

www.pacificchem.org

# Pacificchem 2010

2010 International Chemical Congress of  
Pacific Basin Societies

## 2010 環太平洋国際化学会議 講演ハイライト

2010年12月15日(水)～20日(月)  
ホノルル、ハワイ

主催

カナダ化学会、アメリカ化学会、日本化学会  
オーストラリア化学会、ニュージーランド化学会  
韓国化学会、中国化学会

*Promoting scientific exchange in the Pacific  
basin for a healthy and sustainable future.*



PACIFICHEM 2010 講演ハイライト  
- 目次 -

Area 1 – Analytical	頁
39 Innovation in Chemical Sensing and Separation Systems toward Advanced Chemical Analysis 早下隆士(上智大)	1
56 Recent Advances in Bioanalysis: Ultra-Small Volumes, Global Metabolite Profiling and Single Cells 松永 是(東農工大)	2
113 New Frontiers in Separation Science 岡田哲男(東工大)	3
145 Analytical Applications and New Technical Developments of Soft X-Ray Spectroscopy 村松康司(兵庫県立大)  脇田久伸   河合潤	5
166 Ionic Liquids for Analytical Chemistry and Analytical Chemistry for Ionic Liquids 垣内 隆(京大)	6
181 Fluorescent Sensors by Design 浦野泰照(東大医)	8
198 Microfluidic and Nanofluidic Devices for Chemical and Biochemical Experimentation 馬場嘉信(名大)	9
207 Advances in Flow-based Analytical Techniques 今任稔彦(九大)	10
255 (Bio-)Chemical/Electrochemical Sensors and Sensing Materials 鈴木孝治(慶大)   丹羽修(産総研)   Daniel Citterio(慶大)	12
260 Novel Applications of Magnetic Fields in Analytical Chemistry 渡會 仁(阪大INSD)	13
276 Non- and Minimally-Invasive Diagnostics of Biological Systems using Vibrational Spectroscopy 佐藤英俊(関西学院大学)	14
Area 2 – Inorganic	
20 Controlling the Structure and Properties of Solids 島川 祐一(京大化研)	16
25 Functional Molecule-Based Magnets 山下正廣(東北大)、菅原正(東大)	17
35 Organoboron, Organosilicon and Organophosphorus as Optoelectronic and Energy-related Materials 山口茂弘(名古屋大)	18
38 Actinides and the Environment: A Multidisciplinary Look at What We Know and What We Need to Know 吉田善行(日本原子力研究開発機構)	20
94 The Construction of Photofunctional Supramolecular Metal Complexes 加藤昌子(北大院理)  石田齊(北里大理)	21
96 Chemistry of Sulfur-Bridged Multimetallic Complexes 溝部裕司(東大)  松本 剛(名大)	22
97 Syntheses and Applications of Metal-Organic Frameworks 北川進(京都大)	23
108 Dioxygen Activation Chemistry and Catalytic Oxidation Reactions 伊東 忍(阪大)	25
146 Advances in Metal-Mediated Bond Activation: From Unusual Bonding Motifs to Applications in Catalysis 小宮三四郎(東農工大)	26
150 Preparation and Reactions of Early Transition Metal and Lanthanide Compounds 高橋 保(北大)	27

PACIFICHEM 2010 講演ハイライト  
- 目次 -

156 Functional Molecules of the Heavier Main Group and Transition Metal Elements 小澤文幸(京大)	28
164 Self-Assembly and Coordination Chemistry 藤田 誠(東大)	30
173 Molecular Design in Bioinorganic Chemistry 林 高史(阪大)  増田秀樹(名工大)	32
194 Coordination Chemistry toward Artificial Photosynthesis and Energy Conversion Processes 田中晃二(分子研)  酒井健(九州大)	33
248 Carbon-fluorine Bond Activation: a Crossroads for Inorganic, Organic, and Environmental Chemistry 秋山隆彦(学習院大理)	35
251 New Frontiers in Polyoxometalate Chemistry 水野哲孝(東大)	36
275 Nanoscale Characterization of Functional Materials by Nuclear Probes 野村貴美(東大), 山田康洋(理科大)	37
<b>Area 3 – Macromolecular</b>	
12 NMR Spectroscopy of Polymers: Innovative NMR Strategies for Complex Macromolecular Systems 朝倉哲郎(農工大), 堀井文敬(福井大)	38
42 Chemistry and Functional Properties of Soft Interfaces 高原 淳(九州大), 栗原和枝(東北大), 前田瑞夫(理研)	40
64 Polymer Materials Performance, Degradation and Optimization 工藤久明(東大)	42
95 Biodegradable and Biomass Plastics 宇山 浩(阪大)  Tadahisa Iwata	43
98 The New Age of Advanced Materials: Supramolecular Architectures and Smart Materials 相田卓三(東大院), 八島栄次(名大院)	44
102 Molecular-Based Ordered Materials Formed Through Self-Organization 加藤隆史(東京大学), 菊池裕嗣(九州大学)	46
127 Polymer Nano-Hybrids at Bio-Interfaces 中條善樹(京大)	47
136 Synthesis, Structure, and Physical Properties of Advanced Polymer Gels 伊藤耕三(東大)  柴山充弘(東大)	48
152 Nano Structure and Function of Organic-Inorganic Hybrid Polymers 松川公洋(大阪市工研)	49
219 Radical Polymerization Kinetics and Mechanisms 後藤淳(京大)	50
231 Amphiphilic Polymers: Fundamentals and Applications 佐藤尚弘(大阪大)  秋吉一成(京都大)	51
257 Frontiers of Precisely Controlled Polymer Synthesis: Fine Control of Polymerization Reaction and Impact on Advanced Material Designs 北山辰樹(大阪大), 青島真人(大阪大), 上垣外正巳(名古屋大)	52
<b>Area 4 – Organic</b>	
14 Cooperative Catalysis 魚住泰広(分子研)  Atsushi Nishida	54
18 C-H Functionalization, Memorial Symposium for Professor Keith Fagnou 伊丹健一郎(名古屋大)	55

PACIFICHEM 2010 講演ハイライト  
- 目次 -

29	Designed pi-Electronic Systems: Synthesis, Properties, Theory and Function 久保孝史(阪大)  戸部義人(阪大)	57
45	Chemistry of Novel Nanocarbons -Fullerenes, Carbon Nanotubes and Related Materials- 赤坂 健(筑波大)	58
47	New Directions of Supramolecular Chemistry toward Nanomaterial Science, Biomedical Science, and Supramolecular Catalysts 青木伸(東京理大)  灰野岳晴(広島大)	59
80	Marine Natural Products: Isolation, Biology, Ecology, and Synthesis 村田道雄(大阪大)	60
115	New Advances in Metal-Catalyzed Alkylation and Fluoroalkylation 神戸宣明(大阪大学)	61
132	New Dimensions of Green Sustainable Chemistry: Novel Reactions and Catalysts 小林 修(東大)	62
148	Design and Synthesis of Biologically Active Compounds for Elucidating Mode-of-Action 大石 徹(九大)	63
216	Molecular Complex Systems: Reversible Aggregation/Disaggregation of Organic Molecules 山口雅彦(東北大)	64
222	Practical Applications of Basic Research on Molecular Recognition 加納 航治(同志社大)	65
279	Recent Advances in Natural Products as Anticancer Agents 松永茂樹(東大院農)	66
283	Transition Metal Catalysis: Mechanism and Practice 野崎京子(東大)	67
<b>Area 5 - Physical, Theoretical &amp; Computational</b>		
24	Ultrafast Intense Laser Chemistry 山内 薫(東京大学)	68
37	Advances in Quantum Monte Carlo 田中成典(神戸大)	70
75	Dynamics and Mechanisms of Photochemical Reactions of Biological Proteins 寺嶋正秀(京大)	71
87	Spectroscopic Probes of Intramolecular and Intermolecular Interactions in Molecules and Molecular Clusters 関谷 博(九大)	72
116	Anharmonic Vibrations of Molecules and Clusters: Experiment and Theory 石内俊一(東工大)	74
138	Molecular Theory for Real Systems and Chemical Reactions 榊 茂好(京大)、高塚和夫(東大)、山下晃一(東大)	75
140	Re-Encounter of Computational Chemistry and Chemometrics 高木達也(阪大院薬)、相田美砂子(広島大院理)、長谷川健(東工大院理工)	77
163	Cold Molecules and Quantum Computation/Information Processes 山下晃一(東大院工)  百瀬孝昌(British Columbia大)	79
171	The Nanostructure-Enhanced Photochemical Reactions 三澤弘明(北大)	80
212	Frontiers of State-to-State Dynamics 鈴木俊法(京大・理研)	81



PACIFICHEM 2010 講演ハイライト  
- 目次 -

228 Solid-State NMR Methods and Applications in Inorganic Materials 竹腰清乃理(京大)	82
254 Advanced Linear and Non-Linear Vibrational Spectroscopy 岩田耕一(学習院大) 古川行夫(早稲田大)	84
<b>Area 6 – Agrochemistry</b>	
88 Flavonoids, Synthesis toward Functions 吉田久美(名古屋大学)	86
214 Fungi and Mushrooms: Ecology, Chemistry and Agricultural Relevance 河岸洋和(静岡大)	87
<b>Area 7 – Biological Chemistry</b>	
41 Frontiers in Peptide Chemistry: Synthesis and Applications 二木史朗(京大)	89
58 Advances in Solid-State NMR of Biological Molecules 内藤 晶(横浜国大)	90
119 Gas-Sensor Proteins/Enzymes: Molecular Mechanisms of Gas Sensing and Intra-Molecular Signal Transduction 清水透(東北大)	91
129 Bioorganic Reaction Mechanisms 平竹 潤(京大化研)	92
208 New Frontiers of Functional Nucleic Acids: Chemistry, Biology and Applications 菅 裕明(東京大学) 杉本直己(甲南大学)	93
213 Protein Alteration by Mutagenesis and Chemical Modification: Applications in Biochemistry, Drug Discovery, Diagnostics, and Nutrition 植野 洋志(奈良女子大学)	94
235 Recent Advances in Research on Leukotrienes and Prostaglandins in Inflammatory and Respiratory Diseases 上野裕明(田辺三菱製薬)	95
244 Frontiers in Ubiquitin Research: Structures, Mechanisms, Biology and Drug Development 加藤晃一(岡崎統合バイオ)	96
<b>Area 8 – Environmental Chemistry</b>	
48 Sources, Transport, Fate, and Behaviour of Global Contaminants 山下信義(産総研)	97
131 Chemistry of Post Combustion Carbon Dioxide Capture 藤岡祐一(地球環境産業技術研究機構)	99
247 Sonochemistry & Sonoprocessing 木村隆英(滋賀医大)	100
250 Innovative Green Chemistry with Microwave Energy 松村竹子(ミネルバライトラボ) 堀越智(東京理科大) 柳田祥三(大阪大学)	101
262 Challenges of Heterogeneous Catalysts for Environmental-Benign Materials Conversions 海老谷 幸喜(北陸先端科学技術大学院大学)	102
<b>Area 9 – Materials &amp; Nanotechnology</b>	
77 Titanium Dioxide: Synthesis and Applications for Energy, Environment, and Devices 横野照尚(九工大)	103
104 Synchrotron Radiation: Emerging Techniques and Applications 朝倉清高(北大)	104

PACIFICHEM 2010 講演ハイライト  
- 目次 -

141 Emerging perovskite and spinel compounds for materials science and applications 山浦 一成(物材機構)	106
168 Supramolecular Nanoassemblies and Extended Frameworks 伊與田正彦(首都大)  Nobuo Kimizuka   Seiji Shinkai	107
202 Liquid Crystals in Materials Chemistry 清水 洋(産総研)	109
226 Biological and Bio-Inspired Materials Synthesis and Assembly 松永 是(東農工大)、山下一郎(奈良先端大)	111
<b>Area 10 – Alternate Energy Technology</b>	
172 Clean Fuels from Coal, Natural Gas and Biomass 椿範立(富山大)	113
176 Thermochemical and Metal-Catalyzed Transformations of Biomass to Petrochemical Feedstocks, Polymer Precursors and Fuels. 富重圭一(東北大)	114
180 The Chemistry, Structure, and Properties of Fuel Cell Membranes 宮武健治(山梨大)	115
<b>Area 11 – Chemistry Outreach to the Community</b>	
28 Green Chemistry and Micro/Small Scale Chemistry in the Curriculum 荻野 和子(東北大)	116
185 Women at the Forefront of the Time: Challenges toward Next Decades 相馬芳枝(神戸大)	117
<b>Area 12 – Health &amp; Technology</b>	
3 Advances in the Chemistry of Targeted Radionuclide Therapy 荒野 泰(千葉大)	118
71 Photodynamic Therapy and Photodetection 三好憲雄(福井大)	119
110 Understanding the Chemistry of Phytochemical Antioxidants and their Role in Human Health and Wellness 寺尾純二(徳島大)	120
153 Nucleic Acid Based Therapeutics 松田 彰(北大)	122
284 Assembling New Biomedical Materials for Tissue Regeneration 清水達也(東京女子医科大)	123
<b>Area 13 – Security</b>	
137 Targeting Chemical and Biological Warfare Agents 末 信一郎(福井大)	124

## Abstracts by Country

Argentina	18	Mexico	16
Australia	364	Nepal	3
Austria	11	Netherlands	28
Bangladesh	6	New Caledonia	1
Belgium	30	New Zealand	88
Brazil	23	Nigeria	3
Brunei Darussalam	1	Norway	11
Bulgaria	1	Pakistan	4
Canada	923	Papua New Guinea	7
Chile	3	Philippines	9
China	521	Poland	23
Colombia	12	Portugal	9
Costa Rica	6	Puerto Rico	1
Croatia	4	Qatar	1
Cyprus	1	Romania	2
Czech Republic	29	Russian Federation	27
Denmark	18	Saudi Arabia	6
Egypt	2	Singapore	100
Fiji	2	Slovakia	2
Finland	19	Slovenia	3
France	117	South Africa	6
Germany	281	Spain	59
Greece	3	Sri Lanka	2
Hong Kong	43	Sweden	32
Hungary	2	Switzerland	43
Iceland	1	Taiwan	155
India	44	Thailand	15
Indonesia	13	Turkey	2
Iran, Islamic Republic of	1	Ukraine	3
Iraq	2	United Kingdom	185
Ireland	10	United States	2,992
Israel	28	Venezuela	1
Italy	39	Viet Nam	3
Japan	<b>6,430</b>		
Jordan	1		
Korea, Democratic People's Republic of	3		
Korea, Republic of	782		
Kuwait	1		
Malaysia	27		
		<b>Total</b>	<b>13,664</b>

2010年11月10日現在

## Abstracts by Area

Area:分野		シンポジウム数	Abstract
<b>I The Core Areas of Chemistry: 中核的科学分野</b>			
Area 1	Analytical	19	1,048
Area 2	Inorganic	31	1,754
Area 3	Macromolecular	22	1,390
Area 4	Organic	31	2,457
Area 5	Physical, Theoretical & Computational	30	1,662
小計		133	8,311
<b>II Multi- and Cross- Disciplinary Areas of Chemistry: 学際領域</b>			
Area 6	Agrochemistry	10	326
Area 7	Biological Chemistry	21	1,078
Area 8	Environmental Chemistry	13	705
Area 9	Materials & Nanotechnology	24	1,807
小計		68	3,916
<b>III Challenges and Opportunities for Chemistry: 社会・未来課題</b>			
Area 10	Alternate Energy Technology	9	527
Area 11	Chemistry Outreach to the Community	8	174
Area 12	Health & Technology	11	574
Area 13	Security	6	162
小計		34	1,437
<b>合計</b>		<b>235</b>	<b>13,664</b>

