に TiO_2 や ZrO_2 のナノ粒子薄膜を作製し、D- π -A 型の有機色素を吸着させたものを試料とした。得られた発光の時間減衰曲線を理論式に適合させ、デコンボリューションでレーザーパルス幅の効果を除き、一重項励起状態からの失活過程 (TiO_2 伝導帯への電子注入、分子内振動再分配、内部転換など) に関する反応速度定数を決定した。
4. ヨウ化鉛ペロブスカイト中のエキシトンの拡散長およびその寿命を測定する目的で、エキシトンからの光ルミネッセンスを時間分解分光法によって観測した。試料は石英基板、緻密酸化チタン薄膜、ペロブスカイト結晶、電荷輸送物質の 4 層構造を持つ。電荷輸送物質として、電子輸送体のスピロ化合物またはホール輸送体の PCBM を用いると、780nm 付近の発光の寿命が 1ns 程度まで減少した。この結果から、平面ヘテロ接合面でエキシトンが電子とホールに分離すると予想された。

本研究室では、有機分子、高分子、金属など様々な材料からなるナノ発光材料を調製し、一方で顕微分光やイメージングを駆使した材料の構造・機能評価を行っている。加えて、発光分光イメージングとラマン分光イメージングを可能とするレーザー顕微鏡システムを基盤としてタンパク質結晶や分子結晶など、高次に複雑な構造を持つ物質の新規機能探索や構造形成過程の解明に取り組んでいる。以下に示すのは昨年の研究テーマの例である。

(1) フォトンアップコンバージョンのためのコアシェル構造ナノ粒子開発

太陽電池やバイオイメージングにおいて可視・赤外光のような低エネルギー光を利用する試みがあり、その中でも二種類の分子間エネルギー移動に基づく三重項-三重項消滅フォトンアップコンバージョン(TTA-UC)とよばれる技術が注目されている。研究室では内部でこの TTA-UC を実現するナノ粒子の開発に取り組んでいる。具体的にはマトリックスとして高分子ナノ粒子を調製し、内部に TTA-UC を発現する二種類の分子を導入する。昨年はこの高分子ナノ粒子をコアシェル構造とし、粒子コアに分子を溶媒に分散した状態で封入することに成功した。このため粒子内部で分子が容易に拡散でき、結果として分子衝突が生じやすくなり、TTA-UC の効率を高めることに成功した。

(2) 多孔質材料としてのタンパク質結晶の機能解明

タンパク質の結晶はタンパク質が秩序だった三次元構造となることで配列した nm サイズの細孔を持つ、一種のナノポラス材料である。タンパク質結晶は体積の大部分を溶媒である水分子が占め、溶媒チャンネルを通じて溶液から分子をとりこむことが可能であり、我々はこれを新規ナノ反応容器としての展開をめざしている。本研究ではニワトリ卵白由来リゾチームを使用し、結晶への蛍光色素分子導入過程および結晶と分子の相互作用を顕微蛍光分光により調べた。その結果、結晶への分子導入に要する時間および結晶内での分子の凝集は結晶フレームワークと導入分子との電荷により決まることを明らかにした。また、導入分子の大きさによっては結晶内に導入できないことも明らかにした。今後は多孔質材料としてのタンパク質の性質をホスト-ゲスト化学の観点からも明らかにしてゆきたい。

(3) ラマン散乱顕微分光イメージング装置の分子結晶への応用

研究室ではラマン散乱分光イメージング顕微鏡を開発し保有している。本装置はとりわけ分子結晶評価、わけても結晶相スクリーニングへの応用を見据えてのものである。昨年は有機金属として知られる電荷移動錯体結晶であるペリレン-TCNQ 共結晶の結晶多形とラマン散乱スペクトルの関係性を調べ、それを基にして共結晶形成時の熟成時間と結晶多形との相関を明らかにした。

生命は細胞より構成されているが、その細胞は、遺伝情報に基づき作出されるタンパク質などの様々な生体分子から構成される複合系であると考えられる。当研究室では、核磁気共鳴分光法を中心とした分光学的解析手法を用いて、タンパク質の立体構造解析を行うとともに、遺伝子工学的手法により作出した人工タンパク質の機能解析を行うことで、タンパク質の構造機能相関を解明することを目的とした研究を進めている。現在は、特に、細胞による物理的環境因子（金属、温度、pHなど）のセンシングと細胞内遺伝子発現制御に関する一連のタンパク質間の情報伝達機構についてアプローチを行っている。以下に最新の教育・研究成果を紹介する。

平成30年度は1)教育・研究環境整備と2)教育・研究テーマの実施の2つの面で、以下の成果を上げた

- 1-1 ポリクロナール抗体の力価などを ELISA 法により免疫学的に定量評価するためのシステムを導入した。
- 1-2 無細胞タンパク質合成系の一つとしてタバコ培養細胞を用いることを計画し、タバコ培養細胞の恒常的継代システムを構築した。
これらの研究環境整備を行うとともに、2)については以下の成果を上げた。
- 2-1 腹腔内投与法ならびに尾根部筋肉内投与法により作製した GFP,RFP に対するマウスポリクロナール抗体の力価を ELISA 法で解析すること、2つの抗体作製手法における抗体生成効率の差を定量的に評価した。
- 2-2 真核生物由来のタンパク質の構造機能相関解明研究を進めるための研究手法として、タバコ培養細胞からの抽出物を用いた無細胞タンパク質合成系の確立を計画した。理化学研究所より入手したタバコ培養細胞を用いて、本研究室における細胞の安定的継代培養条件の決定を行うとともに、培養細胞よりタンパク質合成成分のみを含み液胞成分を含まない細胞質画分の分離技術の検討を行った。
- 2-3 藍色細菌 *Anabaena variabilis* 由来の低温耐性関連タンパク質 RbpD の大腸菌大量発現系を用いて、安定同位体標識 (^{15}N or $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$)を行った RbpD を作出し、700MHz FT-NMR を用いて測定した複数の多次元 NMR スペクトルをもとに、主鎖の NMR シグナルの帰属を行い、RbpD の二次構造解析を7割程度完了した。本成果をもって、修士2年生1名が本学修士の学位を取得した。
- 2-4 ヤエヤマサソリ由来の昆虫選択性を示す毒素 LaIT2 の立体構造解析を行うための、LaIT2 の大腸菌における大量発現系の構築と、その精製手法の確立に成功した。本成果をもって、修士2年生1名が本学修士の学位を取得した。

主に魚類や甲殻類などの水圏生物の系統・進化や遺伝的集団構造について、分子系統的、分子集団遺伝学的手法を用いて研究している。主に、形態学的、生態学的、生理学的、生活史などの形質を進化学的に比較するために不可欠な、信頼性の高い系統関係の推定や、生物多様性の保全や絶滅危惧種の保護・再生の基礎データとなる遺伝的集団構造の解明、環境 DNA を用いたモニタリング手法の開発などを行っている。本年度の研究例を以下に紹介する。

- (1) アベサンショウウオの分布とその生息域におけるアメリカザリガニの侵入調査
アベサンショウウオは絶滅危惧種 IA 類に分類されている貴重な両生類であり、保護活動が盛んである。本種の生息域が積雪地帯であるため、モニタリングには労力や時間を要する。これを改善すべく、本年度は新たに、リアルタイム PCR を用いた分析手法を開発した。
- (2) 環境 DNA を用いた福井県越前市における希少淡水魚類の分布・動態調査
環境 DNA を用いて、福井県越前市に生息するトミヨ、ナガレホトケドジョウの分布・動態調査を行うための PCR マーカーを作製し、非侵襲的なモニタリング手法を開発した。
- (3) 北海道に生息するフクロアミ *Archaeomysis articulata* の遺伝的集団構造
ミトコンドリアゲノムのCOI遺伝子領域を解析したところ、大部分の地域でハプロタイプ共有が見られたが、わずかながら遺伝的に分化している集団が見られた。
- (4) LAMP 法を用いたシキシマフクロアミの種判別マーカーの作製
日本に生息する5種のフクロアミのうち、シキシマフクロアミはナミフクロアミ、コクボフクロアミと同所的に生息する海域が存在する。このような海域で得られたフクロアミを簡易判別するために、LAMP法を用いた種判別マーカーを開発した。
- (5) 環境 DNA 分析を用いたカミツキガメ検出系の確立
特定外来生物に指定されているカミツキガメの被害は全国規模であるが、千葉県印旛沼水系では特に大量繁殖し問題となっている。カミツキガメの生息域や生物量を把握し駆除に役立てるための、環境 DNA 分析を用いたリアルタイム PCR によるカミツキガメ検出系を確立した。
- (6) 環境 DNA を用いたゲンジボタルの地域個体群判別法の検討
環境 DNA を用いたゲンジボタルの地域個体群の判別をするために、PCR—電気泳動法、リアルタイム PCR 法、LAMP 法と 3 つの方法でマーカーを作製し実用性を検討した。LAMP 法は、環境 DNA の劣化の程度と検出感度との関係で失敗に終わったが、前者 2 つではいくつかの地域個体群を他から識別できるマーカーが作製できた。これらを組み合わせることにより、ホタルの幼虫が生息する川の水を汲んで分析することによりゲンジボタルの他の地域個体群の侵入を検出する方法を確立することができた。