2010年11月10日現在

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
<b>Area 1 - Analytical</b>			
		<b>Name</b>	
36	On-site and In-vivo Instrumentation and Applications	Janusz Pawliszyn   Norman Dovichi   Ouyang Gangfeng	Canada
39	Innovation in Chemical Sensing and Separation Systems toward Advanced Chemical Analysis	Takashi Hayashita   Nobuhiko Iki   Richard A Bartsch   Hasuck Kim   Aijun Tong	Japan
56	Recent Advances in Bioanalysis: Ultra-Small Volumes, Global Metabolite Profiling and Single Cells	Daniel T Chiu   Philip Britz-McKibbin   Koji Otsuka   Steven Boxer   Tadashi Matsunaga   Guohua Zhou	United States
74	Optical Waveguide Techniques for the Analyses of Materials and Interfaces	Kin-ichi Tsunoda   S. Scott Saavedra   Michelle Gee   Li-Xian Sun	Japan
84	New Frontiers of Plasma Spectrochemistry	Naoki Furuta   Gary Hieftje   Ralph Sturgeon	Japan
113	New Frontiers in Separation Science	Tetsuo Okada   Marc Porter   Paul Haddad	Japan
145	Analytical Applications and New Technical Developments of Soft X-Ray Spectroscopy	Yasuji Muramatsu   Hisanobu Wakita   Jun Kawai   Dennis Lindle   Louis Terminello   Clemens Heske   Anthony Buuren   Rupert Perera   Alexander Moewes   Frank Larkins	Japan
166	Ionic Liquids for Analytical Chemistry and Analytical Chemistry for Ionic Liquids	Takashi KAKIUCHI   Daniel Armstrong   Alan Bond	Japan
181	Fluorescent Sensors by Design	Matthew McCarroll   Daniel Dyer   Urano Yasuteru   Fuyou Li	United States
191	Comprehensive Multidimensional Separations	Tadeusz Gorecki   Rob Synovec   Philip Marriott	Canada
193	Electroanalytical Sciences	Koichi Aoki   Toshiyuki Osakai   Baohong Liu   Henry White	Japan
198	Microfluidic and Nanofluidic Devices for Chemical and Biochemical Experimentation	H. John Crabtree   Stephen C. Jacobson   J. Michael Ramsey   Yoshinobu Baba	Canada
206	Analytical and Environmental Chemistry in Human Health	X. Chris Le   Xing-Fang Li   Susan Richardson   Lizhong Zhu   Gui-Bin Jiang	Canada
207	Advances in Flow-based Analytical Techniques	Ian McKelvie   Toshihiko Imato   Kate Grudpan   Gary D. Christian	Australia
253	Rapid, Multi-Component Environmental Analysis	Ray Clement   Nobuyoshi Yamashita   Frank Dorman	Canada
255	(Bio-)Chemical/Electrochemical Sensors and Sensing Materials	Koji Suzuki   Osamu Niwa   Daniel Citterio   Eric Bakker   Phillippe Buhlmann	Japan
260	Novel Applications of Magnetic Fields in Analytical Chemistry	Hitoshi Watarai   Ingrid Fritsch   Benjamin Yellen   C. B. Fuh	Japan
276	Non- and Minimally-Invasive Diagnostics of Biological Systems using Vibrational Spectroscopy	Michael W. Blades   Morris Michael   Hidetoshi Sato	Canada
277	Enabling Mass Spectrometric Techniques for Proteomics	Liang Li   David Muddiman   Xiaohong Qian	Canada
<b>Area 2 - Inorganic</b>			
9	Molecular Photonics	Felix Castellano   Vivian Wing-Wah Yam   Tetsuro Majima	United States
20	Controlling the Structure and Properties of Solids	Brendan Kennedy   Patrick M. Woodward   Yuichii Shimakawa	Australia
22	Olefin Oligomerization and Polymerization Catalyzed by Early Transition Metals	Klaus Theopold   Kazushi Mashima   Zuwei Xie	United States



**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
25	Functional Molecule-Based Magnets	Masahiro Yamashita   Joel Miller   Tadashi Sugawara   George Christou   Keith Murray   Robert Thompson	Japan
30	Metal Ion Complex Interactions with Nucleic Acids	Janet Morrow   Makoto Komiyama   Richard Keene	United States
35	Organoboron, Organosilicon and Organophosphorus as Optoelectronic and Energy-related Materials	Suning Wang   Frieder Jaekle   Shigehiro Yamaguchi   Yue Wang	Canada
38	Actinides and the Environment: A Multidisciplinary Look at What We Know and What We Need to Know	Heino Nitsche   Chunli LIU   Zenko YOSHIDA   Daniel KAPLAN	United States
46	Organo-f-Element Compounds: From Novel Chemical Transformations to Applications in Catalysis and Materials Science	Frank T. Edelman   Glen B. Deacon   David J. Berg   Zhaomin Hou   Jaqueline L. Kiplinger	Germany
60	Schiff Base Macrocycles and Materials	Mark MacLachlan   Sally Brooker   Chang-Hee Lee	Canada
68	Frontiers in Organometallic Chemistry	Guy Bertrand   Kazuyuki Tatsumi   Michael Fryzuk	United States
94	The Construction of Photofunctional Supramolecular Metal Complexes	Masako Kato   Garry S. Hanan   Peter C. Ford   Vivian Wing-Wah Yam   Hitoshi Ishida	Japan
96	Chemistry of Sulfur-Bridged Multimetallic Complexes	Thomas B. Rauchfuss   Yasushi Mizobe   Guo-Xin Jin   Tsuyoshi Matsumoto	Japan
97	Syntheses and Applications of Metal-Organic Frameworks	Myunghyun Paik Suh   Susumu Kitagawa   Jeffrey Long   George Shimizu   Cameron Kepert	Korea
100	Early Main Group Chemistry	Phil Andrews   Kenneth Henderson   Tristram Chivers	Australia
108	Dioxygen Activation Chemistry and Catalytic Oxidation Reactions	Shinobu Itoh   William B. Tolman   Wonwoo Nam   Amy C. Rosenzweig	Japan
133	Structural and Functional Aspects of Coordination Polymers	Shane Telfer   Seth Cohen   Daniel Leznoff	New Zealand
143	Discrete Coordination Systems with Switchable Structures and Properties	Takumi Konno   Andy Hor   Kuang-Lieh Lu	Japan
146	Advances in Metal-Mediated Bond Activation: From Unusual Bonding Motifs to Applications in Catalysis	Kenneth Caulton   Sanshiro Komiya   Mark stradiotto	United States
150	Preparation and Reactions of Early Transition Metal and Lanthanide Compounds	Tamotsu Takahashi   Glen B. Deacon   Zhenfeng Xi   Richard F. Jordan	Japan
156	Functional Molecules of the Heavier Main Group and Transition Metal Elements	Fumiyuki Ozawa   Philip Power   Derek Gates	Japan
164	Self-Assembly and Coordination Chemistry	Makoto Fujita   Leonard MacGillivray   Stephen Loeb   Shu-Yan Yu	Japan
173	Molecular Design in Bioinorganic Chemistry	Takashi Hayashi   David Goldberg   Pierre Kennepohl   Hideki Masuda	Japan
187	Electron Transfer and Electrochemistry of Transition Metal Containing Inorganic and Organometallic Materials	Hiroshi Nishihara   Alaa Abd-El-Aziz   Pierre Harvey   Ben Zong Tang	Japan
194	Coordination Chemistry toward Artificial Photosynthesis and Energy Conversion Processes	Koji Tanaka   Ken Sakai   James Muckerman   Licheng Sun	Japan

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
217	Redox Redux: The Renaissance of Non-Innocent Ligand Complexes	Jake Soper   Robin G. Hicks   Stephen Colbran	United States
218	Advances in Nuclear Chemistry of Transactinide Elements	Yuichiro Nagame   Heino Nitsche   Peter Schwerdtfeger   Zhi Qin   Christoph Duellmann	Japan
239	Chemistry and Materials Science at High Pressures	Yang Song   Ian Butler   Riad Manaa   Yongjae Lee	Canada
248	Carbon-fluorine Bond Activation: a Crossroads for Inorganic, Organic, and Environmental Chemistry	Oleg Ozerov   Jennifer Love   Takahiko Akiyama	United States
249	Fundamental and Applied Inorganic Fluorine Chemistry and Their Impacts on Energy Conservation and the Environment	Rika Hagiwara   Kazuhiko Matsumoto   Gary J. Schrobilgen   Helene P. A. Mercier   Robert G. Syvret	Japan
251	New Frontiers in Polyoxometalate Chemistry	May Nyman   Noritake Mizuno   Collette Boskovic   Lin Xu	United States
275	Nanoscale Characterization of Functional Materials by Nuclear Probes	Kiyoshi Nomura   Yasuhiro Yamada   John G. Stevens   Anita Hill   Hho-Hsiang Wei	Japan
<b>Area 3 - Macromolecular</b>			
6	Polymeric Materials from Renewable Resources	Victoria Finkenstadt   Soma Chakraborty   LinShu Liu   Xiaojun Liao   Rama Konduri	United States
12	NMR Spectroscopy of Polymers: Innovative NMR Strategies for Complex Macromolecular Systems	Tetsuo Asakura   Alan English   H.N. Cheng   Fumitaka Horii   Peter Macdonald   Andrew Whittaker   Hans W. Spiess   Jeffery White	Japan
42	Chemistry and Functional Properties of Soft Interfaces	Atsushi Takahara   Kazue Kurihara   Kenneth Wynne   Kookheon Char   Mizuo Maeda   Zhaohui Su   Gregory G Warr	Japan
51	Advanced Polymeric Membranes for Environmental, Biomedical and Bioengineering Application	Akon Higuchi   Benny Freeman   Young Moo Lee   Anita Hill	Japan
57	Functional Block Copolymer Assemblies	Timothy Lodge   Marc Hillmyer   Charles Han   Joona Bang   Yushu Matsushita	United States
64	Polymer Materials Performance, Degradation and Optimization	Mathew Celina   Tim Dargaville   Hisaaki Kudoh	United States
82	Hybrid Conjugated Polymer Materials	Michael O. Wolf   Suresh Valiyaveetil   Rigoberto Advincula   Kimihisa Yamamoto	Canada
95	Biodegradable and Biomass Plastics	Hiroshi Uyama   Tadahisa Iwata   George Guo-Qiang Chen   Christopher Nomura   Seung Soon Im	Japan
98	The New Age of Advanced Materials: Supramolecular Architectures and Smart Materials	Eiji Yashima   Karen Wooley   Frank Caruso   Takuzo Aida   Myongsoo Lee	Japan
102	Molecular-Based Ordered Materials Formed Through Self-Organization	Takashi Kato   Colin Nuckolls   Douglas Gin   Hirotsugu Kikuchi   Xuefeng Guo   Matt Francis	Japan
126	Biomimetic Engineering of Hierarchically Structured Polymer Materials	Masatsugu Shimomura   Darrin Pochan   Mitchell Winnik   Tomokazu Iyoda	Japan
127	Polymer Nano-Hybrids at Bio-Interfaces	Yoshiki Chujo   Kenneth Wynne   Kathryn Urich   Chang-Sik Ha	Japan
136	Synthesis, Structure, and Physical Properties of Advanced Polymer Gels	Kohzo Ito   Mitsuhiro Sibayama   R Siegel   Chi Wu	Japan
144	Azobenzene Polymers for Photo-Reversible Structures and Surfaces	Christopher Barrett   Tomiki Ikeda   Yue Zhao   P Palffy-Muhoray	Canada

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
152	Nano Structure and Function of Organic-Inorganic Hybrid Polymers	Kimihiro Matsukawa   Kensuke Naka   Ikuyoshi Tomita   Chang-Sik Ha   Frieder Jaekle	Japan
160	Controlled/Living Radical Polymerization in Dispersed Systems (#160)	Masayoshi Okubo   Per Zetterlund   Joseph Schork   Michael Cunningham	Japan
179	Separation and Characterization of Synthetic and/or Biological Macromolecules: the Principles, Practices and Applications	Yongmei Wang   Taihyun Chang   Shinichi Kinugasa	United States
211	Polyolefins Chemistry and Beyond - From Bench to Commercial Scale	Fazle Sibtain   Robert Waymouth   Kyoko Nozaki   Michael Chan	Canada
219	Radical Polymerization Kinetics and Mechanisms	Greg Russell   Graeme Moad   Per Zetterlund   Robin Hutchinson   Atsushi Goto	New Zealand
231	Amphiphilic Polymers: Fundamentals and Applications	Takahiro Sato   Kazunari Akiyoshi   Francoise Winnik   Charles L. McCormick	Japan
236	Controlled/Living Radical Polymerization: Mechanisms, Catalysts, Reaction Engineering, Materials and Applications	Shiping Zhu   Bo-Geng Li   Krzysztof Matyjaszewski   Takeshi Fukuda   Michael Monteiro	Canada
257	Frontiers of Precisely Controlled Polymer Synthesis: Fine Control of Polymerization Reaction and Impact on Advanced Material Designs	Tatsuki Kitayama   Judit Puskas   Graeme Moad   Masami Kamigaito   Sadahito Aoshima	Japan
<b>Area 4</b>	<b>- Organic</b>		
1	Reactive Intermediates and Unusual Molecules- A Celebration of Bob Moss's 70 years	Matthew Platz   William Leigh   Manabu Abe	United States
14	Cooperative Catalysis	Yasuhiro Uozumi   Rick Danheiser   Kuiling Ding   Atsushi Nishida	Japan
15	Anion Coordination Chemistry	Benjamin Hay   Kristin Bowman-James   Fred Pfeffer   Kye Nam	United States
18	C-H Functionalization, Memorial Symposium for Professor Keith Fagnou	Hélène Lebel   Tom G. Driver   Kenichiro Itami	Canada
19	Interface between Organic Synthesis and Chromatography	Christopher Welch   Myung Hyun   Arvind Rajendran   William Farrell	United States
29	Designed pi-Electronic Systems: Synthesis, Properties, Theory and Function	Michael Haley   Takashi Kubo   Graham Bodwell   Yoshito Tobe	United States
32	Diversity Oriented Synthesis	Michael Pirrung   Wei-Min Dai   Seung Bum Park	United States
45	Chemistry of Novel Nanocarbons - Fullerenes, Carbon Nanotubes and Related Materials-	Takeshi Akasaka   Fred Wudl   Yuliang Li	Japan
47	New Directions of Supramolecular Chemistry toward Nanomaterial Science, Biomedical Science, and Supramolecular Catalysts	Shin Aoki   Takeharu Haino   Wen-Sheng Chung   Jeffery T. Davis	Japan
62	Asymmetric Organocatalysis	Keiji Maruoka   Li Deng   Liu-Zhu Gong	Japan
63	Novel Synthetic Methodology and Its Application to Natural Product Synthesis	Frederick West   Viresh Rawal   Masahiro Toyota	Canada
80	Marine Natural Products: Isolation, Biology, Ecology, and Synthesis	Jon Rainier   Michio Murata   Ray Anderson	United States

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
85	The Science and Strategy of Process Chemistry: From Molecules to Pharmaceutical Drugs	Todd McDermott   Ichiro Shinkai   Stephane Caron   Grant McLachlan	United States
89	Mechanistic Organic Photochemistry	Howard Zimmerman   Tejiro Ichimura   Peter Wan   Andrei Kutateladze   Axel Griesbeck	United States
115	New Advances in Metal-Catalyzed Alkylation and Fluoroalkylation	David Vacic   Nobuaki Kambe   Vy Dong	United States
124	Frontiers in Biocatalysis Applications to Organic Synthesis	Romas Kazlauskas   Takashi Sakai   Jinchuan Wu	United States
125	Supramolecular Photochemistry	Yoshihisa Inoue   Cornelia Bohne   V. Ramamurthy   Chen-Ho Tung	Japan
132	New Dimensions of Green Sustainable Chemistry: Novel Reactions and Catalysts	Shu Kobayashi   C. J. Li   Paul Anastas   Mike Krische   Tamim Braish	Japan
134	Total Synthesis of Natural Products and Related Compounds	Robert M. Williams   Keiji Tanino   Sung Ho Kang	Japan
139	Achieving Efficiency in Organic Reactions via Greener Processes and Practices	Ilhyong Ryu   Dennis P. Curran   Sang-gi Lee   Philip G. Jessop	Japan
148	Design and Synthesis of Biologically Active Compounds for Elucidating Mode-of-Action	Tohru Oishi   Craig Forsyth   Hee-Yoon Lee	Japan
155	Organic Solid-State Chemistry: Structure, Synthesis & Reactivity	Roger Bishop   Reiko Kuroda   Miguel Garcia-Garibay	Australia
157	Molecular Probes and Fluorophores for Cellular Imaging	Christoph Fahrni   Shana Kelley   Kazuya Kikuchi   Young-Tae Chang	United States
199	Boronic Acids: Synthetic and Biological Applications	Binghe Wang   Dennis G. Hall   Michinori Suginome   Peter Duggan	United States
216	Molecular Complex Systems: Reversible Aggregation/Disaggregation of Organic Molecules	Masahiko Yamaguchi   Deqing Zhang   Byeang-Hyeon Kim	Japan
222	Practical Applications of Basic Research on Molecular Recognition	Willie Hinze   Koji Kano   Chris Easton	United States
229	Carbanions: Modern Perspectives in Structure, Reactivity, and Synthesis	Bob Gawley   Victor Snieckus   Kiyoshi Tomioka	United States
279	Recent Advances in Natural Products as Anticancer Agents	David G. I. Kingston   Ronald Quinn   Shigeki Matsunaga   Ji-Kai Liu	United States
280	Supramolecular Catalysis	Jon R. Parquette   Jovica D. Badjic   Michael Organ   Quilin Zhou	United States
282	Metal Catalysis for Asymmetric Synthesis	Hiroaki Sasai   Andre Charette   Dan Yang   Huw Davies	Japan
283	Transition Metal Catalysis: Mechanism and Practice	Kyoko Nozaki   Jeffrey Stryker   F. Dean Toste	Japan
<b>Area 5</b>	<b>- Physical, Theoretical &amp; Computational</b>		
10	Computational Quantum Chemistry: Theory and Interactions with Experiment	Stacey D. Wetmore   Henry F. Schaefer III   Leo Radom   Peter Schwerdtfeger   Ming Wah (Richard) Wong   Keiji Morokuma   Jiande Gu   Wei-Hai Fang   Kwang S. Kim   Alejandro Toro-Labbe	Canada

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
17	Gas Phase Studies of Metal Ligand Interactions: Relevance in Organic Chemistry and Biochemistry	Richard O'Hair   Scott Gronert   Michael Siu	Australia
21	Recent Advances in Studies of Molecular Processes at Liquid Interfaces	Liem Dang   Christopher Mundy   Akihiro Morita   KY Chan   KY Chan	United States
24	Ultrafast Intense Laser Chemistry	Kaoru Yamanouchi   Robert J Levis   Andre D Bandrauk	Canada
31	Kuiper Belt Objects - Laboratory Studies, Models, Theory, and Observations	Ralf I. Kaiser   Weijun Zheng   Gianfranco Vidali   Agnes H. H. Chang   Naoki Watanabe	United States
37	Advances in Quantum Monte Carlo	Shigenori Tanaka   William A. Lester, Jr.   Stuart Rothstein	Japan
40	Interfacial Electrochemistry: New Systems, Experimental Methods and Theoretical Approaches	Gregory Jerkiewicz   Andrzej Wieckowski   Kohei Uosaki	Canada
66	Theory of Excited States Structures and Dynamics: Application to Organic Materials and Biosystems	Zhigang Shuai   Wei Yang   M. Cho	China
72	Frontiers of Surface-Enhanced Raman Scattering: Single-Nanoparticles and Single Cells	Yukihiro Ozaki   Zhong-Qun Tian   Kwan Kim   Martin Moskovits   Ricardo Aroca	Japan
75	Dynamics and Mechanisms of Photochemical Reactions of Biological Proteins	Masahide Terazima   Keith Moffat   Pill-Soon Song	Japan
81	Challenges and Solutions to Accurate Calculations on Large Molecular Systems.	Mark Gordon   Dmitri Fedorov   Cheol Ho Choi   Alistair Rendell   Dmitri Fedorov	United States
87	Spectroscopic Probes of Intramolecular and Intermolecular Interactions in Molecules and Molecular Clusters	Hiroshi Sekiya   Timothy Zwier   Masaaki Fujii   Seong Keun Kim	Japan
103	Systems Chemistry - Towards the Holistic Understanding of Complex Molecular Systems	Josef Scheiber   Dave Winkler   Hideaki Suzuki   Tim Clark	Switzerland
116	Anharmonic Vibrations of Molecules and Clusters: Experiment and Theory	Henrik Kjaergaard   Sotiris Xantheas   Shun-ichi Ishiuchi   Don McNaughton	New Zealand
130	New Experimental and Computational Probes of Water in Biological Systems	Luzar Alenka   Grenfell Patey   Masahiro Kinoshita	United States
138	Molecular Theory for Real Systems and Chemical Reactions	Shigeyoshi Sakaki   Koichi Yamashita   Mark Gordon   Yoon Sup Lee   Shuhua Li   Kazuo Takatsuka   Martin Head-Gordon	Japan
140	Re-Encounter of Computational Chemistry and Chemometrics	Tatsuya Takagi   Misako Aida   Takeshi Hasegawa   Marcel Maeder   Richard Wong Ming Wah	Japan
161	Quantum Coherence and its Control in Condensed Phases	Jianshu Cao   Paul Brumer   K Hoki	United States
163	Cold Molecules and Quantum Computation/Information Processes	Koichi Yamashita   Takamasa Momose   K. Birgitta Whaley	Japan
171	The Nanostructure-Enhanced Photochemical Reactions	Hiroaki Misawa   Prashant Kamat   Ken Ghiggino   Mostafa El-Sayed	Japan
204	DNA Photonics (#204)	Torsten Fiebig   David Beratan   Tetsuro Majima   Y. Yan	United States



**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
212	Frontiers of State-to-State Dynamics	Cheuk-Yiu Ng   Arthur Suits   Scott Kable   Kopin Liu   Toshinori Suzuki   Xueming Yang	United States
220	Molecular Dynamics in Complex Environments: Theory and Experiments	Keisuke Tominaga   James L. Skinner   R. J. Dwayne Miller   Minhaeng Cho	Japan
228	Solid-State NMR Methods and Applications in Inorganic Materials	Scott Kroeker   Jerry Chan   Sophia Hayes   Kiyonori Takegoshi	Canada
252	Interfacial Phenomena for Bubbles, Droplets, Films and Soft Matter	Alidad Amirfazli   Subir Bhattacharjee   Albert Kim   Rossen Sedev	Canada
254	Advanced Linear and Non-Linear Vibrational Spectroscopy	Koichi Iwata   Yukio Furukawa   S. A. Asher   David Phillips	Japan
258	Orbital-Free Density Functional Theory and Its Applications to Large-Scale Materials Simulations	Yan Alexander Wang   Carlos J. Garcia-Cervera   Julian Gale   Tomasz A. Wesolowski	Canada
259	Plasmonics and Nanophotonics for Chemical Sensing, Imaging and Spectroscopy	Alexandre Brolo   James Coe   Satoshi Kawata	Canada
265	Frontiers of Colloid and Interface Chemistry	Hideki Sakai   Srinivasa Raghavan   Seong-Geun Oh	Japan
267	Frontiers of Biomolecular Dynamics	Glen Loppnow   Martin Gruebele   Hiroshi Kitara	Canada
<b>Area 6</b>	<b>- Agrochemistry</b>		
50	Cellulose-based Nanomaterials - Fundamental and Application	Thomas Hu   Arthur Ragauskas   Hyoe Hatakeyama	Canada
88	Flavonoids, Synthesis toward Functions	Kumi Yoshida   Biao Yu   Alan Kozikowski	Japan
111	Metabolomics for Fundamental and Applied Plant Sciences	Kazuki Saito   Basil Nikolau   Ute Roessner	Japan
118	Application of Liquid and Gas Chromatography Mass Spectrometry to Agrochemical Challenges	Michael Thurman   Yanyan Fang   Cary Chiou	United States
162	Value-Added Food Products from Fruits and Vegetables	Coralia Osorio   Tara McHugh   Nigel Perry   Alyson Mitchell   Susan Ebeler   Kwang-Geun (James) Lee	Colombia
210	Ionic Liquids: Novel Processing Platforms of Cellulose and Biomass	Dimitris Argyropoulos   Hiroyuki Ohno   Peter Englezos	United States
214	Fungi and Mushrooms: Ecology, Chemistry and Agricultural Relevance	Hirokazu Kawagishi   M. Soledade C. Pedras   Jong-Pyung Kim	Japan
227	Rodenticide-Based Opportunities for Protection of Agriculture, Ecosystems and Public Health	John J. Johnston   Charles Eason   Catherine Swift   Elaine Murphy	United States
230	International Food Safety Issues & Opportunities	John J. Johnston   Jason Sandahl   Hong Chen   Nuansri Tayaputch   Yehan Cui	United States
243	Genomics Approach to the Analysis of Fungal Secondary Metabolites and Diversity	Masayuki Machida   Joan Bennett   Gwo Fang Yuan	Japan
<b>Area 7</b>	<b>- Biological Chemistry</b>		
5	Chemical Biology of Botulinum Neurotoxin	William Metz   Kim Janda   Patrick Toy   Ikuo Fujii	United States

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
41	Frontiers in Peptide Chemistry: Synthesis and Applications	William D. Lubell   Shiroh Futaki   A. Ian Smith   Jeffery W. Kelly   John C. Vederas   Steven L. Castle   Craig A. Hutton   Dawei Ma	Canada
43	Biomolecular Structure and Dynamics - Recent Advances in NMR	Angela Gronenborn   Mitsuhiro Ikura   Weontae Lee   Raymond Norton   Ichio Shimada   Tai-Huang Huang	United States
55	Molecular Control of Stem Cell Fate	Dave Winkler   Shen Ding   Peter Zandstra   Connie Eaves	Australia
58	Advances in Solid-State NMR of Biological Molecules	Akira Naito   Ayyalusamy Ramamoorthy   Frances Separovic   M. Auger	Japan
76	Pectin: Affect on Structural and Functional Properties by Enzyme or Chemical Modification	Gary Luzio   Haruki Yamada   Martin A. K. Williams	United States
90	Polypharmacology for Drug Discovery	Guenter Grethe   Tsuneaki Sakata   Rajarshi Guha   Corey Nislow   Richard Horuk	United States
93	Studying the Chemistry Inside Living Cells with Infrared Spectromicroscopy	Thomas Ellis   Michael Martin   Baydon Wood   Karen Tanino	Canada
105	Biomarkers: PET/SPECT Imaging	Gilles Tamagnan   Henry VanBrocklin   Andrew Katsifis   Michael Adams   Yasuhisa Fujibayashi	United States
106	Biosynthesis of Natural Products	John Vederas   Craig Townsend   Ikuro Abe	Canada
117	Chemical Approaches to Astrobiology	Kensei Kobayashi   George Cody   Rafael Navarro-Gonzalez	Japan
119	Gas-Sensor Proteins/Enzymes: Molecular Mechanisms of Gas Sensing and Intra-Molecular Signal Transduction	Toru Shimizu   Ruma Banerjee   Daniel Peet	Japan
129	Bioorganic Reaction Mechanisms	John Richard   Jeffrey Keillor   Jun Hiratake	United States
149	Protein, Peptide, and Peptidomimetics Design	Richard Cheng   Kazuaki Kudo   Joel Schneider   Ping-Chiang Lyu	Taiwan
200	Carbohydrate Recognition in Health and Disease	Binghe Wang   Geert-Jan Boons   David Vocadlo   Koichi Fukase	United States
208	New Frontiers of Functional Nucleic Acids: Chemistry, Biology and Applications	Zhen Huang   Yingfu Li   Yi Lu   Scott Silverman   Hiroaki Suga   Naoki Sugimoto	United States
213	Protein Alteration by Mutagenesis and Chemical Modification: Applications in Biochemistry, Drug Discovery, Diagnostics, and Nutrition	Ronald Kluger   Hiroshi Ueno   Frank Jordan   Thomas Muir   Deborah Zamble   Mark Nitz	Canada
235	Recent Advances in Research on Leukotrienes and Prostaglandins in Inflammatory and Respiratory Diseases	Robert Young   Pepi Prasit   Hiroaki Ueno	Canada
244	Frontiers in Ubiquitin Research: Structures, Mechanisms, Biology and Drug Development	Koichi Kato   Claudio Joazeiro   David Vaux	Japan
256	Frontiers of Metalloproteins in Biology	Koichiro Ishimori   A. Grant Mauk   Michael T. Green	Japan
278	Molecular Recognition of Nucleic Acids: Biological Applications	Peter B. Dervan   Hiroshi Sugiyama   William Denny	United States

**PACIFICHEM 2010  
Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
<b>Area 8 - Environmental Chemistry</b>			
2	Interfacial Chemistry: Fate, Transport, and Adsorption of Nanoparticles, Biocolloids, and Trace Organics in Aquatic Systems	Helen Nguyen   Nathalie Tufenkji   Long Nghiem   Sangyoup Lee   Benito J. Marinas   Shinya Echigo	United States
23	Environmental Forensics	Steve Machermer   Robert Morrison   Peiyan Sun   Zhendi Wang	United States
26	Chemistry of Ultraviolet Treatment for Water	Gordon Knight   Wenjun Liu   Martha MJ Wells	Canada
48	Sources, Transport, Fate, and Behaviour of Global Contaminants	Jonathan Martin   Nobuyoshi Yamashita   Paul Kwan Sing LAM	Canada
73	Free Radical Chemistry in the Environment	William Cooper   Barrie M. Peake   Henrik Kjaergaard   T. David Waite	United States
83	Environment Friendly Syntheses Using Ionic Liquids	Toshiyuki Itoh   Sanjay V. Malhotra   Teck-Peng Loh   Dae Yoon Chi	Japan
86	Recycling of Polymeric Waste Materials: Challenges and Perspectives	Toshiaki Yoshioka   Yu-Zhong Wang   Soo-Hyun Chung   Bhaskar Thallada	Japan
128	Green Electrochemistry	Toshio Fuchigami   Jean Lessard   Kevin D. Moeller   Tse-Chuan Chou	Japan
131	Chemistry of Post Combustion Carbon Dioxide Capture	Moetaz Attalla   Paul Gemperline   Yuichi Fujioka	Australia
237	Environmental Chemistry of Aerosols	Alexander Laskin   Sergey Nizkorodov   Allan Bertram   Ruth Signorell   Xin Yang   Chak Chan	United States
247	Sonochemistry & Sonoprocessing	Kenneth S. Suslick   Franz Grieser   Takahide Kimura   Feng Ruo	United States
250	Innovative Green Chemistry with Microwave Energy	Takeko Matsumura   Rajender S. Varma   Nguyen Tran   Shozo Yanagida   Satoshi Horikoshi	Japan
262	Challenges of Heterogeneous Catalysts for Environmental-Benign Materials Conversions	Kohki Ebitani   Yong Wang   Kim Jong-Ho	Japan
<b>Area 9 - Materials &amp; Nanotechnology</b>			
13	Nanoparticles and Nanoparticle-based Materials: Synthesis, Characterization, and Applications	Lyudmila Bronstein   Rachel Caruso   Matthew Moffit   Yukihiko Nishikawa	United States
65	Measurement Sciences for Life Cycle Performance of Nanomaterials and Nanocomposites	Tinh Nguyen   Charles Han   Mathew Celina   Haeseong Lee	United States
77	Titanium Dioxide: Synthesis and Applications for Energy, Environment, and Devices	Matthew Tarr   Teruhisa Ohno   Wonyong Choi   Rose Amal	United States
92	Ionic Liquids in a Sustainable World	Robin D Rogers   Douglas MacFarlane   Hiroyuki Ohno	United States
104	Synchrotron Radiation: Emerging Techniques and Applications	Tsun-Kong Sham   Lin X. Chen   Asakura Kiyotaka	Canada
120	Nitroxide Radicals: Synthesis and Advanced Bio- and Nano-materials' Applications	Alex Smirnov   Rui Tamura   Steven Bottle   Steven Bottle	United States
121	Green Biomacromolecular Materials and Biocomposites	Kaichang Li   Frank Ko   Zhen Tong	United States
123	Nanofluidics and Chemical Manipulations in Restricted Environments	Paul Bohn   Suresh Bhatia   KY Chan	United States