魚類の卵膜および孵化時にそれを分解する孵化酵素に関する研究に、今年度は以下のテーマで取り組んだ。

(1) ゼブラフィッシュ factor in germline alpha (figla) 遺伝子の機能解析

factor in germline alpha (figla) は哺乳類では透明帯(zona pelucida) 遺伝子の発現を制御する転写因子として知られている。魚類でも figla 遺伝子が卵巣で発現することは知られているが、哺乳類と同様に卵膜を構成する ZP 遺伝子の発現に関与しているかは不明であった。そこで本研究室では近年 CRISPR-Cas9 法によるゲノム編集によって figla 遺伝子ノックアウト(KO)ゼブラフィッシュの作成を目指していた。その結果 figla KO 個体は全てオスになることを突き止めた。本年度は、完成した figla KO ゼブラフィッシュを用いて、生殖腺におけるさまざまな遺伝子発現を野生型と比較し、figla KO がオスになる原因の解明を目指した。

(2) アユ付着糸構成タンパク質の同定

アユが産卵した卵は水草や岩に付着する。これは、卵膜の外側に付着糸という構造物があるためで、このような卵は付着卵に分類される。卵膜が zpna pelucida (ZP) タンパク質で構成されていることはよく知られているが、付着糸がどのようなタンパク質で構成されているかは不明であり、その解明を目指した。アユの付着糸を単離精製し、トリプシン消化後のペプチド断片を、LC-MS によって解析した。得られた配列をもとにデータベースを探索したところ、アユの付着糸コラーゲン type I であることが示唆された。

第 12 回 理学研究科物質科学専攻修士論文発表会

2018 年 2 月 21 日(水)

会場 1-118 教室

いぬづか たくや
犬塚 拓哉

「色素増感太陽電池における光反射層および多層薄膜の違いによる発電効率の比較」

指導教員 見附 孝一郎 教授

さいとう しょうへい
齋藤 昇平

「アズレンイミド誘導体の合成とその薬理活性」

指導教員 若林 英嗣 教授

さいとう たつや
齋藤 達也

「eDNA を用いたゲンジボタルの地域個体群判別法の確立」

指導教員 石黒 直哉 准教授

たなか ゆうき
田中 邑樹

「藍色細菌 *Anabanera variabilis* 由来 RNA 結合タンパク質 RbpD の多次元 NMR 分光法による二次元構造解析」

指導教員 森田 勇人 教授

たむら まいき
田村 真生

「ヤエヤマサソリ由来ペプチド毒素 LaIT2 の構造機能相関解析に向けた大腸菌大量発現系の構築」

指導教員 森田 勇人 教授

のぐち かよ
野口 佳代

「アセナフト及びアセフェナントロイミダゾール類の合成・構造・光物性」

指導教員 秋田 素子 教授

ますおか ゆうた
増岡 優太

「酸化亜鉛ナノロッドによる色素増感太陽電池の電気化学的評価」

指導教員 見附 孝一郎 教授

わたなべ こうへい
渡邊 晃平

「酸化物半導体に吸着した有機色素分子の過渡発光分光」

指導教員 見附 孝一郎 教授

2018年度 理学研究科物質科学専攻修士課程中間発表会

2018年12月22日(土)

会場 1-118 教室

1. 高次 La 内包フラレンの探索とその構造解析
[構造化学研究室]
あだち たくや
安達 拓哉
2. ポルフィリンを構成要素とした多孔性配位高分子の合成と機能開拓
[合成有機化学研究室]
あだち ひろき
安達 裕紀
3. モノクロナール抗体の効率的作出に向けた2種類の抗原投与法の比較
[分子分光学研究室]
いざわ たくや
伊澤 卓弥
4. 藍色細菌 *Synechococcus elongates* sp. PCC 7942 由来新規 sHSP Orf7.5 の大腸菌による大量発現系構築
[分子分光学研究室]
おおみや ながゆき
大宮 永行
5. 臭化銅(I)錯体の外部刺激応答特性
[機能材料分析研究室]
なんざん ちか
南山 知花
6. 青色発光イリジウム錯体の分子設計と発光特性に関する研究
[有機機能化学研究室]
わかつき だいすけ
若槻 大輔

平成 30 年度 サイエンスビジネスセミナー

坂戸キャンパス(1-125 室) 13 時 30 分より

- 9 月 29 日 長澤 浩 (株) 環境レジリエンス代表取締役社長
「企業における新規開発と研究・開発者の使命—シーズ型開発とニーズ型開発」
- 10 月 6 日 柳川 滋 シグマ光機 (株) 営業部エリアマネージャー
「仕事は”見て盗む”のススメ」
- 10 月 13 日 山本 軍次 住友化学 (株) 国際アグロ事業部 登録部
「企業の研究開発における研究者のあり方～農薬登録の現場に活かされる科学的センス～」
- 10 月 20 日 岡野 明 味の素 (株) イノベーション研究所上席研究員
「オープンイノベーションの時代～食品とアミノサイエンスの研究開発～」
- 10 月 27 日 高見 知秀 工学院大学教授
「科学者にとってベンチャーとは? ～いくつかのベンチャー企業に係わった立場から～」
- 11 月 10 日 天野 剛志 合同会社 BeCellBar 代表社員
「基礎と応用の垣根を越えて～閃きと融合力で新しい社会を～」
- 11 月 17 日 萩原 隆, 一般財団法人石油エネルギー技術センター調査情報部主任研究員
「知的財産の基礎」
- 11 月 24 日 田村 真理子 (元) 日本科学未来館サイエンスコミュニケーター, 神奈川大学非常勤講師
「高校教師から科学コミュニケーターへ」
- 12 月 1 日 山下 明 (株) NTT ファシリティーズ総合研究所エネルギー技術本部バッテリー技術部課長, EHS&S 研究センター上級研究員
「情報通信を支える蓄電池」
- 12 月 8 日 日和 佳正 越前市 産業環境部農政課 農村活性グループ主幹
「研究職公務員が地域社会に果たす役割」
- 12 月 15 日 西 克也 (株) ベストシステムズ代表取締役
「科学技術計算とビジネス」

- 1 2月22日 鈴木 伸明 水産庁 増殖推進部 研究指導課 研究管理官
「震ヶ関の研究者たち：研究成果を産業政策へ」
- 1月 12日 西澤 誠治 (株)分光計測 代表取締役
「ベンチャー企業のビジネスとは」
- 1月 26日 礒山 翔, 全薬工業 (株) 研究開発センター 創薬研究部
薬理研究室
「製薬メーカーにおける研究職の役割」

海外研究渡航報告

分子設計部門・情報科学研究室 教授 寺前 裕之

渡航先 : Computational Chemistry Symposium in International Conference of Computational Methods in Science and Engineering (CC Symposium in ICCMSE 2018),

14 - 18 April 2018 at The Met Hotel, Thessaloniki (Greece)

講演題名 : Ab Initio Electronic Structure Calculation of Polymononucleotide, a Model of B-type DNA

上記のように、CC Symposium in ICCMSE2018 が 2018 年 3 月 14 日(水)~3 月 18 日(日)の 5 日間にわたりテッサロニキのメッツホテルにて開催された。今回は通算して 14 回目にあたる。この国際会議は、科学と工学における計算手法に関するもので、そのなかの主要なシンポジウムとして計算化学シンポジウムがあり、こちらに参加した。この国際会議のオーガナイザーは University of Peloponnese の Theodore E. Simos 教授、シンポジウムのオーガナイザーは三重大の Taku Onishi 助教が、また International Scientific Committee は日本大の Tokuhei Sako 准教授が務められた。