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
135	Carbon Nanotubes and Nano-Carbon Materials: Preparation, Characterization, and Applications	Shigeo Maruyama   R. Bruce Weisman   Jie Liu   Young Hee Lee	Japan
141	Emerging perovskite and spinel compounds for materials science and applications	Kazunari YAMAURA   John MITCHELL   Xiaolin WANG	Japan
142	Fundamentals and Applications of Nanomaterials for Electronics and Photonics	Naoto Tsutsumi   Alamgir Karim   Andrew Groth	Japan
165	New Materials and Concepts for Next Generation Membranes	Douglas Gin   Kazukiyo Nagai   Normand Voyer	United States
168	Supramolecular Nanoassemblies and Extended Frameworks	Masahiko Iyoda   Nobuo Kimizuka   Seiji Shinkai   Omar M. Yaghi   Kimoon Kim	Japan
178	Design of Zeolite Catalysts for Clean Synthesis of Chemicals	Takashi Tatsumi   Chunshan Song   Sang-Eon Park	Japan
182	Computational Chemistry in Materials and Nanotechnology	Lichang Wang   Julian Gale   Minhua Zhang   Jer-Lai Kuo	United States
184	Standard Reference Materials and Methods for Nanotechnology	Jan Herrmann   Hyun Min Park   Vince Hackley   Toshiyuki Fujimoto	Australia
202	Liquid Crystals in Materials Chemistry	S. Holger Eichhorn   Vance Williams   Yo Shimizu   C. Allan Guymon	Canada
224	Polymer/Organic Solar Cells	Frederik Krebs   Mats Andersson   Tom Aernouts   Steven Holdcroft   Ching Ting   Lixiang Wang   Hongzheng Chen	Denmark
225	Organic Electronic Materials: From Small Molecules to Conducting Polymers	Hsiao-hua Yu   Man-kit Leung   J. Travas-Sejdic   Jinsang Kim	Japan
226	Biological and Bio-Inspired Materials Synthesis and Assembly	T. Yong-Jin Han   Jim De Yoreo   Tadashi Matsunaga   Ichiro Yamashita   Ruikang Tang	United States
233	High-Performance Solution-Processed Materials for Electronic/Optoelectronic Device Applications	Gregory Herman   Jooho Moon   Hiromitsu Kozuka	United States
242	Self and Directed Assembly of Small Molecules, Macromolecules and Colloids	Calum Drummond   Eric W. Kaler   Tadashi Kato   Junbai Li	Australia
264	Inorganic Nanowires: Syntheses and Growth Mechanisms	Tomoji Kawai   Tomohiko Yamaguchi   Peidong Yang   Oliver Steinbock   Do Sung Huh	Japan
272	Redox Processes on Nanoparticles, Nanomaterials, and Nanostructured Systems in the Environment	Dionysios (Dion) Dionysiou   Wonyong Choi   Woojin Lee   Kelvin B. Gregory   Gregory V. Lowry   T. David Waite	United States
<b>Area 10 - Alternate Energy Technology</b>			
69	Advances in Chemistry and Materials for Hydrogen Storage	Tom Autrey   Craig Jensen   Mark Bowden   Shin-ichi Orimo	United States
122	Nanoporous Materials for Renewable Energy and Chemicals	Michael Tsapatsis   Kyung-Byung Yoon   Tatsuya Okubo   Shilun Qiu	United States
172	Clean Fuels from Coal, Natural Gas and Biomass	Charles Peden   Yizhuo Han   Noritatsu Tsubaki   Heon Jung   Yong Wang   Charles Mims   Tao Zhang   Dongke Zhang	United States
176	Thermochemical and Metal-Catalyzed Transformations of Biomass to Petrochemical Feedstocks, Polymer Precursors and Fuels.	Marcel Schlaf   Keichi Tomishige   Robert C. Brown	Canada
180	The Chemistry, Structure, and Properties of Fuel Cell Membranes	Michael Hickner   Michael Eikerling   Qing Wang   Kenji Miyatake   Stephen Paddison	United States

**PACIFICHEM 2010**  
**Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
205	Nanocatalysis for Fuels and Chemicals	Ajay Dalai   Kevin J. Smith   Burt H. Davis   Azhar Uddin   Santosh Gangwal   Nicolas Abatzoglou   Ahmad Tavasoli   Janusz Kozinski	Canada
221	Bioconversion of Lignocellulose to Fuel Ethanol, Chemicals and Materials	Junyong Zhu   Xiao Zhang   Xu Yan   Xuejun Pan	United States
238	Light Driven Generation of Hydrogen from Water	Sang Ook Kang   Richard Eisenberg   Shunichi Fukuzumi   Ken Sakai   Kazunari Domen	Korea
266	Petroleomics: A Roadmap for Better Extraction and Processing of Petroleum	Alan Marshall   John Headley   Sunghwan Kim	United States
<b>Area 11 - Chemistry Outreach to the Community</b>			
28	Green Chemistry and Micro/Small Scale Chemistry in the Curriculum	Kazuko Ogino   Mary Kirchhoff   Supawan Tantayanon	Japan
99	The Two-Sides of Research and Development	Jeffrey Cutler   Stephen Wasserman   Ivan Kempson	Canada
154	Best Practices for Teaching Chemistry at Every Level	Zafra Lerman   Lucy P. Eubanks   Ghislain Deslongchamps   Haruhiko Tanaka   Choon Do	United States
185	Women at the Forefront of the Time: Challenges toward Next Decades	E. Ann Nalley   Yoshie Souma   So-Yeop Han	United States
203	Chemical Security and Safety in the University and the Laboratory	Nancy Jackson   Supawan Tantayanon	United States
245	Pharmaceutical and Chemical Patent Protection and Enforcement Around the Pacific Basin	Justin Hasford   Michele Bosch   Gary Ma	United States
246	Visualization in Chemical Education	Haruo Ogawa   Mei-Hung Chiu   David Katz   Choon Do   Akira Ikuo	Japan
273	Cultural Influences on Professional Ethics	David Chesney   Peter G. Mahaffy   Kieran F. Lim	United States
<b>Area 12 - Health &amp; Technology</b>			
3	Advances in the Chemistry of Targeted Radionuclide Therapy	D. Scott Wilbur   Michael Adam   Yasushi Arano   Suzanne Smith   Jae Min Jeong	United States
11	Biological Interactions of Engineered Nanoparticles: Novel Functions and Nanosafety Issues	Yuliang Zhao   Chris Metcalfe   Borm Paul   Vicki Colvin   Maxine McCall	China
71	Photodynamic Therapy and Photodetection	Norio Miyoshi   Janet Morgan   Qian Peng   Roy Pottier	Japan
110	Understanding the Chemistry of Phytochemical Antioxidants and their Role in Human Health and Wellness	Rong Tsao   Liangli (Lucy) Yu   Fereidoon Shahidi   Junji Terao	Canada
114	Chemistry, Safety, Quality and Regulatory Aspects of Functional Food Ingredients, Nutraceuticals and Natural Health Products	Fereidoon Shahidi   Chi-Tang Ho   Makoto Shimizu	Canada
153	Nucleic Acid Based Therapeutics	Muthiah Manoharan   Masad J. Damha   Akira Matsuda	United States
175	Tuberculosis drug development in the Pacific Rim	Pilho Kim   Clifton BARRY, 3rd   Brent Copp	Korea
192	G-quadruplexes and i-motifs: Structures, Biological Roles, and Therapeutic and Technological Applications	Laurence Hurley   Hiroshi Sugiyama   Dipankar Sen	United States
223	New Aspects of Chemical Glycobiology toward Development of new Diagnostics and Therapeutics	Koichi Fukase   Kwan Soo Kim   Todd Lowary   Yasuhiro Kajihara   Chun-Hung Lin	Japan



**PACIFICHEM 2010  
Technical Symposia**

#分野 Symp-ID	Symposium	Corresponding Organizer(先頭太字), Coorganizers	Country
271	Advances in Nanomedicine 2010	Alexander Wei   David Cramb   Ick Chan Kwon   Masayuki Yokoyama	United States
284	Assembling New Biomedical Materials for Tissue Regeneration	John Ramshaw   Tatsuya Shimizu   Shuguang Zhang	Australia
<b>Area 13 - Security</b>			
44	LIBS Detection of CBRNE Threats	Andrzej Miziolek   Bruce Chadwick   Kiichiro Kagawa   Koo Kurniawan   Guy Ontai   Mohamed Sabsabi   Shiv Sharma	United States
137	Targeting Chemical and Biological Warfare Agents	Ashok Mulchandani   Shin-ichiro Suye   Amarjeet Bassi	United States
167	Smart Materials and Devices for CBRNE Detection	Yonggang Zhu   Joseph Wang   Yoshinobu Baba   Joseph Wang	Australia
201	Sampling and Analysis of Weapons of Mass Destruction (WMD) Threats for Antiterrorism Purposes	Armando Alcaraz   Carmela Jackson-Lepage   Sng Mui Tiang	United States
240	Spectroscopic, Radioanalytical and Nuclear Methods for Security Applications	Sue Clark   Linfeng Rao   K. S. Song   Daming Liu	United States
281	Laser-Based Detection of CBE Threats	Paul J. Dagdigian   David S. Moore   Mark Buntine   Michael W. P. Petryk	United States
	※シンポジウムの最新情報はPACIFICHEM 2010専用Webをご覧ください。		
	<a href="http://www.pacificchem.org/symposia/">http://www.pacificchem.org/symposia/</a>		

# 2010 環太平洋国際化学会議 PACIFICHEM 2010

～2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies～

## 講演ハイライト

下記ホームページからオリジナルの講演要旨をご照会ください。

<http://pacificchem.abstractcentral.com/planner.jsp>

記載されています Email アドレス中の(at)は、@に置き換えて  
ご使用くださいますようお願いいたします。

## # 1-39 Innovation in Chemical Sensing and Separation Systems toward Advanced Chemical Analysis

### 先端分析技術のための分離と化学計測の新展開

【オーガナイザー】: 早下隆士 (上智大) | Richard A. Bartsch (テキサス工科大) | Hasuck Kim (ソウル大) | 壹岐伸彦 (東北大) | 童愛軍 (清華大)

【開催日】: 12月16日 (木) 午前・午後・夕方

【会場】: 口頭発表 Room 323C (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

分析化学は、社会安全性を基盤とする、あらゆる物質計測に関する方法を提案し、問題解決の方法を提示する学問である。新しい 21 世紀の分析技術を創出するために、3 つの境界条件として、1) Real-Life (実生活上のニーズに対応した)、2) Real-Time (その場で)、および 3) Real-Opportunity (技術への現実的に可能なアクセス、すなわち誰でも) を考えねばならない。例えば、ダイオキシンの分析は、現在ガスクロマトグラフィー/質量分析法によって行われているが、分析値が出るまでの全操作の 80% は試料処理にあり、その成否が分析値の精度と確度を決めている。本シンポジウムでは、境界条件 (3R) を充足して、社会安全性の確保に関わる分析法や試料処理法を柔軟に創出するための分析技術のモチーフとして、新しい分離システムや化学計測に関わる要素技術の可能性を探り展望する。

ハイライト 土壤汚染の有害重金属を高感度・迅速に計測する新手法

【日時】 12月16日 (木) 午後 2 時 40 分～3 時 【会場】 323C (Convention Center)

【講演番号】 ID 176 口頭

Highly selective and sensitive method to determine ppb levels of exchangeable Cd and Pb in soil using rapid leaching with thiocalixarene and detection with kinetic differentiation mode HPLC

チアカリックスアレーン迅速溶出法と速度論的識別モード HPLC を用いる ppb レベルの交換態 Cd, Pb の高感度高選択的定量

○壹岐伸彦, 狩野恵太, 星野 仁 (所属) 東北大学大学院 環境科学研究科

カドミウム(Cd)や鉛(Pb)など重金属で土壤が汚染された場合、雨水等で容易に溶け出す“交換態 Cd, Pb”による地下水系への汚染拡大が懸念される。土壤汚染対策法の施行も相まって、土壤中の交換態 Cd, Pb の迅速かつ高感度な定量法が求められている。しかし公定法では土壤試料を水で 6 時間抽出して検液を作成し、高コストかつ高度なインフラを必要とする原子分光学的な手法でこれらを定量しており、そのユーザビリティは高いとはいえない。最近発表者らは重金属イオンに高い親和性を持つチアカリックスアレーン(TCA)を土壤からの検液作成時に用い、交換態 Cd, Pb を選択的に 10 分以内に溶出させることに成功した。これらを金属キレート(ML)に変換し、高速液体クロマトグラフィー(HPLC)で分離検出することにより ppb レベルの Cd, Pb の定量ができた (検出限界は Cd: 0.63, Pb: 2.7 ppb, ppb =  $10^{-9}$  g/ml)。これは土壤汚染対策法で定める基準を判別するのに十分な感度である。本法は 100 倍量の銅、コバルト、ニッケル、マンガン、亜鉛が検液中に存在しても妨害を受けない。また、鉄イオンについては 4 mM のフッ化物イオンを添加すれば 1000 倍量の共存を許容できる。以上のように、本法は迅速、高感度かつユーザビリティの高い手法であり、公定法に替わるイノベーティブな手法である。これは TCA による物質認識と HPLC 分離検出という化学機能の協奏により実現した。



【連絡先】 東北大学大学院 環境科学研究科, 980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-07, E-mail: iki(at)m.tohoku.ac.jp

## # 56 Recent Advances in Bioanalysis: Ultra-Small Volumes, Global Metabolite Profiling and Single Cells

### バイオ分析の最近の進歩－超微量解析・代謝産物プロファイリング・単一細胞解析

【オーガナイザー】: Daniel Chiu (Univ Washington) | Philip Britz-McKibbin (McMaster Univ) | Koji Otsuka (Kyoto Univ) | Steven Boxer (Stanford Univ) | Tadashi Matsunaga (Tokyo Univ Agr & Technol)

【開催日】: 12月17日(金) 午後、18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表: 305A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

#### 展 望

このシンポジウムでは超高感度バイオ分析における最近の進歩をハイライトし、三日間に渡って、超微量解析・代謝産物プロファイリング・単一細胞解析をキーワードに当該分野における最先端の研究を紹介する。初日は、生化学や細胞解析分野における最新の超微量解析技術に焦点を当て、近年著しい発展を遂げているマイクロ流体デバイス内での脂質小胞やドロップレット形成技術などを取り上げる。2日目は、主にメタボロミクス解析に向けた近年の質量分析法の進展に焦点を当て、新しい計測装置や多変量データ解析手法、バイオマーカー探索の実例などまでを取り上げる。最終日は、細胞という生命の最小単位を解析対象とした単一細胞解析に注目する。過去10年間で単一細胞を対象とした様々な解析手法が提案され、生命現象の理解は著しく進展している。本セッションでは特に、単一細胞を対象とした新規イメージング技術やシーケンスに関する新技术をトピックとしている。

#### ハイライト ナノスケールの針で細胞を操作

【日時】12月19日(日) 午前8時50分～9時10分

【会場】305A (Convention Center) 【講演番号】ID880 口頭

Analysis of Intracellular Molecules in a Living Cell Using a Nanoneedle Functionalized with Molecular Probes

機能性ナノ針を用いた生細胞解析

○中村 史<sup>1,3</sup>、木原隆典<sup>2</sup>、雨宮陽介<sup>1,3</sup>、吉田成寿<sup>2</sup>、北川太郎<sup>3</sup>、三枝真吾<sup>3</sup>、中村徳幸<sup>1,3</sup>、三宅 淳<sup>2</sup>  
(所属)<sup>1</sup>産業技術総合研究所、<sup>2</sup>東京大学、<sup>3</sup>東京農工大学

細胞は、非常に柔らかい物体であって、細胞に対して機械的な接触動作を行うには非常にソフトで繊細な「指」が必要であり、その指を正確に動かす手、腕に代わる道具が必要である。演者らはこうした道具としてナノスケールの針(ナノ針)を使って、ダメージ少なく細胞に針挿入操作を行う技術を開発している。原子間力顕微鏡を用いて微小な力の検出を行いながらナノ針を細胞に挿入し細胞の解析・操作を行う技術は「セルサージェリー」と呼ばれ、これまでに細胞内への物質導入法や、細胞内物質の検知法の開発を行っている。最近の研究では、核酸や抗体で修飾したナノ針を使用して細胞内部へと挿入することで、生きた細胞内部の mRNA や細胞骨格タンパク質を検出することが出来るようになった。これらの技術は、遺伝子配列のミスマッチやある種の細胞内骨格タンパク質の発現を生細胞内で検知することが出来るため、未分化細胞と分化細胞の選別への応用などが期待できる。