本国際会議は毎年ギリシャにて開催されている。対象としては会議の題名にあるようあらゆる計算機の応用分野である。今回も 100 名以上の参加と口頭発表があった。

14 日はレジストレーションが行われた。15 日は 8 時 50 分より開会セレモニーが行われた。続いて口頭発表が Lunch および Dinner をはさんで、22 時 30 分まで行われ、その途中、21 時 30 分より 22 時 30 分までポスター発表が行われ、1 日目は終了した。

16 日は 8 時 20 分より開始し、Paul Mezey 教授の Honorary Lecture が 20 時 30 分より 21 時 20 分まで行われた。報告者はこの日の 15 時 45 分からのセッションで招待講演を行った。また Computational Chemistry Symposium (16) Biology II の座長を務めた。

17 日は午前中が発表、午後は Excursion で夜は Conference Dinner であった。Excursion は神域として有名なオリンポス山であった。

18 日は午前中が発表で、午後からは free discussion であったが、早朝より帰国の途についた。次回の会議は 2019 年の 5 月 14 日より 17 日まで会場はロードス島に移動して行われる。次回も招待されているので参加する予定である。

海外研究渡航報告

分子設計部門・情報科学研究室 教授 寺前 裕之

渡航先：16th International Congress of Quantum Chemistry, 18-23 June 2018,
Menton, France

講演題名：Ab Initio Study of Polymononucleotide as a Model of B-type DNA

第16回量子化学国際会議が、2018年6月18日(月)～23日(土)の6日間にMentonにて開催された。Mentonはフランスのコートダジュールの西端に位置し、モナコとイタリアの中間にありフランスの真珠と呼ばれている。Niceなどに比べるとずっと観光客も少なくのんびりしている。量子化学国際会議は複数回このMentonで開催されている。

本学会はその名前の通りに、量子化学と計算科学の基礎理論から応用までが興味の対象であるが、やや基礎理論寄りであって、応用面はあまり重視されていない印象がある。会議は3年置きに開催されており、報告者は前々回のボルダーで開催された第14回に続いての参加となった。第15回は北京で行われたが日程の都合上参加できなかった。今回のオーガナイザーはフランス・モンペリエ大学のOdile EISENSTEIN教授である。

今回の会議は、口頭発表はすべて招待講演で30分講演が45件あった。前々回に比べて口頭発表はかなり増加しており、個々の発表時間が45分から30分に短縮されてしまったのは少し残念であるが、パラレルセッションの数を増やすのも限界があるので、やむを得ないと思う。

報告者は20日のポスターセッションB124で、Ab Initio Study of Polymononucleotide as a Model of B-type DNAと題して、B型DNAのモデルとしてのポリモノヌクレオチドの非経験的理論計算の結果について発表を行った。

海外での会議に参加すると、海外の方と親交を深められるというのは当然であるが、意外に日本の方とも親交が深まるというもある。また約1週間も雑事を離れ研究の事だけに専念できる機会というのは、自己の研究ポテンシャルが一段と上がる気がする。今後も機会を見て海外の学会には参加を続けていく必要があると考えている。

海外研究渡航報告

分子設計部門・情報科学研究室 教授 寺前 裕之

渡航先：7th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,
30 June - 1 July 2018 at Strasbourg University (France)

講演題名：Ab initio calculation of polymononucleotide, a model of B-type DNA

上記の日仏ワークショップが、2018年6月30日(土)、7月1日(日)の2日間にわたり Strasbourg University (ストラスブール大学)にて開催された。今回は通算して7回目にあたるが、報告者は第5回に続いて参加した。この国際ワークショップのオーガナイザーはストラスブール大学の Alexandre Varnek 教授、フランス国立科学研究センターの Didier Rognan 博士、東京大学の船津公人教授が務められた。ストラスブールはドイツ国境と近いフランスアルザス地方の中核都市で町並みは世界遺産にもなっている。フランクフルトからバスで3時間ほどの距離にある。

本ワークショップは日本およびフランスの量子化学計算分野の交流を目的として行われており、2年毎に日本・フランスの交互開催となっている。対象としては量子化学のみならず、計算化学一般の基礎理論から応用までを対象としている。今回の会議では、口頭発表が20分講演で17件でそのうち7件が日本側、ポスター発表は1時間で18件でそのうち4件が日本側であった。

30日はレジストレーションに続き、開会セレモニーが行われた。Varnek 教授の挨拶が行われ。その後、東大の船津教授の Novel method proposing chemical structures with desirable profile of activities based on chemical and protein spaces と題した発表を皮切りに9件の口頭発表が17時15分まで行われ、その後、17時30分より19時30分までポスター発表が行われた。報告者は16時10分より”Ab initio calculation of polymononucleotide, a model of B-type DNA”という題名で口頭発表を行った。ポスター発表終了後に Welcome Party が会場内で行われ、1日目は終了した。

1日は、Varnek 教授による Towards universal maps of chemical space と題した発表から始まり、12時10分まで口頭発表が行われた。Lunch 後に Cultural Program として有名なストラスブール大聖堂を訪れ聖堂内の様々なモニュメントについて Lecture を受けた。19時よりコンファレンスディナーが restaurant "La Victoire"で行われた。終了したのが23時を過ぎた頃であった。以上で全てのプログラムが終了した。

海外研究渡航報告

分子設計部門・合成有機化学研究室 教授 秋田 素子

渡航先：International Conference on Recent Innovations in Nano Science and
Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名：Organic Radical – Transition Metal Magnetic Coordination Polymers

上記のように、ICRINT2018が2018年12月26日(水)～12月28日(金)の3日間にわたり Myanmar の University of Yangon において開催された。今回が第一回目の会議であり、2018年2月に実施された日本学術振興会(JSPS)のさくらサイエンスプログラムによるヤンゴン大学の若手教員と城西大学理学部の学術・研究交流をさらに発展させるために開催されたものである。城西大学からはティティレイ教授、石川教授、尾崎教授、阪田教授、森田教授と秋田の計6名の教員が参加し、招待講演を行った。また大学院生2名が口頭発表を、1名がポスター発表を行った。参加学生にとっては初めての国際会議参加で、発表申込・要旨提出・プロシーディング作成等の準備、そして当日の発表と大変だったと思うが、このICRINT2018参加で非常に充実した貴重な経験をしたように見受けられた。

本国際会議の内容は物理学、化学、生命科学、材料科学と多岐にわたり、ヤンゴン大学を始めとするミャンマー国内の大学、日本からは城西大学、さらにタイ、カンボジア、韓国、アメリカとアジアを中心に6カ国110件発表があった。若手研究者の口頭発表が多く、活潑な議論が行われていたのが印象的である。なお本会議には、ティティレイ教授がCo-Chairとして、尾崎教授がHonorary Chairとして、阪田教授、森田教授、秋田がInternational Advisory Committeeとして開催に携わっている。

学術発表は主に27日(木)に行われた。同日開催されたバンケットには在ミャンマー日本大使、ヤンゴン大学学長も参加された。ヤンゴン大学で教鞭をとられる先生には日本で学位を取られた方も多く、非常になごやかな雰囲気での会が進行した。翌28日には大使公邸に招かれ、ミャンマーと日本のこれからの交流について語りながらの昼食会に参加した。

2泊3日という慌ただしい日程ではあったが、日本とミャンマーの学術・文化交流について考え、また若い研究者の熱気を感じることができ、たいへん刺激を受けた渡航であった。この経験を今後の研究、教育活動に活かして行きたいと思う。

海外研究渡航報告

物質構造部門・分子集合体科学研究室

教授 尾崎 裕

渡航先 : International Conference on Recent Innovations in Nano Science and
Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名 : Three-Body Effects on the CO₂ Vibrational Frequency in van der Waals
Trimers CO₂·M₂ (M =Kr, Xe, N₂) Investigated by Infrared Diode Laser
Spectroscopy

ミャンマーのヤンゴン大学と城西大学の共催で開かれた上の国際会議に Honorary
Chair として参加した。Opening Remark を述べ、上の講演題目で研究発表を行った。
研究内容に関する討論や、今後のヤンゴン大学と城西大学理学部の交流方法について意
見交換を行ない、交流に関しては日本大使館とも意見交換を行った。

海外研究渡航報告

物質構造部門・機能材料分析研究室 教授 阪田 知巳

渡航先：International Conference on Recent Innovations in Nano Science and
Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名：PVA Film Containing CuI Complex Exhibiting Mechanochromism