【連絡先】E-mail: chikashi-nakamura(at)aist.go.jp

#### ハイライト 一つの細胞内の遺伝子発現を精密解析

【日時】12月19日(日) 午前9時50分～10時10分

【会場】305A (Convention Center) 【講演番号】ID 882 口頭

Evaluation of mRNA and Protein Expressions at Single-Cell Level

単一細胞レベルでの mRNA とタンパク質発現の定量的評価

○珠玖 仁、岡崎大甫、伊野浩介、末永智一(所属) 東北大学

これまでの細胞解析はディッシュ内や組織内の細胞集団を一括りにし、平均値としての細胞応答を計測してきた。しかしながら、近年では細胞集団内の個々の細胞応答の不均質性が明らかにされ、単一細胞レベルでの計測が重要視されてきている。演者らはこれまでに、単一細胞の mRNA を回収し定量する手法などを確立してきた。近年では、レポーターシステムとして、ルシフェラーゼ、緑色蛍光タンパク質(GFP)、分泌型アルカリフォスファターゼなどの発現系を用い、化学発光測定、蛍光測定、電気化学測定という異なるアプローチでタンパク質レベルでの発現量を評価し、mRNA 発現と比較している。最近の研究からは、細胞内の mRNA とタンパク質の発現量の相関は極めて低いことがわかっており、最先端の単一細胞解析技術によって個々の細胞内での遺伝子発現メカニズムが明らかにされつつある。

【連絡先】E-mail: shiku(at)bioinfo.che.tohoku.ac.jp

## #113 New Frontiers in Separation Science

## 分離科学の最前線

【オーガナイザー】岡田哲男（東工大）| Marc Porter（University of Utah） | Paul Haddad（University of Tasmania）

【開催日】：12月15日（水）午前・午後、16日（木）夕方

【会場】：口頭発表： 323C (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

化学の研究は、試料調整、合成、測定など複数の段階を含むことが多い。このうち少なくとも一つの過程には、物質分離が含まれている。また、分離により初めて明らかになる現象も少なくない。つまり、物質の分離は化学の研究における必須の基盤技術であり、先端を開拓するための方法論でもある。これまでに多くの分離原理や概念が創出され、その結果多くの物質を高選択的に分離できるようになっている。しかし、種々の機能を持つ物質が新たに生み出され、大きさ、構造、寿命等の種々の点で複雑さを増している。その結果、さらに高い分離能、選択性、機能、信頼性をもつ方法が求められている。これらを達成するには、新しい原理やそれに基づく分離法を開発することが重要であり、また、分離の駆動力をマイクロ～マクロに至る広いレベルで解明することが重要である。このシンポジウムでは、分離の新原理創出と分離過程の解明の観点から、分離科学の最前線に関わる研究者が集まり、議論することを目的としている。新分離原理の開拓と分離法の開発に加えて、分離が起こる界面に焦点を当て、そこでの分子挙動や分子構造を知るための新たな方法の提案や、解析などの研究を含んでいる。

## ハイライト 疎水性表面の水機能

【日時】12月15日（水）午前10時25分～10時55分 【会場】323C (Convention Center)

【講演番号】ID 27 口頭

### Detection And Quantification of Water Structuring and Functioning as a Separation Medium in Solvation Shells on Hydrophobic Surfaces by Liquid Chromatography

疎水性界面の溶媒和殻の分離媒体としての機能と水の構造化

○渋川雅美 他 （所属）埼玉大学大学院理工学研究科

疎水性相互作用は物質分離だけでなく、生体内の分子認識や機能においても重要な役割を果たしている。疎水性界面での水の構造化について表面選択的な分光学的測定法や分子動力学計算などのより検討が進められているが、実験的方法による検証は適用できる手法が少ないこともあり、研究例が少ない。特に疎水性表面における溶媒和殻内での構造化水の量や構造化水薄層の厚さなど量に関する研究例はなく、そのための手法が求められている。このような構造化水は通常の水とは異なる機能をもち、分子間相互作用も随中途は異なることが期待され、様々な観点からの解明が求められている。本研究では、通常物質分離に用いられる実用的手段である液体クロマトグラフィーを用いて、疎水性表面での水の薄層をプローブする方法を提案する。この目的のために、無機イオンや低分子の有機物を分子プローブとして用い、これらがバルク水と疎水表面の水薄層間に分配され、分離されることを利用し、この結果から、疎水表面で構造化した水薄層の厚さを決定し、水薄層の存在により生じる分離機能について議論を行う。

【連絡先】338-8570 埼玉県さいたま市桜区下大久保 255

電話 048-858-3520

E-mail: sibukawa(at)apc.saitama-u.ac.jp



ハイライト 氷を用いる光学分離

【日時】12月16日(木)午後7時~9時

【会場】Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

【講演番号】ID 336 ポスター

Chiral Ice Chromatography

キラルアイスクロマトグラフィー

○社本泰樹 他(所属)東京工業大学大学院理工学研究科

医薬品の製造・分析をはじめとして、多くの分野でキラル分離が行われており、現代の人類社会において不可欠の分離法になっている。キラル認識能をもつ物質を固体上に化学結合し、それを固定相とするクロマトグラフィーが有効な手法として広く用いられているが、極めて複雑な合成技術を必要とする。この研究では、合成手法を全く用いずにキラル認識能をもつ物質を固定相上に導入する方法を提案する。このグループが独自に開発したアイスクロマトグラフィーを光学分離に敷衍したものであり、キラル認識物質の水溶液を塩と共に凍結するだけでキラル氷固定相を調製できる。共晶点以下の温度では、塩の水溶液は塩の結晶と氷からなる固体になる。それに対し、共晶点以上融点以下の温度では、塩の水溶液と氷が共存する。キラルアイスクロマトグラフィーでは、このような温度帯を利用し、氷共存水溶液中でキラル認識を起こさせることによって、キラル分離を達成している。詳細な検討から、氷共存水溶液相ではキラル認識能をもつ物質の機能が向上していることが示唆されている。安価で、多量供給可能な新しいキラル固定相開発への展開が期待される。

【連絡先】152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1 東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻 岡田哲男  
電話 03-5734-2612  
E-mail: tokada(at)chem.titech.ac.jp

## #01-145 Analytical Applications and New Technical Developments of Soft X-Ray Spectroscopy

### 軟X線分光の分析応用と最新技術の進展

【オーガナイザー】村松康司（兵庫県立大） | 脇田久伸 | 河合潤 | Dennis Lindle | Louis Terminello | Clemens Heske | Anthony Buuren | Rupert Perera | Alexander Moewes | Frank Larkins | Chris Glover | Jinho Ahn | Bong Soo Kim

【開催日】：12月18日（土）午前・午後、19日（日）午前

【会場】：口頭発表会場; 301A (Convention Center)

ポスター会場; Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

物質を原子・分子レベルで詳細に解析できる軟X線分析技術の進歩は目覚ましく、ナノテクノロジーは勿論のこと、環境・エネルギー分野やバイオテクノロジー分野へも急速に応用されてきました。軟X線分光・分析に関するこのシンポジウムでは、今後期待される革新的な軟X線分光計測技術を展望しながら、新しい分析領域への展開について討論します。

#### ハイライト SPring-8 東京大学ビームラインの最新ナノデバイス解析技術

【日時】12月18日(土)午前9時25分～10時05分 【会場】301A (Convention Center)

【講演番号】658 口頭発表(招待講演)

3-D Photoelectron Microscopy and Soft X-ray Emission Spectroscopy for Nanodevices at SPring-8 University of Tokyo Beamline

SPring-8 東京大学ビームラインにおけるナノデバイス解析用3次元ナノESCAと軟X線発光分光

○尾嶋正治（所属）東京大学大学院工学系研究科・東京大学放射光連携研究機構

東京大学放射光連携研究機構は超高輝度の軟X線を用いたナノデバイス解析用のビームラインをSPring-8に建設しました。環境に優しい省エネ型デバイスを開発するにはデバイスのナノ界面を詳しく調べる必要があります、そのため超高輝度の軟X線を用いた3次元ナノESCA装置と軟X線発光分光装置を開発しました。我々は50 meV、50 nmのピンポイント深さ方向分析を目指した3次元ナノESCA装置を開発し、現在92 nmの空間分解能で2次元分布や深さ方向分布が測定できるようになりました。これを用いて、LSI材料の解析を民間共同研究として行っています。一方、発光分光法は蛍光X線などを検出する手法であるため、大気中や水中などの環境下でも分析できます。しかしX線放出確率が小さいためになかなか実用的な解析が困難でした。そこで我々は超高輝度の軟X線をマイクロオーダーまで集光して試料に照射し、放出されるX線を高分解能で測定する軟X線発光分光装置を開発しました。現在のエネルギー分解能は180 meVですが、60 meVを目指します。燃料電池、Liイオン電池、拡張ナノ空間の水、生体物質などへの応用を考えています。

【連絡先】E-mail: oshima(at)sr.t.u-tokyo.ac.jp

#### ハイライト 特定の原子の励起・イオン化で明らかになるDNA変異のメカニズム

【日時】12月19日(日)午前10時00分～12時00分

【会場】Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

【講演番号】899 ポスター発表

Measurement of Unpaired Electron Species in Dry DNA Thin Films Irradiated with Synchrotron Soft X-rays around Oxygen and Nitrogen K-edge Studied by EPR

酸素・窒素のK殻イオン化でDNA薄膜中に生じた不対電子種のEPRによる測定

○岡壽崇<sup>1</sup>、横谷明徳<sup>1</sup>、藤井健太郎<sup>1</sup>、福田義博<sup>1</sup>、鶴飼正敏<sup>2</sup>（所属）<sup>1</sup>日本原子力研究開発機構、<sup>2</sup>東京農工大学工学研究院

DNAは生物の遺伝情報に必須な生体物質です。何らかの影響によって遺伝情報を担うDNA中の核酸塩基が変異を受けると遺伝情報が乱れ、様々な遺伝的障害が発生します。例えば紫外線や放射線被曝による発がんなどの主要な原因の一つとして、このようなDNA分子上の変異(突然変異)の蓄積があるとされています。本研究では、このDNA変異の中間体であるDNAラジカルを調べ、DNA変異誘発のメカニズムを明らかにすることを目的として、SPring-8の軟X線ビームライン(BL23SU)において軟X線照射しながらDNA上に生じる不対電子を「その場」測定できる世界唯一の電子スピン共鳴装置を開発しました。DNAを構成する酸素や窒素原子の1s電子を選択的に励起・イオン化したところ、DNAの周辺に結合している水分子(水和水)の酸素原子に生じた不対電子がDNAへ移動していることが示唆され、水和水が塩基変異の生成に大きな役割を果たしていることが明らかになりました。今後、このような水和水の影響を更に詳細に調べることで、DNA変異の物理化学過程の解明を目指します。

【連絡先】E-mail: oka.toshitaka(at)jaea.go.jp

## #166 Ionic Liquids for Analytical Chemistry and Analytical Chemistry for Ionic Liquids

### 分析化学のためのイオン液体およびイオン液体のための分析化学

【オーガナイザー】： 垣内 隆 (京大) | Daniel W. Armstrong (Univ. of Texas at Arlington) | Alan M. Bond (Monash Univ.)

【開催日】： 12月19日(日) 午前・午後、夜、20日(月) 午前、ポスター 18日(土) 夜

【会場】： 口頭発表：317A (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

イオン液体は、融点が室温付近以下の塩である。最近、きわめて多様なイオン液体が得られるようになり、水とも有機溶媒とも異なるその興味深い性質が次第に明らかにされつつある。極性有機溶媒と似た性質を持ちながら、蒸気圧が無視出来るほど小さいと言うのがイオン液体の最大の特徴であり、イオン液体の公約数である。イオン液体を特徴付けるためには、分析化学のあらゆる手法が必要とされ、また使われている。しかし、イオン液体のユニークな性質を明らかにするには既存の装置や技術だけでは十分ではなく、新しい手法の開発、方法論・概念の構築が必要となっている。一方、イオン液体という素材は、分析化学に新しい可能性を与えつつある。これらイオン液体に関する両方の視点からの研究成果を持ち寄り、今後の展開、方向、課題を明らかにすることがこのシンポジウムの目的である。イオン液体の国際会議、シンポジウムは近年、いくつか開かれているが、分析化学をキーワードとするシンポジウムはこれが初めてである。90年代はじめからイオン液体に注目し、この分野の研究を切り開いてきた第一線の研究者が多くこのシンポジウムに参加し、その成果、見解、意見を提示する。

ハイライト イオン液体膜を用いるレアメタルの選択的透過

【日時】 12月19日(日) 午前10時45分～11時15分

【会場】 317A (Convention Center)

【講演番号】 ID 876 口頭

### Selective permeation of rare earth metals by highly stable supported liquid membrane based on ionic liquids

高安定なイオン液体支持膜によるレアアースメタルの選択的透過

○後藤雅宏 (所属) 九州大学 大学院工学研究院

金属資源の乏しい我が国においては、これまで廃棄物として認識されていた二次資源いわゆる“都市鉱山”からの効率のよいレアメタルの回収技術の確立が望まれている。なかでもレアアースメタル(希土類)は、その資源の90%以上を中国からの輸入に頼っており、早急にリサイクル技術の確立が求められている。

本研究では、イオン液体を用いた液体膜を構築し、膜中にレアアースメタルを認識する新たな抽出剤を組み込むことによって、レアアースメタルのみを透過させる分離膜を開発することに成功した。液膜分離法は、抽出操作と回収操作が膜を挟んだ両界面で行うことが出来る非常に高効率な分離手法である。しかしこれまでの有機溶媒を使用する液膜では、膜が蒸発によって不安定となり、長期の運転は困難とされていた。今回使用したイオン液体は、蒸気圧が低くかつ原料の水と混和しないため10時間以上の長期操作においても安定な液膜を形成した。実際に、廃家電品(カラーテレビの蛍光管)からのレアアースメタル回収に応用したところ、多量に含まれる亜鉛イオンから少量のレアアースメタルのみを98%の分離効率で回収することに成功した。

【連絡先】 819-0395 福岡市西区元岡744 九州大学工学研究院応用化学部門

電話 092-802-2806, E-mail: m-goto(at)pmail.cstm.kyushu-u.ac.jp

ハイライト イオン液体を用いる人工筋肉

【日時】12月19日(日)午後8時45分～9時45分

【会場】317A (Convention Center)

【講演番号】ID 970 口頭

## Actuation mechanism of electrochemical artificial muscle device using ionic liquid-polymer composite

イオン液体-高分子複合材料を用いた電気化学人工筋肉デバイスの作動機構

○津田哲哉、坂尾連太郎、佐藤雄一、松本一彦\*、萩原理加\*、桑畑 進

(所属) 大阪大学大学院工学研究科、\*京都大学大学院エネルギー科学研究科

イオン液体には多くの特異な特徴があるが、本研究ではイオン液体の持つ難揮発性とイオン伝導性に着目して、メンテナンスフリーな電気化学人工筋肉デバイスを作製するとともに、その作動機構を分析化学的手法により検討した。

従来の電気化学人工筋肉デバイスは、一般的に水を含有した高分子材料(ゲル材料)を電解質として使用しており、電解質内の水が蒸発すると駆動しなくなるという弱点を有している。つまり、このデバイスを長期間にわたって駆動するには、電解質への水の補充が必須である。しかし、この水の代わりに難揮発性のイオン液体を使用することで、メンテナンスフリーな電気化学人工筋肉デバイスを作製することができる。このような観点からデバイスを作製したところ、イオン液体の種類によって、電圧印加時の屈曲挙動が全く異なるという興味深い現象を見出した(図1)。

イオン液体を用いた電気化学人工筋肉デバイスは、真空中でも駆動可能なため、エネルギー分散型X線分光法など、真空条件が必須である分析化学的手法による作動機構の解明が可能である。これもこのデバイスの大きな特徴である。これにより、従来では困難であった電圧印加時のイオン種の挙動を定性的に明らかとする手段を確立し、図1で示した屈曲挙動の変化や作動機構に関する知見を得ることに成功した。

【連絡先】565-0821 大阪府吹田市山田丘 2-1

大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻

電話・FAX : 06-6879-7374、E-mail : [ttsuda\(at\)chem.eng.osaka-u.ac.jp](mailto:ttsuda(at)chem.eng.osaka-u.ac.jp)

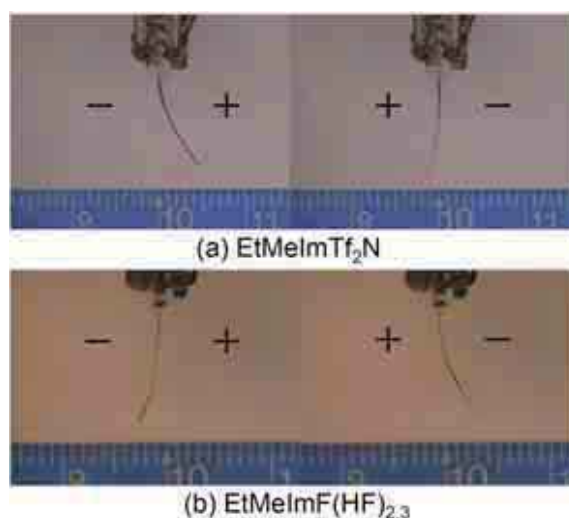


図1 イオン液体を用いた電気化学人工筋肉デバイスの駆動例。aとbの違いはアニオン(−イオン)の種類が異なる点である。写真にある+と−はそれぞれ正極側と負極側を表している。



## #181 Fluorescent Sensors by Design

## 蛍光センサーを巧妙にデザインする

【オーガナイザー】: M. McCarroll | D. Dyer | F. Li | 浦野泰照 (東大医)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表: 301B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

蛍光センサーを活用したライブイメージングは、現代の生物学研究に無くてはならないツールとなっており、新たな観測を実現するプローブの開発は、化学者に課せられた一つの大きな課題である。そこで本シンポジウムでは、従来は不可能であった画期的な観測を実現する蛍光プローブを、如何に化学的な観点から巧妙にデザインするかに焦点を絞り、この最前線で活躍している内外の若手研究者に、研究のフィロソフィーを含め大いに語ってもらう。

ハイライト 三本目の核酸を賢く使って、個人の DNA 塩基配列を正確かつ迅速に知る

【日時】12月19日(日) 午前8時10分~8時30分 【会場】301B (Convention Center)

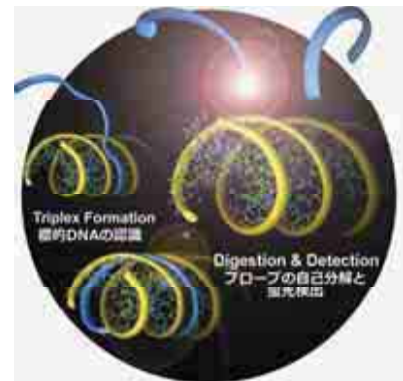
【講演番号】ID 851 口頭

## APAC Probes: Fluorescent Sensors for Sequence-Specific dsDNA Detection

二重鎖 DNA を配列特異的に検出する蛍光センサーの創製

○小比賀聡 (所属) 大阪大学 大学院薬学研究科

個々の患者の状態を正確に把握し、副作用の少ない有効な治療法を提供するテーラーメイド医療の実現には、個人の DNA 塩基配列を正確かつ迅速に知ることのできる遺伝子解析技術が必要不可欠である。今回我々は、独自の三重鎖人工核酸技術を駆使し、塩基配列特異的に自己分解反応を誘発する核酸プローブ中に、蛍光基や消光基を適切に搭載することで、DNA の簡便・迅速な蛍光検出を実現した。本成果はテーラーメイド医療を大いに促進するばかりか、がんやウイルス性疾患などの様々な疾病の新たな診断技術につながるものと期待される。



【連絡先】565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-6 大阪大学大学院薬学研究科

電話 06-6879-8200, E-mail: obika(at)phs.osaka-u.ac.jp

ハイライト 光るタンパク質を二つに分けると、生体分子の機能が見えてくる

【日時】12月19日(日) 午後12時50分~1時10分 【会場】301B (Convention Center)

【講演番号】ID 937 口頭

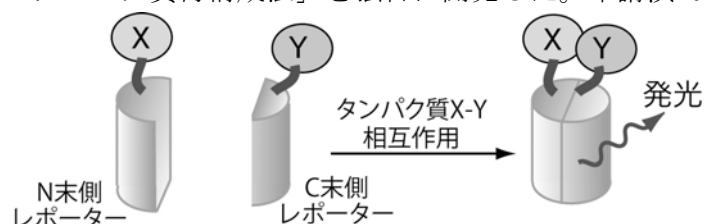
## Optical imaging using split-reporter reconstitution analysis: From single cells to living animals

レポータータンパク質再構成法を用いた光イメージング: 単一生細胞から動物まで

○小澤岳昌 (所属) 東京大学 大学院理学系研究科

細胞内や動物個体内ではたらく「生体分子の機能および動態」を分子レベルで解析することは、現在の生命科学研究における最も重要な課題である。我々は、二分割した蛍光タンパク質や生物発光タンパク質が、タンパク質間相互作用により自発的に会合し、蛍光・発光を回復することを原理とする「レポータータンパク質再構成法」を独自に開発した。本講演では、タンパク質間相互作用の定量検出や生細胞内のミトコンドリア

RNA のイメージング、オルガネラ局在タンパク質の網羅的解析、動物個体内の酵素活性可視化などへの活用と、医薬品開発への応用可能性について最新のデータを交えて紹介する。



レポータータンパク質再構成法の基本原理。2つに分割したレポーターが、タンパク質間相互作用等により近接すると、その発光能が回復する。

【連絡先】113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学大学院理学系研究科

電話 03-5841-4351, E-mail: ozawa(at)chem.s.u-tokyo.ac.jp

## # 1-198 Microfluidic and Nanofluidic Devices for Chemical and Biochemical Experimentation

ナノ・マイクロ流体デバイス 化学・生物学・医学への応用

【オーガナイザー】: H. John Crabtree | Stephen C. Jacobson | J. Michael Ramsey | 馬場嘉信 (名大)

【開催日】: 12月15日(水) 午後、16日(木) 午前・午後、17日(金) 午前

【会場】: 口頭発表 305A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

ナノテクノロジーを活用したナノ・マイクロ流体デバイスは、コンピュータの心臓部である半導体チップが電子・電気の流れで情報処理するのと同様に、液体の流れを活用して化合物、生体分子から細胞までを分析・操作できる新技術である。この新技術により、がんや認知症などの超早期診断から太陽電池・燃料電池開発まで幅広い応用が可能であり、ライフ・イノベーションやグリーン・イノベーションを創出するためのキーテクノロジーとして期待されている。本シンポジウムでは、ナノ・マイクロ流体デバイスの世界の最先端研究者にそれぞれの分野の最新情報を講演いただく予定である。

ハイライト 拡張ナノ空間がもたらすライフ・グリーンイノベーション

【日時】12月17日(金) 午前9時25分～9時50分 【会場】 305A (Convention Center)

【講演番号】ID 436 口頭

Extended-nano fluidic devices for analytical and green chemistry

拡張ナノ空間流体デバイスによる分析化学とグリーン化学

○北森武彦 (所属) 東京大学大学院工学系研究科

北森教授が提唱している拡張ナノ空間は、これまであまり研究されていなかった百～千 ナノメートルのデバイス中における水などの流体のこれまで未知であった特性を明らかにすることで、従来は不可能であった、新たなバイオテクノロジーやグリーンテクノロジーを開発できる大変魅力的な新技術である。拡張ナノ空間を活用したタンパク質の超高感度検出・超高速分離、次世代スパコンを超高性能化する熱変換デバイスや超高効率太陽電池システムなど、拡張ナノ空間がもたらす、未来のライフ・グリーンイノベーションが明らかになる。

【連絡先】 東京大学 北森武彦教授, E-mail: kitamori(at)icl.t.u-tokyo.ac.jp

ハイライト イムノピラーデバイスによるがんの超早期診断

【日時】12月17日(金) 午前10時40分～11時05分 【会場】 305A (Convention Center)

【講演番号】ID 439 口頭

Microfluidic devices for medical diagnostics

医療診断におけるマイクロ流体デバイス

○渡慶次学 (所属) 名古屋大学大学院工学研究科

渡慶次准教授は、マイクロ流体デバイス中に、ナノ細孔を有する新規樹脂により柱状構造を作成し、その中に抗体を有する微粒子を数万個トラップする新たなイムノピラーデバイスを開発した。このイムノピラーデバイスは、1滴以下の血液から、疾患に関連するタンパク質を従来法より100倍以上高感度に検出することに成功した。さらに、検出に要する時間は数分であり、これは従来法より数十倍高速化を達成している。この新技術により、従来法よりがんの初期段階の血中成分を検出することが可能になりがんの超早期診断と治療が可能になると期待される。しかも、デバイスは非常に安価で簡便に操作可能であり、いつでも・どこでも診断できる疾患のユビキタス診断を実現できる技術として期待される。

【連絡先】 名古屋大学 渡慶次学准教授, E-mail: tokeshi(at)apchem.nagoya-u.ac.jp

## #207 Advances in Flow-based Analytical Techniques

### 流れに基づく最先端分析化学技術

【オーガナイザー】: Ian MaKelvie (Australia Monash Univ) | 今任稔彦 (九大) | Kate Grudpan (Thailand Chiang Mai Univ) | Gary Christian (USA Washington Univ)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 301A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

近年、私たちの身の回りの環境の汚染状態の把握のために環境分析や食物や食品の安全性を確かめるための食品分析、私たちの健康状態のチェックや病気の診断あるいは各種産業における製品の工程管理や品質管理など、幅広い分野において分析化学の果たす役割は極めて大きくなっています。このような化学分析においては、目的とする特定の成分を選択的に、しかも高感度に迅速に測定する技術が要求されています。また、生化学的試料の場合には量的にも微量な場合が多いので微量分析が可能な分析法も要望されています。このような要望に応えるべく、このシンポジウムでは流れ系を利用して、環境分析、食品分析、臨床医療分析あるいは工業分析などの分野において、迅速に、しかも高感度、高選択的に分析する最先端の分析法について討論します。特に、このシンポジウムでは、試料の前処理法や濃縮法あるいは分離法などを流れ系に組み込むことによって複雑なマトリックスからの特定成分を選別したり、極めて微量な成分を濃縮する新しい技術が紹介されます。また、電気化学分析法、化学発光法、蛍光法あるいは ICP-MS などの高感度な検出法を流れの中で自由自在に使う分析法も紹介されます。



## ハイライト マイクロフロー系気化-捕集による溶存物質の微量分析

【日時】12月20日(月)午前7時35分~8時10分 【会場】301A(Convention Center)

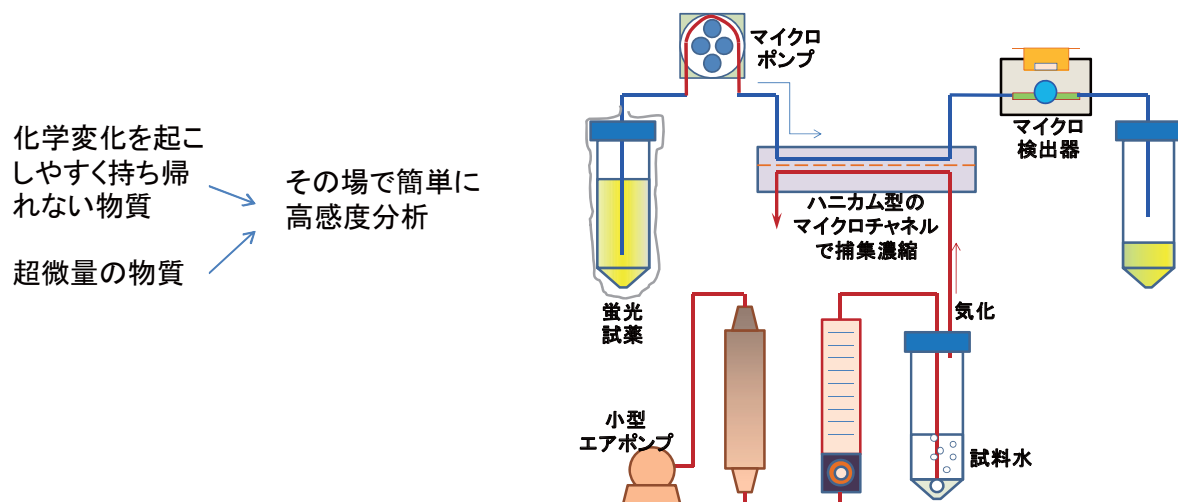
【講演番号】ID 1004 口頭

### Trace analysis of dissolved species by vaporization-collection micro flow system

#### マイクロフロー系気化-捕集による溶存物質の微量分析

○戸田 敬, 桑原明香, 大平慎一 (所属)熊本大学 大学院自然科学研究科

本報告は、水に溶存する化学物質を現場で分析するための新しい方法を提供するものです。湖水・河川水、海水や地下水などの天然水、さらには工場排水、農業・畜産排水など人為的に排出される水には様々な化学物質が含まれており、中には微量でもその影響の大きなものが多く存在します。その中でも揮発しやすいか、化学反応により気体に変換が可能な物質に注目し、微量でも簡便に測定できる方法を開発しました。プラスチックチューブに10 mL程度の試料水を採り、必要に応じて適当な試薬を添加して空気を通じると目的成分が気体となって追い出されます。それを蜂の巣(ハニカム)状に刻んだマイクロチャンネルに気体成分を捕集の上、適当な化学反応をさせて得られる蛍光をマイクロ検出器で測定します。この気化と捕集の組み合わせで目的の化学物質を1~2分で分離・濃縮します。例えば10 mLの試料水から得た気体物質を10  $\mu$ Lのマイクロチャンネルに濃縮すると直接測定するよりも1000倍の感度で分析することが可能です。しかも簡単にかつごく短時間で分析が可能です。本法が適用できる物質の範囲を定めるため基礎的理論的な解析を行い、その中でも水中の硫化水素について実地検証を行いました。水中に溶存する硫化水素は、高濃度では毒として働きますが、有害な重金属を水から取り除いたり、生物に必須な物質の構成要素であったり、微量の硫化水素は生体に重要な存在です。ただし、輸送中や保存中に消失してしまうので、実験室へ持ち帰ってからの分析が不可能です。本分析法では、水を採取してその場で分析が可能なので、水の実態を簡単に明らかにすることが可能になります。有明海沿岸に沿って海水を採取しその場分析を行ったところnM(10<sup>-9</sup> mol/L)オーダーという超微量の硫化物を検出することができました。また外洋よりも有明海内部の硫化水素濃度が高いことも示されました。本法により世界一水が美しいと言われるバイカル湖(世界最深・最古)の硫化水素濃度の分布も測定でき、生態系の評価に一役買うことができました。



【連絡先】860-8555 熊本市黒髪2-39-1 熊本大学

電話 096-342-3389, E-mail: todakei(at)sci.kumamoto-u.ac.jp

## # 255 (Bio-)Chemical/Electrochemical Sensors and Sensing Materials

### バイオセンサー、化学センサー、電気化学センサーおよびセンシング材料

【オーガナイザー】：鈴木孝治（慶大） | 丹羽修（産総研） | Daniel Citterio（慶大） | Eric Bakker (U. Geneve) | Phillippe Buhlman (U. Minnesota)

【開催日】：12月17日（金）午後、18日（土）午前・午後、

【会場】：口頭発表 301B (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

分析化学分野の重要な技術の中に、化学センサ、バイオセンサおよびセンシング技術があります。近年、生活の質(QOL)、安全、安心についての問題は私たちの日常生活における高い関心事ですが、これらに対応できる多くのセンサーが開発されつつあります。センサーは日本の得意分野で、今後ますます需要が増えると思われています。

このシンポジウムでは、新たな環境診断用センサー、健康診断用センサー、臨床検査用センサーなど、われわれの生活に直結する新しいセンサーやセンシング技術を紹介し、情報交換を行う場を提供します。

### ハイライト

【日時】12月18日（土）午後3時10分～3時30分 【会場】301B (Convention Center)

【講演番号】ID 716 口頭

Label-free, reagent-free, and “signal-on” DNA detection based on supramolecular electrochemistry