2018年12月26日(水)～12月28日(金)の3日間にわたり国際会議 (ICRINT 2018) がヤンゴン大学 (ミャンマー) にて開催された。本国際会議は最先端のナノサイエンス・ナノテクノロジーにフォーカスした内容に関するものである。今回は、「日本・アジア青少年サイエンス交流計画；通称さくらサイエンスプラン」の一貫として、本学との協賛で行われたことを特徴とする。これは、2018年2月18日(日)～2月27日(火)の10日間にわたるヤンゴン大学から本学への来訪を受けての今回の訪問となったものである。

本学からは教員6名、修士学生3名が参加し、当研究室からはM1の学生と報告者の2名が出席した。本報告者は持ち時間20分の招待講演であり、本学生は初の海外でのポスター発表となったことは特筆すべき点である。本報告者、本学生とも発光性メカノクロミズム現象の可逆性に関する内容を発表するとともに、両名とも会議開催までにブローシヤディングス(4頁)を投稿し、現在、採否に関して結果待ちの状況にある。

参加者動向としては、開催地であるミャンマーが主であるが、それ以外に、日本、米国、韓国、タイなどの地域からの参加があり、やはりアジア中心の国際会議といった印象を受けた。また、ミャンマーという国柄のためか、女性研究者が極めて多く驚かされた。

修士学生3名は、会議の期間中、ヤンゴン大学の研究施設訪問や研究室見学などを通してヤンゴン大学の若手研究者と交流をもてたことは彼らにとっても良い経験となったことと思う。また、レセプションパーティーでは、現地の大使にお会いすることができただけなく、ヤンゴン大学学長も交えて本国際会議をアピールできたことは次回以降の開催に向けての弾みとなるものと考え。今後、本会議が開催されるはこびとなれば、当研究室からはもとより大学院生には是非参加させたい国際会議であると感じた。

海外研究渡航報告

物質機能部門・ナノ計測化学研究室 教授 石川 満

渡航先：International Conference on Recent Innovations in Nano Science and Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名：Disclosure of Collective Motion in Polymer above Glass Transition Temperature by Single Molecule Spectroscopy

本学化学科(物質科学専攻)とミャンマーのヤンゴン大学・物理学科の若手教員との初めての交流が、SAKURA Exchange Program in Science (Japan-Asia Youth Exchange Program in Science) Sponsored by JST (2018年2月18-27日)に実施された。これを契機として上記の国際会議が本学との共催で開催された。共催に至る過程で尽力頂いた関係各位に感謝申し上げます。

当専攻からは口頭発表教員6件、修士学生2件、ポスター発表修士学生1件を実施した。研究分野は生命科学から核物理学まで多岐にわたり、ミャンマー(含むヤンゴン大学以外)、日本(本専攻)に加え、韓国、カンボジア、タイの大学からの参加もあり約120件もの多彩な研究課題が発表された。

報告者は、高分子材料を対象として蛍光単一分子プローブを用いて、従来、相転移ではないと考えられていたガラス転移で、二次相転移を特徴づける現象、すなわち高分子の集団運動がガラス転移温度で観測されたという趣旨の発表を実施した。ヤンゴン大学のPho Kang学長を含め2,3人から数件の質問を受けた。Pho Kang学長は北海道大学で学位を取得した経歴をもち、発表者の研究内容とも共通のキーワードをもつ研究を実施した経験もあり、高い関心を示していた。今回特筆すべきは、修士2年次学生が英語で口頭発表したことが挙げられる。国内ではポスター発表を日本語で実施する機会にほぼ限定されているのに対して、得難い体験をしたと云えよう。このような機会が学生の研究面の成長を促進するために極めて有効であることを再認識する機会となった。

一方、今後もこのような交流を継続するための課題を以下に列挙する。

- (1) 資金：特に本学で開催する場合。外部資金の獲得が必須である。
- (2) 交流の実を上げる：今回の会議は比較的規模が大きく研究課題が多岐にわたり、相互に発表内容を理解することは容易ではなかった。会議の規模を小さくし話題を限定して、かつ大学院生主体の会議にするべきか。
- (3) 研究発表の様式：今回気になったことはヤンゴン大学側の発表様式が、必ずしも聴衆の理解を配慮するものではなかったことである。この改善は容易であろう。

海外研究渡航報告

物質機能部門・ナノ機能化学研究室 准教授 宇和田 貴之

渡航先：10th Asian Photochemistry Conference,
16 - 20 December 2018 at Howard Civil Service International Hous, Taipei
(Taiwan)

講演題名：Absorption and fluorescence microspectroscopic study of protein crystals
as nanoporous materials

台湾・台北で開催された 10th Asian Photochemistry Conference は、アジア諸国の光化学の研究者の集まりである Asian Photochemistry Association が主催するものであり、今回で 10 回目となる。もともと日本が主導のものであったが、現在では中国や韓国、インドを始めとした他の国の成長も著しく、またオーストラリアなどオセアニア地域の国も巻き込んだ大規模なものになっている。科学の発展には国内での切磋琢磨と国際的な競争・協調が必要不可欠であり、この会議がその後者のよい機会となっていることが伺える。

この国際学会では口頭発表の殆どが招待講演であり、一般参加での口頭発表は数に制限があるのだが、今回は幸運にも多くの発表申し込みの中から私のものが選ばれた。発表は近年私が進めているタンパク質結晶を多孔質材料およびナノ反応材料と見立てた内容である。国内学会での反響も高いものであり、今回口頭発表に選ばれたのはその効果であると考えている。久々の英語口頭発表であり、かつ精査されたものの一つということで緊張していたが、発表そのものはうまくできた。特にレーザー照射により結晶内で金イオンの還元が高速で起きる報告は聴衆に高いインパクトを与えたようであった。発表後の議論も熱を帯び、タンパク質結晶と導入分子との相互作用についての質問が来たが、こちらも対応したデータを持っていたのでそれを示し納得してもらえた。総じて上々の発表であったが、英語に関する瞬発力が以前と比べて落ちているように思え、このような発表の機会を継続的に持つことが重要と感じた。

他の参加者の発表の傾向としては、フォトクロミック材料や金属錯体など光機能材料の研究は日本が現在も国際的に先導していると感じた。一方で太陽電池やパイオイメーシングなど応用寄りの研究に関しては台湾や香港、シンガポールでの研究が盛んなようである。また、おそらく海外の研究者はさほど「光化学」の枠の中のみで研究を行っていないように思え、分野の中に安住する傾向のある日本の研究者は強みを他分野に繋げる必要があると感じた。

海外研究渡航報告

生体物質科学部門・分子分光学研究室

教授 森田 勇人

渡航先：XXVIIIth International Conference on Magnetic Resonance in
Biological System (ICMRBS-2018)
19 - 24 August 2018 at University College Dublin, Dublin (Ireland)

講演題名：Solution structural analysis of novel small heat shock protein Orf7.5 from
Synechococcus elongatus PCC 7942.

上記のように、ICMRBS2018が2018年8月19日(日)~8月24日(金)の5日間にわたりアイルランドのUniversity College Dublin (UCD)にて開催された。子ども大学の実施委員長であったことから19日から23日までの4日間参加したが、その間に発表は予定通り行い、参加者との十分な質疑応答を行う時間を確保することができた。ICMRBSは2年ごとに行われている国際会議で、核磁気共鳴分光法により生体試料を中心とする高分子化合物の構造・物性に関する解析技術開発ならびに、生体分子の構造機能相関解析に関する研究成果を世界中の研究者が討議する場としてノーベル賞を受賞したビュートリッヒ博士をはじめとして著名な研究者が参加してきている。また、会議の開催は各国のNMR研究の中心となる大学が幹事校を務め、運営にはあたってはBruker、JEOL(かつてはVarianも)といった主要NMR開発メーカーが全面的にバックアップしている。2018年は、NMRだけでは構造を決定するのが困難な比較的分子量の大きなタンパク質や膜結合タンパク質の構造解析に関する新手法として、クライオ電顕と高磁場NMRを組み合わせた新規解析手法の理論と測定技術に関する講演が主要議題であり、半数のPlenary Lectureがこの議題に関するものであった。今回の発表内容に関しては、分子シャペロンの研究を行っている研究者の方々とsmall heat shock proteinの機能進化の観点から見た構造の保存性と多様性について頭語を行うことができた。現時点で、当該研究は目的タンパク質の立体構造を解明するには至っていないが、2年後までには完了することが可能であることから2020年のICMRBS(G. Wagner博士等が主催でBostonで開催予定)には立体構造情報に基づく解析結果を発表する予定である。

また、本会議で得た知見をもとに、本学における高磁場NMRの生体高分子に関する教育研究へのより先端的かつ孤立的利用法についても検討・提案を行っていきたい。

海外研究渡航報告

生体物質科学部門・分子分光学研究室

教授 森田 勇人

渡航先：International Conference on Recent Innovations in Nano Science and
Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名：Heavy-metal stress response in cyanobacterium, *Synechococcus elongatus*
PCC 7942.

上記のように、ICRINT2018が2018年12月26日～12月28日の3日間にわたりヤンゴン大学で開催された。本国際会議は、2018年にサクラサイエンスでヤンゴン大学より城西大学へ若手教員が訪問したことをベースに先端科学の教育・研究を行っている教員の相互交流を活性化させることを目的としてヤンゴン大学の主催、城西大学の共催で開催されたものである。今回は、理学部教員を中心に訪問を行い、尾崎先生を代表に、石川、ティティレイ、森田、阪田、秋田の5教員ならびに修士課程在籍中の学生3名が **Invited Speaker** として参加し発表を行った。ヤンゴン大学からの参加者は、物理系教員を中心としていたため、材料系だけでなく核物理関連の発表も多く我々にとってミャンマーの核科学開発の進展を知る上で新鮮な内容のものも多かった。また、2日目の懇親会では、ヤンゴン大学学長、在ミャンマー日本大使がお見えになり、大学間交流だけでなく国際交流としての位置づけも感じられる会議であった。また、3日目は、日本側教員全員とヤンゴン大学学長ならびにヤンゴン大学理学部長が日本大使公邸で大使ならびに書記官の方々と食事を共にする機会に恵まれた。そこでは、城西大学とヤンゴン大学との交流を大使館としてもサポートしていきたい旨の方針が示され、また、ヤンゴン大学学長からも支援の内容に対する希望が示された。

一方、学生3名の発表では、全員が初めての国際会議での英語による発表であったにもかかわらず、自分の研究内容を理解してもらうよう努力する姿勢がみられる発表であり、国際人としてのこれからの発表に強い期待を持たせるものであった。全体としてマテリアルサイエンス中心の発表が多くバイオサイエンスの発表内容が少なかった中で、ヤンゴン大学からの参加者から積極的な質問があり、ヤンゴン大学の若手研究者の研究に対する情熱と関連分野の研究に対する理解への積極性が感じられた。最後に、本国際会議は毎年末に何らかの形で継続して行うことが検討事項となった。

大学院生海外研究渡航報告

生体物質科学部門・分子分光学研究室 GCM1705 田中 邑樹

渡航先：International Conference on Recent Innovations in Nano Science and
Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名：Secondary structural analysis of the cyanobacterial RNA-binding protein
RbpD from cyanobacterium *Anabaena variabilis* with heteronuclear
multi-dimensional NMR spectroscopy

私は今回、国際学会に参加し口頭発表して、チャレンジすることの大切さについて身をもって学びました。それはポスター発表と口頭発表を選べる状況で、先生の後押しと田村君のやる気に触発され口頭発表に挑戦したことが、今までの自分では考えられない選択だったからです。

まず大変だったことは準備です。国際会議で発表するにあたり初めて英語で論文を作成しました。読んだことはあっても自分で書くということは大変難しく、また自分は英語が苦手ということもあり、初めて書けたものは読めたものではありませんでした。先生をはじめ、一緒に行く田村君の力を借りてできた論文に自分の名前が載っていることが嬉し恥ずかしい気持ちになりました。

次に発表のための準備でも、初めて聞く人がわかりやすい説明や技術面での専門的な知識を英語でまとめることに苦勞しました。15分で自分の研究について相手に理解してもらえるような発表内容と、自分の低い英語能力でも伝わるようなプレゼンテーションを意識して試行錯誤し、先生のご指導の下、形となり嬉しかったです。



図 1, Shwedagon Pagoda にて

発表当日はミャンマー中を太陽が燦々と照り付ける天気でした、一つの教室で行われました。12月とは思えない天気でしたが、それとは別の意味で汗をかいていました。いざ発表してみると読み誤りや焦りからペースが乱れ発表時間が長引いてしまいました。また質問に対して思わず日本語で返答してしまいましたが、完全ではないまでも一部だけでも正確に英語での質問を聞き取ることができました。このことから、初志貫徹して最後まで口頭発表を行うことで、発表練習を含めた準備の過程で英語のコミュニケーション能力がすこしではありますが、短期間に自分で実感できる

程度に成長したことを感じることができました。

今回の経験を通して、困難だと思ふ挑戦にどのように努めるかで、もし力及ばず結果にならないときも、そのプロセスは自信につながる事がわかりました。修士でこのことを学べた今回の学会発表はかけがえのない経験です。参加できて本当に良かったです。同時にこのような経験を得る機会が、後輩の修士生やこれから修士に入学する後輩たちにも与えられることを強く希望します。参加するに辺り指導教員の森田先生をはじめ、一緒にミャンマーに行った諸先生方、現地の先生、学生さん、そして同じ研究室の田村君に大変お世話になりました。ありがとうございました。

大学院生海外研究渡航報告

生体物質科学部門・分子分光学研究室 GCM1706 田村 真生

渡航先：International Conference on Recent Innovations in Nano Science and
Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名：Solution structural studies of insecticidal peptide LaIT2 from Japanese scorpion, *Liocheles australasiae*, with heteronuclear multidimensional NMR spectroscopy.

人生初の海外渡航，右も左も分からない，更に英語も得意でない，そんな不安を心に抱きながらヤンゴン国際空港に到着しました。現地では，思いつく英語をただ羅列していましたが，現地の方々は親切に聞いてくださり，私はこの四日間なに不自由なく生活することができました。私はこの渡航において大きく成長でき，糧となったと思える経験が二つあります。

一つ目は，なんとといっても，初めての国際学会参加で口頭発表の機会を得たことです。本来であれば，国内学会でのポスターや口頭発表の経験を積んでから国際学会の発表となるところを，指導教員の森田先生からのご指導ご支援のおかげで発表できたことは，他大学とは言え博士課程の進学を考えている自分にとっては，かけがえのない経験となりました。発表の際の音量や質問に対する受け答えなどまだまだ未熟な点が多いことも分かり，今後の発表に向けて改善努力を重ねていきたいと思いました。また，同時にこのような貴重な体験を我々だけでなく，後輩の人達も経験する機会が定期的に与えられるようになれば良いなと強く感じました。

二つ目は，ヤンゴン市内視察のために案内して下さった修士学生と友達になり，以前 SAKURA Science で城西大学に来ていた研究員の方々と再会できたことです。学会での口頭発表と異なり，相手が何を話してくれるのか，何を訪ねているのかを相手の表情や，話の中から読み取るのは，単なる単語の知識だけでなく，相手の気持ちや話の流れや展開からその先を読み取る能力（＝語学能力）が必要であることを体験することができました。最初は，発音の違いから聞き取るのが難しかった英語も，数日彼らと一緒に過ごし，お昼なども一緒にするなかで，次第に聞き取ることができるようになり，教科書や論文で読む英語と日常生活の中でコミュニケーション手段として使う英語とが大きく違うことが分かりました。また，彼らとコミュニケーションがとれるようになってくるにつれて，異文化の人との交流の楽しさも感じ取ることができました。

また，ヤンゴン大学の図書館は歴史ある書物など多数あり，勉学に励むには最も効率の

よい場所だと思いました。ほとんどの書物は英語でしたので私にとっては英語の勉強にもなると思います。研究室にいた学生達は皆研究熱心で、「あなたは何の分野の研究をしているのか?」「あなたは何の研究をしているのか?」と質問が多かったのも印象的で、私も負けていられないと感化されました。

最後になりますが、ヤンゴン大学との国際交流の場を設けてくださった尾崎先生、石川先生、ティティ先生、秋田先生、阪田先生、発表当日まで面倒見てくださった森田先生に深く感謝しております。大変お世話になりました。ありがとうございました。

大学院生海外研究渡航報告

物質構造部門・機能材料分析研究室 GCM1805 南山 知花

渡航先：International Conference on Recent Innovations in Nano Science and
Technology 2018 (ICRINT2018)
26 - 28 December 2018 at University of Yangon (Myanmar)

講演題名：Reversible Luminescent Cu(I) Complex Exhibiting Mechanochromism

今回の学会では、女性の講演者が多く、聴講に来ていた方の多くも女性でした。日本での学会では男性の方が多いので少し驚きました。ミャンマーでは大学を卒業しても就職先は多くないため、男性のほとんどが大学進学をせず就職し、女性の多くが大学へ進学すると言う話を伺いました。こういった点から文化や考え方の違いを感じられたことは良い経験になったと思います。また、国内の学会では英語でやり取りをする機会があまりないため、英語でしかやり取りのできない今回のような学会はとても良い経験となりました。空いた時間にはヤンゴン大学内の研究室を見学することができ、有意義な時間を過ごすことができました (図 1 参照)。