超分子電気化学に基づく遺伝子検出法

○ 青木寛（所属）産業技術総合研究所 環境管理技術研究部門

近年 DNA チップや遺伝子の蛍光標識技術が急速に発達し、遺伝子の網羅的解析技術の適応分野が研究室レベルから臨床レベルへとますます拡大しつつある。しかし、従来の遺伝子検出法は、多大な時間や労力を要するうえに定量性に欠け、未反応核酸の徹底洗浄が必要であるなど問題がある。その主な原因はターゲット遺伝子の蛍光標識化が必要なことである。そのため、このような煩雑なサンプル処理を大幅に省いた安価でコンパクトな新たな分析法の開発が望まれている。この研究では、この問題を解決でき、煩雑なターゲット遺伝子の標識化が不要な（ラベルフリー）電気化学的手法に基づいた遺伝子検出法の開発に成功した。

【連絡先】〒305-8569 茨城県つくば市小野川 16-1 産業技術総合研究所 環境管理技術研究部門, E-mail: aoki-h(at)aist.go.jp

## # 1-260 Novel Applications of Magnetic Fields in Analytical Chemistry

## 磁場を利用する新しい分析化学

【オーガナイザー】：渡會 仁 (阪大 INSD) |Ingrid Fritsch (U of Arkansas)|

Benjamin Yellen (Duke U) |C. B. Fuh (National Chi Nan U)

【開催日】：12月17日(金)午後、18日(土)午前・午後

【会場】：口頭発表 317A (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

分子や微粒子に磁場の微小な力を作用させて、分離・検出・イメージング法を開拓する新しい分析化学が始まっている。このシンポジウムは、分析化学の分野では初めての、新しい磁場利用を主題とする企画である。1 pN 以下の微小な磁気力を利用して、液体中や空気中の微粒子を移動させ、その速度から微粒子の磁氣的性質や含まれる元素濃度を知ることができる。また、磁場による配向を利用して、微結晶の集合化や材料の改質が行われている。電気化学と磁場の組み合わせも新たな発見をもたらしている。磁気ナノ粒子が新しい分析試薬として開発されている。磁気光学効果により、物質の磁性、 $\pi$ 電子性、キラリティーを画像化する可能性も見えてきた。磁場下での電極反応がキラル選択性表面を生み出すこともわかった。さらに、磁場により水の性質が変わることも明らかになった。これらの研究は、近未来の省エネルギー新分析法として、Green Nanotechnology の進展に貢献するものである。

## ハイライト 磁気水とは何か？

【日時】12月17日(金)午後3時40分～4時05分 【会場】317A (Convention Center)

【講演番号】ID 472

## Magnetic response of aqueous systems and analytical aspects

## 磁気処理水の分析化学的研究

本間祐太, G. Saravanan, 松下智久, 浜崎亜富, ○尾関寿美男 (所属) 信州大学理学部

酸素を含む水に磁気勾配を作用させると、表面張力、酸化還元特性、 $\text{CaCO}_3$ 沈殿の構造、IR・ラマンスペクトル等が通常の水とは異なる特殊な水の状態となる。しかし、この状態は1時間ほどで消失する。注意深く計画された詳細な研究により、その実態が科学的に明らかにされつつある。

【連絡先】390-8621 松本市旭 3-1-1 信州大学理学部化学科

E-mail: sozeki(at)shinshu-u.ac.jp

## ハイライト 粉末を単結晶に変える

【日時】12月18日(土)午前10時30分～10時50分 【会場】317A (Convention Center)

【講演番号】ID 682 口頭

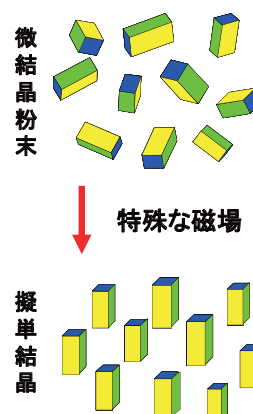
## Pseudo single crystal method: A novel approach to diffraction study

## 擬単結晶化法：回析法への新たなアプローチ

○木村恒久, 木村史子 (所属) 京都大学大学院農学研究科

粉末状の材料はたくさんあるが、もしこれらを固めて単結晶に変えることができればその用途は格段に広がる。しかしながら、バラバラの方向を向いた微粒子粉末をただ固めただけでは結晶にはならない。我々は特殊な磁場を用い微粒子をすべて同じ方向にそろえることにより、粉末試料を単結晶と同様の機能を持つ「擬単結晶」とすることに成功した。「擬単結晶」は単結晶と同等のX線、中性子線回折像を与えるので、大きな結晶ができないために解析に困っている蛋白質の構造解析を一気に前進させることができる。創薬分野での展開が期待される。

【連絡先】606-8502 京都市左京区北白川追分町 京大院農  
電話 075-753-6246, E-mail: tkimura(at)kais.kyoto-u.ac.jp



## #276. Non- and Minimally-Invasive Diagnostics of Biological Systems using Vibrational Spectroscopy

### 振動分光学による生命機構の無・少侵襲分析

【オーガナイザー】: Michael.W. Blades (U. British Columbia) | Michael D. Morris (U. Michigan) | 佐藤英俊 (関西学院大学)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・(ポスターセッション: 19:00~21:00)

【会場】: 口頭発表 317A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

生命科学, 医学分野における, 振動分光分析技術の最新技術を探求することが, このシンポジウムの目的です。世界では, 生体や細胞への影響が少ない「無・少侵襲」分析やイメージングを実現するため, 赤外・ラマン分光や, レーザー, 光ファイバー, テラヘルツ光を使った分析技術の研究が進められています。このような技術は, 生体に害のある色素などを利用しないで, 生細胞や組織の化学的組成の分析/画像化, がん等の病気の診断, 皮下深部組織の断層撮影, すなわち「痛みの無い・少ない医療技術」や「幹細胞を利用した再生医療」等を実現するために役立つでしょう。本シンポジウムでは2日間にわたり, 世界をリードする15人の招待講演を含め, 27演題が発表されます。

### ハイライト 細胞内分子ダイナミクスに迫る

【日時】 12月15日(水) 午前10時~10時30分

【会場】 317A (Convention Center),

【講演番号】 ID 17 口頭

### Raman microscopy for imaging molecular dynamics of living cells

ラマン顕微鏡を用いた生細胞の分子ダイナミクスの画像化

○藤田 克昌 (所属) 大阪大学 大学院工学研究科

ラマン分光法は試料にレーザー光を当てるだけでその分子組成を計測できる分析技術です。しかし, レーザー照射により生ずるラマン散乱光は非常に弱く, 画像を得るには長い時間が必要でした。藤田准教授はスリットスキニング法を用いたラマン分光イメージ計測技術により, 計測時間を大幅に短縮することに成功し, 生細胞や組織のラマンイメージ観測を実現しました。さらに金属ナノ粒子を利用してラマン散乱光を大幅に増強することにより, 細胞内のマクロファージというウィルスの状態を計測することに成功しました。

【連絡先】 565-0871 大阪府吹田市山田丘 2-1, 応用物理学棟 P2-313

電話 06-6879-7847, E-mail: fujita(at)ap.eng.osaka-u.ac.jp

### ハイライト 生体内の脂肪の計測: 医療から食品まで

【日時】 12月16日(木) 午前9時~9時20分

【会場】 317A (Convention Center),

【講演番号】 ID 119 口頭

### Characterization of adipose tissue in tumor using Raman spectroscopy

ラマン分光法による腫瘍組織内脂質の分析

○レトノ ハリヤニ, 竹谷皓規, 南和毅, ビビンB.アンドリアナ, 佐藤英俊

(所属) 関西学院大学 理工学部 生命科学科

肥満とがんの関係は古くから指摘されています。例えば, 食事の欧米化により乳がんや大腸がんが増加していると言われていています。しかし, その理由はまだよく分かっていません。ハリヤニさんのグループでは, ラマン分光法を利用して直接腫瘍周辺の脂肪組織を分析し,

その謎に迫ろうとしています。ラマン分光法により腫瘍組織内の脂肪に含まれる脂肪酸の組成を計測する技術を開発しました。さらに、細いラマン分光プローブとマウス用の内視鏡を用い、大腸がんモデルマウスを用いてがん周辺での脂質組成の変化を検出しようとしています。開発技術はがんの予防に利用できるだけでなく、牛肉の味を分析するためにも利用できます。ハリヤニさんのグループでは、ラマン分光法で牛肉の等級を分析する手法の開発も行っています。このように、ラマン分光法による脂質分析技術は医療から食品にいたる様々な分野で応用が期待できます。

**【連絡先】** 669-1337 三田市学園 2-1 関西学院大学 神戸三田キャンパス V号館 3F  
電話番号 079-565-7228



## # 02-020 Controlling the Structure and Properties of Solids

## 構造と特性を制御する固体化学

【オーガナイザー】: Brendan. Kennedy (Univ. of Sydney) | Patrick Woodward (Ohio State Univ.) | 島川 祐一 (京大化研)

【開催日】: 12月16日(木)夜、17日(金)午前・午後・夜、18日(土)午前・夜

【会場】: 口頭発表 Coral II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

電子デバイス材料や、エネルギー・環境材料など、将来の社会を支える基盤材料として新しい機能性無機固体材料が注目されている。このシンポジウムでは、このような新しい機能や特性を示す無機物質に焦点をあて、新材料の合成手法、物質の構造や特性の制御について幅広く議論する。

「固体化学」は長い歴史のある化学分野であり、新材料の探索、材料合成手法の開発を中心に発展してきた。近年は特に、物質の構造や特性を制御して、新しい機能材料を開発することも指向している。興味深い磁気特性や電気伝導特性を示す新材料、電池などへの応用が期待されるイオン伝導性材料などは、近年活発に研究が進められている。また、劇的な特性変化を伴う相転移現象も多くの注目を集めている。機能性材料としての将来展望を含めて、多彩な物性や機能特性を示す材料の合成と構造・特性についての最新の成果が報告される。

ハイライト 新しい配位構造をもつ新物質の発見

【日時】12月17日(金)午前7時30分~8時 【会場】Coral II (Hilton)

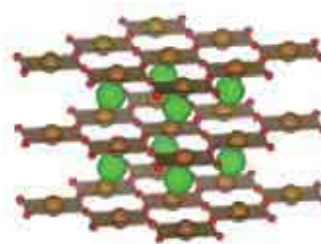
【講演番号】ID 550 口頭(招待講演)

Square-planar iron oxides: High pressure study

平面4配位を有するFe酸化物

○陰山 洋 (所属) 京都大学 大学院工学研究科

アルカリハライドを用いた低温還元法を用いて、珍しい平面4配位のFe<sup>2+</sup>を含んだ新しい酸化物が合成出来ることを発見した。Feは地球上に広く存在し、比較的安価で安全でもあることから、古くから数多く研究されてきたが、平面4配位のFe<sup>2+</sup>が安定化されたのは初めてである。さらに、この特異な配位構造を持つFe<sup>2+</sup>は高圧力下で奇妙なスピン転移を示すことも最近明らかになってきた。



【連絡先】京都大学 大学院工学研究科 E-mail: kage(at)scl.kyoto-u.ac.jp

ハイライト 低温での酸素イオン拡散挙動の解明

【日時】12月18日(土)午前9時50分~10時20分 【会場】Coral II (Hilton)

【講演番号】ID 884 口頭(招待講演)

Oxidation and reduction of oxide thin films

酸化物薄膜の酸化と還元

○島川 祐一 (所属) 京都大学 化学研究所

FeやNiなどの遷移金属を含んだ酸化物をパルスレーザー蒸着法を用いて作製すると、結晶方位を制御した単結晶薄膜で得ることができる。この薄膜を低温で酸化・還元処理を行うと、結晶構造の枠組みを保ったまま、酸素が異方的な拡散を伴って出入りすることが明らかとなった。この結果は、低温で動作可能な固体酸化物燃料電池などの開発へ向けた基礎的な知見を与えるものである。

【連絡先】京都大学 化学研究所 E-mail: shimak(at)scl.kyoto-u.ac.jp



## #2-25 Functional Molecule-Based Magnets

## 機能性分子磁石

【オーガナイザー】：山下正廣（東北大）、菅原正（東大）、J. S. Miller (University of Utah), G. Christou (University of Florida). K. Murray (Monash University), B. Thompson (University of British Columbia)

【開催日】：12月17日（金）午後、18日（土）午前・午後、19日（日）午前・午後

【会場】：口頭発表 Hibiscus I/II (Hilton)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

これまでで使われて来た古典磁石はほとんどが無機磁石であったが、近年、分子性磁石が注目を集めつつある。この分子性磁石の特徴は無機磁石と比べると、設計性に富んでおり、透明性であり、加工し易く、かつ機能性に富んでいることなどである。また、無機磁石に見られなくて、分子性磁石だけに観測される現象として、スピנקロスオーバー現象や単分子量子磁石などが挙げられる。このように分子性磁石は基礎科学のみならず応用科学として興味を集めている。本シンポジウムでは、光スイッチング機能、伝導性、誘電性、磁気抵抗性などを有する機能性分子磁石に焦点を当てて、現状の総括と将来の展望について議論をする。

ハイライト 1個の分子に1個の情報を書き込んだり消去したりすることに成功する!!

— 単分子メモリーの実現 —

【日時】12月18日（土）午前10時45分～11時15分 【会場】Hibiscus I/II (Hilton)

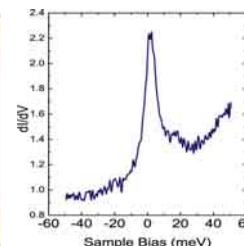
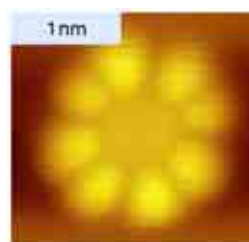
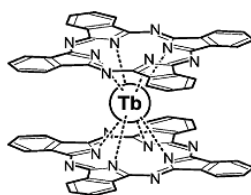
【講演番号】ID #902 口頭

## Spintronics Based on Single-Molecule Quantum Magnets

単分子量子磁石を用いたスピントロニクス

○山下正廣（所属）東北大学大学院理学研究科

中央の図はダブルデッカー型フタロシアニン Tb(III) 単分子量子磁石の STM であり、上下のフタロシアニンが  $43^\circ$  ずれているために8個の明るいスポットが観測される。この場合、右端の図のように近藤ピークが観測される。中央図の分子に STM で電子を注入すると上下のフタロシアニンのズレが  $30^\circ$  と小さくなり、近藤ピークが観測されない。このような近藤ピークの出現と消去は可逆的に起きる。近藤ピークを1個の情報と考えると、1個の分子に1個の情報の書き込みと消去を可逆的に起こすことが可能となったわけである。従来の古典磁石を用いたフロッピーディスクの記憶容量は  $10^9$  ビットであるが、1個の単分子量子磁石が1個のメモリーとして働くならば、1モルで  $10^{23}$  個の記憶容量となり、10兆倍の記憶容量の増加となる。将来は国会図書館の全ての情報を角砂糖サイズに書き込むことが可能になると期待される。



右端の図のように近藤ピークが観測される。中央図の分子に STM で電子を注入すると上下のフタロシアニンのズレが  $30^\circ$  と小さくなり、近藤ピークが観測されない。このような近藤ピークの出現と消去は可逆的に起きる。近藤ピークを1個の情報と考えると、1個の分子に1個の情報の書き込みと消去を可逆的に起こすことが可能となったわけである。従来の古典磁石を用いたフロッピーディスクの記憶容量は  $10^9$  ビットであるが、1個の単分子量子磁石が1個のメモリーとして働くならば、1モルで  $10^{23}$  個の記憶容量となり、10兆倍の記憶容量の増加となる。将来は国会図書館の全ての情報を角砂糖サイズに書き込むことが可能になると期待される。

T. Komeda, M. Yamashita, et al., *Nature Communication*, in press

【連絡先】980-8578 仙台市青葉区荒巻字青葉 東北大学大学院理学研究科

電話 022-795-6544, E-mail: yamasita(at)agnus.chem.tohoku.ac.jp

## #35 Organoboron, Organosilicon and Organophosphorus as Optoelectronic and Energy-related Materials

オプトエレクトロニクスおよびエネルギー関連材料を指向した有機元素機能化学

【オーガナイザー】: Suning Wang (Queen's Univ, Canada) | Frieder Jaekle (Rutgers University, USA) | 山口茂弘 (名古屋大) | Yue Wang (Jilin University, China)