図 1. 研究室の様子



図 2. ポスター会場の様子

また、夕食会では日本大使と話をする貴重な経験をさせていただきました。本学会に参加できたことで様々な方と交流することができました。しかし反省点として、もう少し自分から進んで色々な人と会話ができればよかったと思います。今回、ポスター発表という形で学会に参加しましたが (図 2 参照)、学会運営の点でポスター発表には発表時間が設けられていなかった点が課題としてあげられます。この点については後日、ティティレイ先生と話し合い、運営委員会の方々に改善点として提起していただく予定です。次回は堂々とした姿勢でオーラル発表に臨みたいと思います。初めて国際学会に参加して改めて自身の英語力の低さを痛感しました。今後も引き続き精進していきたいと考えます。

研究論文

Ab initio electronic structure calculation of polymononucleotide, a model of B-type DNA

Hiroyuki Teramae, Yuriko Aoki

AIP Conference Proceedings **2040**, 020013 (2018).

Practical Training in Simple Hückel Theory: Matrix Diagonalization for Highly Symmetric Molecules and Visualization of Molecular Orbitals

Shin-ichi Nagaoka, Tatsunobu Kokubo, Hiroyuki Teramae, Umpei Nagashima

J. Chem. Educ., **95**, 1579-1586 (2018).

DNA の電子状態計算

寺前 裕之, 青木 百合子

J. Comp. Chem. Jpn, **16**, 157-159 (2017). 日本コンピューター化学会秋季年会 2017 年精選論文特集選出, 2018 年出版

フェルラ酸のフリーラジカル消去能に関する理論的研究

寺前 裕之, 玄 美燕, 山下 司, 高山 淳, 岡崎 真理, 坂本 武史

J. Comp. Chem. Jpn, **17**, 150-152 (2018). 日本コンピューター化学会春季年会 2018 年精選論文特集選出

In Vitro Anti-tumor Activity of Azulene Amide Derivatives

T. Wada, R. Maruyama, Y. Irie, M. Hashimoto, H. Wakabayashi, N. Okudaira, Y. Uesawa, H. Kagaya, and H. Sakagami

International Journal of In Vivo Research, **32**, 479-486 (2018).

In Vitro Anti-tumor Activity of Alkylaminoguaiazulenes

M. Uehara, H. Minemura, T. Ohno, M. Hashimoto, H. Wakabayashi, N. Okudaira, and H. Sakagami

International Journal of In Vivo Research, **32**, 541-547 (2018).

Synthesis and characterization of Cu(I) isocyanide complexes exhibiting reversible luminescence

T. Hayakawa, C. Nanzan, M. Hashimoto, H. Teramae, T. Sakata
Jpn. J. Appl. Phys., **57**, 081601 (2018).

Reversible formation of an inter-molecular compound comprising 3'-aminofluorene-9-spiro-5'-imidazolidine-2',4'-dithione and benzene

Y. Takazawa, T. Yamamoto, M. Suzuki, T. Sakata
Heterocycles, **96**, 2087-2095 (2018).

mt DNA CO II 遺伝子領域の解析によるゲンジボタルの養殖個体と野生個体の地域個体群の判定

齊藤 達也, 石黒 直哉
DNA 多型, **26**, 64-68 (2018).

Habitat of a native freshwater shrimp *Paratya improvisa* in Iruma River system in Saitama Prefecture and the invasion status of alien species

Ohkashiwa, *Neocaridina* spp.
Ishiguro, N., Tamura, N., Ohkashiwa, M.
DNA鑑定, **10**, 51-58 (2018).

書籍

「ゲル化・増粘剤の使い方, 選び方 事例集」

橋本 雅司

第2章 オイルゲル化剤の開発と応用事例, 第2節 2成分オイルゲル化剤の開発,
pp 137-144, 技術情報協会 (2018年).

学会発表

Ab Initio Electronic Structure Calculation of Polymononucleotide, a Model of B-type DNA

Hiroyuki Teramae, Yuriko Aoki

ICCMSE2018 (Thessaloniki, Greece) Invited

2018年3月

フェルラ酸のフリーラジカル消去能に関する理論的研究

寺前 裕之, 玄 美燕, 山下 司, 高山 淳, 岡崎 真理, 坂本 武史

日本コンピュータ化学会 2018年春季年会 (東京) 2018年6月

Ab Initio Calculation of Polymononucleotide, a Model of B-type DNA

Hiroyuki Teramae, Yuriko Aoki

5th French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry,
(Strasbourg) Invited 2018年6月

Ab Initio Study of Polymononucleotide as a Model of B-type DNA

Hiroyuki Teramae, Yuriko Aoki

16th International Congress of Quantum Chemistry (Menton, France) 2018年
6月

モデルDNAのHartree-Fock計算(2)

寺前 裕之, 青木 百合子

分子科学討論会 2018 (福岡) 2018年9月

フェルラ酸の抗酸化作用の置換基効果に関する理論的研究

寺前 裕之, 玄 美燕, 山下 司, 高山 淳, 岡崎 真理, 坂本 武史

第41回ケモインフォマティクス討論会 (熊本) 2018年10月

結晶軌道法によるモデルDNAの電子状態計算

寺前 裕之

第二回琉球大学計算科学シンポジウム (沖縄) 基調講演 2018年10月

アズレンアミド誘導体の合成とその薬理活性

齋藤 昇平, 今成 伽奈, 若林 英嗣, 奥平 准之, 坂上 宏

日本化学会 第 8 回 CSJ 化学フェスタ 2018 (東京) 2018 年 10 月

ソルボサーマル法による一次元ナノチャンネルを有する金属ポルフィリン超分子の合成と構造決定

安達 裕紀, 秋田 素子

第 8 回 CSJ 化学フェスタ 2018 (東京) 2018 年 11 月

固体で赤色蛍光を示すアセナフトイミダゾール誘導体の合成・構造と発光挙動

野口 佳世, 宇和田 貴之, 秋田 素子

第 8 回 CSJ 化学フェスタ 2018 (東京) 2018 年 11 月

ガルビノキシル部位でパラ三置換したトリフェニルアミンの合成

浅子 雄太, 秋田 素子

第 12 回有機 π 電子系シンポジウム (滋賀) 2018 年 12 月

Organic Radical – Transition Metal Magnetic Coordination Polymers

Shoya Sato, Motoko Akita

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) Invited 2018 年 12 月

フェニルトリアゾールを発光性配位子として有するイリジウム錯体の合成と物性

若槻 大輔, 武井 美久, 室賀 雅貴, 橋本 雅司, 今野 英雄, 小池 和英

日本化学会 第 98 回春季年会 (船橋) 2018 年 3 月

可視光応答型レドックス触媒による炭素ラジカル種の共役付加・環化反応

長尾 駿一, 伊藤 謙之介, 水口 貴章, 唐木 文霞, 平山 重人, 橋本 雅司, 藤井 秀明

日本薬学会 第 138 年会 (船橋) 2018 年 3 月

可視光応答型レドックス触媒による炭素ラジカル種の共役付加・環化反応

長尾 駿一, 伊藤 謙之介, 水口 貴章, 唐木 文霞, 平山 重人, 橋本 雅司, 藤井 秀明.

2018 年光化学討論会 (西宮) 2019 年 9 月

深青色発光を示すイリジウム錯体の合成と物性

若槻 大輔, 武井 美久, 室賀 雅貴, 橋本 雅司, 今野 英雄, 小池 和英.

2018 年光化学討論会 (西宮) 2019 年 9 月

OLED のための深青色発光イリジウム錯体の開発

若槻 大輔, 橋本 雅司, 今野 英雄, 小池 和英.

日本化学会 第 8 回 CSJ 化学フェスタ 2018 (東京) 2018 年 10 月

塩素系有機溶媒中のメタノール-ピリジン水素結合会合体の水素結合エネルギー

二見 能資, 尾崎 裕, 尾崎 幸洋

第 12 回分子科学討論会 (福岡) 2018 年 9 月

Three-Body Effects on the CO₂ Vibrational Frequency in van der Waals Trimers CO₂-M₂ (M =Kr, Xe, N₂) Investigated by Infrared Diode Laser Spectroscopy

Yasushi Ozaki

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) Invited 2018 年 12 月

臭化銅 (I) イソシアニド錯体の発光特性

南山 知花, 高木 衛, 早川 拓弥, 阪田 知巳

第 65 回応用物理学会春季学術講演会 (東京) 2018 年 3 月

銅 (I) イソシアニド錯体における発光特性の温度依存性

南山 知花, 高澤 頼昌, 阪田 知巳

第 79 回応用物理学会秋季学術講演会 (名古屋) 2018 年 9 月

銅 (I) イソシアニド錯体のサーモクロミズム

南山 知花, 高澤 頼昌, 阪田 知巳

第 35 回電気学会「センサマイクロマシンと応用システム」シンポジウム (札幌) 2018 年 11 月

Reversible Luminescent Properties of Copper(I) Bromide Complex with External Stimulus Response

C. Nanzan, Y. Takazawa, M. Suzuki, H. Teramae, H. Miyamae, T. Sakata

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) 2018年12月

PVA Film Containing CuI Complex Exhibiting Mechanochromism

T. Sakata, C. Nanzan, Y. Takazawa

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) Invited 2018年12月

Temperature dependence of anisotropic transient conductivity of a La@C_{2v}-C₈₂(Ad) crystal

Michio Yamada, Satoru Sato, Wookjin Choi, Shu Seki, Tsuneyuki Abe, Mitsuaki Suzuki, Yutaka Maeda, Shigeru Nagase, Takeshi Akasaka

The 54th Fullerene-Nanotube-Graphene General Symposium (Tokyo) 2018年3月

Anisotropic magnetic properties of an endohedral metallofullerene for molecular location sensing

Yuta Takano, Ryo Tashita, Mitsuaki Suzuki, Hiroshi Imahori, Takeshi Akasaka

256th ACS National Meeting (Boston) 2018年8月

C₆₀還元体を用いたメタノフラーレン合成

山納 真人, 坂本 航大, 鈴木 光明, 山田 道夫, 前田 優

第29回基礎有機化学討論会 (東京) 2018年9月

La@C_s(6)-C₈₂とNi(OEP)の共結晶化

安達 拓哉, 田中 貴大, 鈴木 光明, 山田 道夫, 前田 優, Zdenek Slanina, 永瀬 茂, 赤坂 健

第29回基礎有機化学討論会 (東京) 2018年9月

Fluorescence image analysis of single molecules at polymer/substrate interfaces

Ishikawa Mitsuru, Takahashi Taihei, Hayashi Yuichiro, Uwada Takayuki

日本化学会第 98 春季年会（船橋）2018 年 3 月

タンパク質結晶への分子の浸透拡散過程の蛍光分子イメージング

宇和田 貴之, 高橋 郁也, 石川 満

日本化学会第 98 春季年会（船橋）2018 年 3 月

多孔質材料としてのタンパク質結晶の吸収・蛍光・顕微分光

宇和田 貴之, 河野 航平, 石川 満

2018 年光化学討論会（西宮）2018 年 9 月

蛍光単一プローブを用いた高分子薄膜のガラス転移温度近傍における動的挙動の観測

石川 満, 高橋 泰平, 宇和田 貴之

2018 年光化学討論会（西宮）2018 年 9 月

Disclosure of collective motion in polymer above glass transition temperature by single molecule spectroscopy

Mitsuru Ishikawa, Taihei Takahashi, Yu-ichiro Hayashi, Takayuki Uwada

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) Invited 2018 年 12 月

プラズモン加熱による液-液相分離の観測と機構解明

相原 一生, 池田 優也, 宇和田 貴之, 古部 昭広, 橋本 修一

2018 年光化学討論会（西宮）2018 年 9 月

Absorption and fluorescence microspectroscopic study of protein crystals as nanoporous materials.

Takayuki Uwada

10th Asian Photochemistry Conference (APC 2018) (Taipei) 2018 年 12 月

Transient emission spectroscopy of dye molecules adsorbed on metal oxide semiconductor

Koichiro Mitsuke, Kohei Watanabe, Kohei Takayanagi, Akira Yoshida

日本化学会第 98 春季年会（船橋）2018 年 3 月

Exciton dissociation to charge carriers in perovskite solar cells

Yuki Saito, Koichiro Mitsuke

34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (Kyoto) 2018 年 6 月

Impedance analyses for the interface of nanostructures in dye-sensitized solar cells

Ryohei Watai, Takumu Fujiya, Koichiro Mitsuke

34th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (Kyoto) 2018 年 6 月

ペロブスカイト接合面におけるエキシトンの電荷分離

齋藤 祐希, 出島 康琢, 東村 綾乃, 見附 孝一郎

第 12 回分子科学討論会（福岡）2018 年 9 月

Solution structural analysis of novel small heat shock protein Orf7.5 from *Synechococcus elongatus* PCC 7942.

Hayato Morita, Nagayuki Omiya, Natsuko Ishikawa, Naoki Tanaka, Hidenori Hayashi, Hitoshi Nakamoto

XXVIIIth International Conference on Magnetic Resonance in Biological System (Dublin, Ireland) 2018 年 8 月

藍色細菌 *Anabaena variabilis* 由来低温耐性関連タンパク質 RbpD の多次元 NMR 分光法による二次構造解析

田中 邑樹, 佐藤 直樹, 林 秀則, 森田 勇人

第 57 回 NMR 討論会（北海道）2018 年 11 月

ヤエヤマサソリ *Liocheles australasiae* 由来の抗菌活性を有するペプチド毒素 LaIT2 の多次元 NMR 分光法による構造機能相関解析

田村 真生, 十一 浩典, 宮下 正弘, 宮川 恒, 森田 勇人

第 57 回 NMR 討論会（北海道）2018 年 11 月

マウスによる効率的モノクローナル抗体生産系の確立

伊澤 卓弥, 長 紘斗, 矢嶋 康太, 森田 勇人

第 41 回日本分子生物学会年会 (横浜) 2018 年 11 月

藍色細菌由来新規 small Heat Shock Protein Orf7.5 の溶液構造研究

大宮 永行, 石川 奈都子, 田中 直紀, 林 秀則, 仲本 準, 森田 勇人

第 41 回日本分子生物学会年会 (横浜) 2018 年 11 月

Heavy-metal stress response in cyanobacterium, *Synechococcus elongatus* PCC 7942.

Eugene Hayato Morita, Shelake Rahul Mahadev, Hidenori Hayashi

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) Invited 2018 年 12 月

Secondary structural analysis of the cyanobacterial RNA-binding protein RbpD from cyanobacterium *Anabaena variabilis* with heteronuclear multi-dimensional NMR spectroscopy.

Yuuki Tanaka, Naoki Sato, Toshihiko Sugiki, Hidenori Hayashi, Eugene Hayato Morita

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) 2018 年 12 月

Solution structural studies of insecticidal peptide LaIT2 from Japanese scorpion, *Liocheles australasiae*, with heteronuclear multidimensional NMR spectroscopy.

Maiki Tamura, Hironori Juichi, Masahiro Miyashita, Hisashi Miyagawa, Eugene Hayato Morita

International Conference on Recent Innovations in Nanoscience & Technology 2018 (ICRINT 2018) (Yangon, Myanmar) 2018 年 12 月

LAMP 法を用いた環境 DNA による在来種-外来種群判別法の開発

石黒 直哉

第 10 回 LAMP 研究会 (東京) 2018 年 2 月

LAMP法を用いた淡水エビの在来種－外来種群判別法の確立

齊藤 達也, 石黒 直哉

第1回環境DNA学会 東京大会 (東京) 2018年9月

環境DNA分析にも有効なスナヤツメ隠蔽種判別法の確立

石黒 直哉, 高山 晃徳, 金澤 光

DNA鑑定学会第11回大会 (横浜) 2018年11月

環境DNAを用いたアベサンショウウオ (*Hynobius abei*) の分布とその生息域におけるアメリカザリガニの侵入調査

日和 佳政, 鈴木 裕士, 藤長 裕平, 石黒 直哉

日本DNA多型学会第27回学術集会 (松江) 2018年12月

環境DNAを用いたゲンジボタルの地域個体群判別法の確立と比較

齊藤 達也, 石黒 直哉

日本DNA多型学会第27回学術集会 (松江) 2018年12月

硬骨魚類の多様な孵化機構～卵膜遺伝子と孵化酵素遺伝子の共進化～

佐野 香織

日本動物学会関東支部会 一般公開シンポジウム (東京) 2018年3月

魚類の進化過程における孵化酵素重複遺伝子 LCE の新規機能獲得

原島 捺美, 佐野 香織, 今井 慶介, 安増 茂樹

日本動物学会関東支部会 (東京) 2018年3月

卵膜遺伝子とその硬化機構の進化～両生類・下位条鰭類・真骨魚類～

佐野 香織, 大西 洋, 長澤 竜樹

ユニークな少数派実験動物を扱う若手が最先端アプローチを勉強する会 (東京)
2018年8月

論文抄録

Ab initio electronic structure calculation of polymononucleotide, a model of B-type DNA

Hiroyuki Teramae, Yuriko Aoki

AIP Conference Proceedings **2040**, 020013 (2018)

As an attempt at the electronic structure calculations of the B-type model-DNA, (poly-(guanine) poly-(cytosine)) double helix including sodium atoms as counter cations, hereafter referred as (poly-(dG)poly-(dC)), double helix model polymer is performed by means of *ab initio* Hartree-Fock crystal orbital method adapting the screw axis-symmetry which results in great reduction of computational efforts. All sugar backbones and ions are included in the calculations. At the level of 6-31G basis sets, energy band structures were calculated for the polymers with and without sugar and sodium phosphate and found that the difference is very large when excluding the sodium phosphate. We also calculated the four single helix polymers in order to compare these band structures with the double helix polymononucleotide. The difference is not small especially for the guanine-cytosine polymer.

[https://doi.org/ 10.1063/1.5079055](https://doi.org/10.1063/1.5079055)

DNA の電子状態計算

寺前 裕之, 青木 百合子

J. Comp. Chem. Jpn, 16, 157-159 (2017) (日本コンピューター化学会秋季年会 2017 年精選論文特集選出, 出版は 2018 年)

As an electronic structure calculation of the B-type model-DNA, the calculation of (poly-(guanine) poly-(cytosine)) model polymer is performed by means of the ab initio crystal orbital method adapting the screw axisymmetry which results in great reduction of computational efforts. All sugar backbones and sodium phosphate are included in the calculations. Energy band structures are calculated at the 6-31G level. For a comparison, the calculation without sodium phosphate is also performed. The resultant energy band structure is very different from that of the original one and it should be concluded that the alkali phosphate is necessary to describe the electronic structure of model-DNA.

フェルラ酸のフリーラジカル消去能に関する理論的研究

寺前 裕之, 玄 美燕, 山下 司, 高山 淳, 岡崎 真理, 坂本 武史

J. Comp. Chem. Jpn, **17**, 150-152 (2018) (日本コンピューター化学会春季年会 2018 年精選論文特集選出)

Ferulic acid is known to have strong antioxidant properties. In the present study, we have investigated the electronic structures of Ferulic acid and its radical extracting the hydrogen atom from its phenolic hydroxyl group. We have discussed the relation of the results with the radical scavenging activity using the DPPH reagent measured by Xuan et al. We have found that the total energies of Ferulic acid derivatives and its radical species made from removing the hydrogen radical from the phenolic hydroxy group have the relation with the IC50 values. The orbital energies of the radical species also have the relation with the IC50 values. The deep learning study with the random forest model suggests that the contribution from α -SOMO and α -LUMO energies is important.

Practical Training in Simple Huckel Theory: Matrix Diagonalization for Highly Symmetric Molecules and Visualization of Molecular Orbitals

Shin-ichi Nagaoka, Tatsunobu Kokubo, Hiroyuki Teramae, Umpei Nagashima

J. Chem. Educ., **95**, 1579-1586 (2018)

At an advanced stage of learning quantum chemistry, undergraduate students usually encounter simple Huckel-molecular orbital (HMO) theory, whose primitive approach gives very useful insight into the electronic structure of π -conjugated molecules. However, on one hand, computational HMO software, when programmed without using molecular symmetry, does not necessarily output chemically reasonable shapes of degenerate molecular-orbitals in benzene. On the other hand, separately inputting the molecular symmetry into the HMO calculation is mathematically redundant (i.e., duplicate information input). To solve this problem, in this study, a Microsoft Excel macro for obtaining reasonable HMOs of highly symmetric molecules such as benzene was developed. Furthermore, two other Excel macros for readily drawing quantitative contour plots of HMOs were created as studentfriendly tools. The practical training in simple HMO theory proposed in the present report using these three macros will be very useful for undergraduate teaching of quantum chemistry in terms of clearly showing the theoretical concept.

Synthesis and characterization of Cu(I) isocyanide complexes exhibiting reversible luminescence

Takuya Hayakawa, Chika Nanzan, Masashi Hashimoto, Hiroyuki Teramae, Tomomi Sakata

Jpn. J. Appl. Phys., **57**, 081601 (2018).

We describe the synthesis of Cu(I) isocyanide complexes, namely, the [CuI(PDI)] (PDI = 1,4-phenylene diisocyanide) dimer and [Cu₂I₂(PPh₃)₂(PDI)₂] (PPh₃ = triphenylphosphine), which exhibit weak orange (quantum yield $\Phi = 1\%$) and intense pale blue ($\Phi = 13\%$) emissions in the solid state under UV irradiation, respectively. Upon grinding, the luminescence of the [CuI(PDI)] dimer does not change, whereas that of [Cu₂I₂(PPh₃)₂(PDI)₂] changes to a weak olive ($\Phi = 4\%$) emission. Treatment of the ground [Cu₂I₂(PPh₃)₂(PDI)₂] with an organic solvent and subsequent drying restore its original pale blue emission, which is indicative of reversible luminescent mechanochromism. Moreover, both the [CuI(PDI)] dimer and [Cu₂I₂(PPh₃)₂(PDI)₂] exhibit thermochromism, i.e., their emissions change to a very intense green emission at 77K. In particular, time-dependent density functional theory calculations reveal that [Cu₂I₂(PPh₃)₂(PDI)₂] could be assigned to luminescence induced by halide-to-ligand charge transfer.

DOI: 10.7567/JJAP.57.081601

Reversible Formation of an Inter-molecular Compound Comprising 3'-Aminofluorene-9-spiro-5'-imidazolidine- 2',4'-dithione and Benzene

Yorimasa Takazawa, Tatsuo Yamamoto, Mitsuaki Suzuki, Tomomi Sakata

Heterocycles, **96** (12), 2087-2095 (2018).

We describe the synthesis of 3'-aminofluorene-9-spiro-5'-imidazolidine-2',4'-dithione through the reaction of fluorene-9-spiro-4'-thiazolidine-2',5'-dithione with hydrazine, and subsequent investigation of the interactions of the synthesized spirocycle-containing imidazolidine-dithione with organic solvents. Recrystallization from a solvent containing benzene led to the formation of an inter-molecular compound consisting of 3'-aminofluorene-9-spiro-5'-imidazolidine-2',4'-dithione and benzene in a 2:1 ratio through both intramolecular N-H \cdots S hydrogen bonds and additional weak N-H \cdots π interactions. The trapped benzene molecule was reversibly released by dissolution of the inter-molecular compound in acetone and subsequent concentration under reduced pressure at room temperature, and also by heating at 130–150 °C.

DOI: 10.3987/COM-18-14007

Habitat of a native freshwater shrimp *Paratya improvisa* in Iruma River system in Saitama Prefecture and the invasion status of alien species, *Neocaridina* spp.

Naoya Ishiguro, Naoki Tamura, Manami Ohkashiwa

DNA 鑑定 10, 51-57 (2018).

Paratya improvisa is a freshwater shrimp species indigenous to eastern Japan. Originally, no species of the genus *Neocaridina* inhabited this region ; however, invasion by *Neocaridina* species has been confirmed in Shiga, Kanagawa, Chiba, Miyagi Prefectures and Hokkaido. In this study, the mitochondrial DNA analysis of cytochrome oxidase subunit I gene demonstrated that *Neocaridina* species have invaded almost all areas within Saitama Prefecture. The presence of indigenous *P. improvisa* was observed in only two areas in the upper river basins. Our findings indicate that the prevalence of *Neocaridina* species increases further downstream within the same river system. In addition, *Neocaridina* species have also adapted to irrigation canals and other environments containing less water.

Annual Report

城西大学大学院物質科学専攻

第 15 卷 2019 年 3 月 発行

編集・発行 城西大学大学院理学研究科物質科学専攻

〒350-0295 埼玉県坂戸市けやき台 1-1

電話 049-271-7728

印刷・製本 (株) 外為印刷

〒111-0032 東京都台東区浅草 2-29-6

電話 03-3844-3855