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後・夕方、18日(土) 午前・午後・夕方、19日(日) 午前

【会場】: 口頭発表 Nautilus I & II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls I and I (Convention Center)

### 展 望

有機ELディスプレイの実用化など、近年の有機エレクトロニクス分野の急速な進展に後押しされ、新たな機能性分子の創製の重要性は益々高まっている。基礎科学の視点から新奇な結合・構造をもつ分子を設計し、その合成と物性の理解を進める化学と、応用を視野に入れ、より物性の追究に重点を置いた物質創製の両方からのアプローチが肝要である。この観点において、シーズの宝庫となるのが有機元素化学である。これまで、反応論や構造論などを中心に発展してきた有機元素化学の視点を、機能性分子の開発へと向けることにより、従来の有機化学では実現が困難な多様な可能性をもつ材料の創出が期待できる。有機エレクトロニクス分野の新たな潮流として現在急速に注目を集め、産学を問わず活発な研究が世界的に展開されている。本シンポジウムでは、この分野の第一線で活躍する総勢27名の招待講演者を集め、B, Si, Pといった典型元素の特性を生かした機能性物質の創製に関する最前線および将来展望について討論する。基礎化学的研究を一層充実させるだけでなく、近未来エレクトロニクス分野の基盤となる化合物群の創出、エネルギー貯蔵材料や有機太陽電池といった、人類が今日直面するエネルギー問題を解く鍵になる材料の創出が期待される。

### ハイライト “炭素とケイ素から光る物質をつくる”

【日時】12月18日(土) 午後2時20分~2時50分 【会場】Nautilus I & II (Hilton)

【講演番号】1152 口頭

#### $\pi$ -Conjugated disilenes and phosphasilenes stabilized by fused-ring bulky “Rind” groups

かさ高い縮環型立体保護基「Rind基」によって安定化されたパイ共役系ジシレンおよびホスファシレン化合物

○ 松尾 司 (理化学研究所基幹研究所)

新しい物質を創り出す上で、化学構造を決定し、望む物性や機能を引き出す置換基の役割は極めて重要である。ケイ素-ケイ素二重結合化学種は高いHOMOと低いLUMOを併せ持つため、これを炭素パイ共役系に組み込むことで優れた電子物性を示すことが期待される。しかし、ケイ素をはじめとする第3周期以降の重い典型元素を含む不飽和結合は一般的に反応性が高く空気に不安定であり、結合周りはトランスベンチ型や捻れ型に変形しやすい。我々は、汎用性の高い縮環型立体保護基である「Rind基」に着目し、ケイ素-ケイ素二重結合やケイ素-リン二重結合などの「高周期元素不飽和結合」を構成単位とする新しい共役電子系化合物を開発した。これらの化合物は、Rind基の優れた立体保護効果および主鎖骨格の構造規制効果に基づき、空气中で安定な固体物質として取り扱うことが可能であり、ほぼ完全に平面なパイ電子系骨格を有する分子構造について明らかにした(図参照)。本講演では、パイ共役系ジシレンおよびホスファシレン化合物の合成と共平面構造に基づく共役の拡張などの特異な電子物性、室温での顕著な発光挙動など、機能性物質として格段の発展をもたらす最近の知見について紹介する。



## #038 Actinides and the Environment : A Multidisciplinary Look at What We Know and What We Need to Know

アクチノイドと環境：総合的評価のために我々がいま知るべきことは何？

【オーガナイザー】 Heino Nitsche (UC Berkeley and LBNL) | Chunli LIU |

吉田善行 (日本原子力研究開発機構) | Daniel KAPLAN

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・夜

【会場】: 口頭発表 15日午前・午後、16日午前; Sea Pearl III/IV (Hilton)、  
16日夜; Nautilus I & II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

原子力がいま向き合っている最大の課題の一つが、放射性廃棄物の地層処分の安全性をどう正確に評価するかである。その安全性を大きく左右するのが、ウラン、ネプツニウム、プルトニウム等のアクチノイドの環境中での挙動である。これを解明するには、広範な科学技術分野をまたぐ知識の集積と総合的な解析が必要であるが、関連する分野は核・放射化学、地質学、土壤化学、微生物学、遺伝子工学、分子化学、生物学、輸送モデリング工学などに及ぶ。本シンポジウムのねらいは、このような広範な分野の専門家が一堂に会して議論することによって、自然界におけるアクチノイドの挙動を決定づける要因を明らかにし、現状の到達点を明らかにするとともに、今後重点的に何をなすべきかの方向性を見出すことである。議論の中心となる課題は、アクチノイドの天然水圏での溶液化学的挙動、地球化学的相互作用と輸送挙動、微生物との相互作用などの基礎科学から、廃棄物処理のための生物学的プロセス、アクチノイドデータベース、さらにはアクチノイドの状態把握のための新しい方法の開発など、多岐にわたり、活発な議論が期待される。

ハイライト ウラン、レアアースの鉱物化を微生物が促進：レアアース回収技術にも道

【日時】12月15日(水) 午後3時15分～3時40分 【会場】Sea Pearl III/IV(Hilton)

【講演番号】ID #147 口頭

Mineralization of actinides on the surface of microorganisms and minerals

微生物表面、鉱物表面でのアクチノイドの鉱物化

○大貫敏彦(所属) 日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター

微生物や鉱物の表面でレアアースやウランなどが鉱物化し、長期間にわたって安定であることが、オーストラリアのクーンガラにあるウラン鉱床での現地調査や、室内実験により見いだされた。この鉱物化現象は、地球の表層で数万年以上の期間にわたって繰り返されるレアアースやウランの移動を支配する重要な因子の一つであると考えられ、今回の発見は、放射性廃棄物の地層処分の安全性の評価に必要な、地層中でのウランなどの移行挙動のより精密な解明にもつながる。また、微生物によるレアアースなどの鉱物化を利用する廃鉱山の処理技術や、レアアースの採鉱や回収の技術にも展望を拓くもので、循環型社会形成に貢献できる技術開発として注目される。

【連絡先】

319-1195 茨城県那珂郡東海村白方2-4 日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター

E-mail: ohnuki.toshihiko(at)jaea.go.jp



レアアースを鉱物化した微生物の電子顕微鏡写真。楕円形のものが微生物細胞。細胞表面の白い点状のものがレアアースを含んだ鉱物。



## #94 The Construction of Photofunctional Supramolecular Metal Complexes

## 光機能性超分子金属錯体の構築

【オーガナイザー】：加藤昌子（北大院理） | Peter C. Ford (Univ. California S. B.) | Garry S. Hanan (Univ. Montreal) | Vivian W.-W. Yam (Hong Kong Univ.) | 石田斉（北里大理）

【開催日】：12月18日（土）午前・午後、19日（日）午前

【会場】：口頭発表 Rainbow III (Hilton)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

光機能性を持つ金属錯体は、有機 EL 素子における高効率のりん光材料や太陽光エネルギー変換のための光触媒など、無機—有機複合系材料として注目され、新しい物質開拓もますます活発に行われている。近年では、より優れた光機能を示す系を目指して、多核錯体、金属錯体集積系、超分子錯体などへ幅広く展開され、無機—有機複合系ならではの興味深い発光現象や光化学反応などが次々と見出されている。本シンポジウムでは、新しい物質創成の観点から、このような光機能性を持つ無機—有機複合系の構築に焦点をあてる。

ハイライト 光エネルギーを運ぶレニウム錯体連結体

【日時】12月18日（土）午後3時25～3時45分 【会場】Rainbow III (Hilton)

【講演番号】ID 1094 口頭

Synthesis, photophysics, and photocatalysis of linear-shaped and ring-shaped oligomers of Re(I) diimine complexes

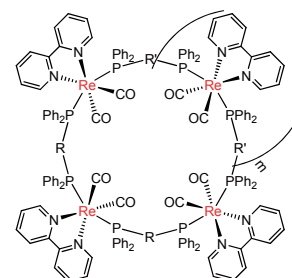
直鎖状および環状レニウム(I)-ジイミン錯体の合成、光物性、および光触媒能

○石谷 治（所属）東京工業大学大学院理工学研究科

室温溶液中で強く発光し、CO<sub>2</sub>還元的光触媒能を示すことから注目されてきた Re(I) 錯体自体を骨格に組み込んだポリマーが合成された例はなかった。本研究では、独自に開発した光配位子交換反応を用いて、リン2座配位子で架橋した鎖状および環状の Re(I) 錯体ポリマーの合成に成功した。これらの錯体は、単核の錯体に比べ遙かに高い CO<sub>2</sub>還元特性、方向性を制御した段階的な励起エネルギー移動、あるいは高い発光量子収率を示す。（参考文献：Yamamoto *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 14659.）

【連絡先】東京工業大学大学院理工学研究科

E-mail:ishitani(at)chem.titech.ac.jp



ハイライト こすると発光色が変わる金の錯体

【日時】12月19日（木）午前8時5分～8時20分 【会場】Rainbow III (Hilton)

【講演番号】ID 1450 口頭

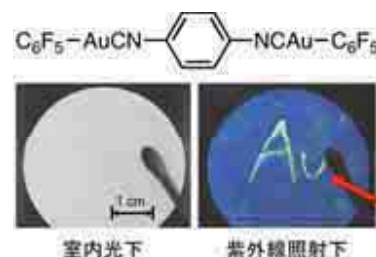
Mechanochromic and nonmechanochromic photoluminescence of gold(I)-isocyanide complexes

金(I)-イソシアニド錯体の発光性メカノクロミズム

○伊藤 肇、澤村正也、樽沼沙也佳、大蔵拓真（所属）北海道大学大学院工学研究院、理学研究院

発光特性が、こする、ひっかくなどの機械的刺激で変化する性質を発光性メカノクロミズムとよぶ。本研究で、ある種の金(I)-イソシアニド錯体が顕著なメカノクロミズム特性を示すことが発見された。この錯体は、UV照射では青色発光を示すが、スパチュラなどでひっかくと黄色い発光に変わる。これは溶媒を加えることで素早くもとの青色発光に戻る。さまざまな構造類縁体を合成して比較した結果、メカノクロミズム特性は、金の上のアリール基とイソシアニドの性質に大きく左右されることがわかった。（参考文献：Ito *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 10044.）

【連絡先】北海道大学大学院工学研究院 E-mail: hajito(at)eng.hokudai.ac.jp



## #2-96 Chemistry of Sulfur-Bridged Multimetallic Complexes

## 硫黄架橋多核金属錯体の化学

【オーガナイザー】Thomas B. Rauchfuss (Univ of Illinois) | 溝部裕司 (東大) | Guo-Xin Jin (Fudan Univ) | 松本 剛 (名大)

【開催日】: 12月16日(木) 午前、17日(金) 午前・午後、18日(土) 午後

【会場】: 口頭発表 South Pacific I (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

複数の金属原子が硫黄原子で連結された化合物は、生体内酵素の活性部位や、工業的に利用される固体触媒として重要な役割を担っている。例えば、酵素中では、大気中の窒素ガスを肥料の原料となるアンモニアに変換したり、水から水素ガスを合成する反応などを温和な条件で行うことが知られている。従ってそれらの反応の詳細を化学的に解明できれば、我々が直面する食糧問題やエネルギー問題を解決する端緒が拓かれると期待される。また一方で、硫黄原子が複数の金属と強い結合をつくることを利用し、網目状の多次元高分子ポリマー構造をもつ硫黄架橋多核金属錯体なども合成され、それらが様々な興味深い物性を示すことも報告されている。このように、多様な可能性を秘めた硫黄架橋多核金属錯体の化学は、21世紀の社会に貢献する重要な学術分野のひとつとして期待されている。

ハイライト 水素燃料電池の実用化につながるか：ヒドロゲナーゼのモデル反応

【日時】12月17日(金) 午後2時15分～2時50分 【会場】South Pacific I (Hilton)

【講演番号】ID 741 口頭

## Electron Extraction from Hydrogen

水素分子から電子をとりだす

○ 小江誠司 (所属)九州大学 大学院工学研究院

水素は次世代を担うクリーンなエネルギー源として注目されており、効率の良い水素利用法の開発が求められている。自然界には、水素分子から電子をエネルギー源として取り出す機能を持つヒドロゲナーゼという酵素が存在するが、講演者らはヒドロゲナーゼのモデルとなる硫黄架橋ニッケル-ルテニウム複核化合物を用い、水中、常温、常圧という穏やかな条件で水素分子から電子を取り出すことに成功した。これは水素燃料電池の実用化への足がかりとなる重要な成果であり、今後の応用への展開が大いに期待される。

【連絡先】九州大学 大学院工学研究院応用化学部門 E-mail: ogolab(at)mail.cstm.kyushu.ac.jp

ハイライト 窒素分子を活性化する酵素ニトロゲナーゼのモデル合成

【日時】12月17日(金) 午前10時35分～11時05分 【会場】South Pacific I (Hilton)

【講演番号】ID 609 口頭

Synthesis of [Fe<sub>8</sub>S<sub>7</sub>] Clusters analogous to the Metal-Sulfur Clusters in Nitrogenase

ニトロゲナーゼ中の金属硫黄クラスターに類似した[Fe<sub>8</sub>S<sub>7</sub>]クラスターの合成

○大木靖弘、巽 和行 (所属)名古屋大学 大学院理学研究科・物質科学国際研究センター

農作物を持続的に生産する上で肥料の添加は不可欠である。その三大要素の1つである窒素化合物は、水素と窒素ガスからハーバーボッシュ法という工業プロセスで合成されているが、このプロセスは高压、高温を必要とし、莫大なエネルギーを消費するという問題を抱えている。ところが、自然界ではニトロゲナーゼという酵素が、窒素ガスを常温常圧でアンモニアへと変換しているため、この酵素の仕組みを明らかにすべく、多方面の科学者が研究に取り組んでいる。講演者らは、ニトロゲナーゼ中の窒素還元を行う特異な金属硫黄クラスターに非常によく似た化合物を世界に先駆けて合成した。本研究は、酵素が行うアンモニア合成過程を明らかにする上で、重要な一歩である。

【連絡先】名古屋大学 物質科学国際研究センター E-mail: i45100a(at)nucc.cc.nagoya-u.ac.jp



## #97 Syntheses and Applications of Metal–Organic Frameworks

## 多孔性配位高分子（有機–無機ハイブリッドナノ細孔物質）の合成と応用

【オーガナイザー】: M. P. Suh (Seoul National Univ.) | C. Kepert (Univ. of Sydney) | 北川進 (京都大) | J. R. Long (UC, Berkeley) | G. Shimizu (Univ. of Calgary)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後

【会場】: 口頭発表: Coral II (Hilton)

ポスター発表: 12月17日 午前 Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

固体の内部に非常に小さなナノメートルサイズの孔が無数に空いたナノ細孔物質は、大気汚染物質の除去、水の浄化、触媒反応などに用いられ、我々の生活に深くかかわっている機能性物質である。従来物質のゼオライトや活性炭はその代表である。多孔性配位高分子は1990年後半に合成された非常に新しいナノ細孔物質であり、最大の特徴は無機金属イオンと有機物質とのハイブリッド材料であることである。それゆえ無機–有機の組み合わせの仕方によって、構造や性質を様々に変化させる事が可能であり、多孔性配位高分子による新しい吸着、ガス分離、触媒機能が次々と見つかり、今まさに白熱した研究分野となっている。

このシンポジウムでは4つのセッションを設けており、基礎研究から応用研究まで、あるいは新物質の実際の合成手法からコンピューター科学を用いた機能評価にいたるまで、多孔性配位高分子のほぼすべての研究分野に関して、世界の最先端の研究者が一同に会し、講演を行い討論するシンポジウムとなっている。また、本年度トムソン・ロイター通信社からノーベル賞候補者として名前の挙げた北川進教授および Omar Yaghi (オマール・ヤーギー) 教授も講演者に名を連ねている。このシンポジウムの研究分野間の垣根を越えた討論によって、多孔性配位高分子の新しい展開が期待される。

ハイライト 分子の積み木細工を駆使しナノ結晶薄膜の作製に成功

【日時】12月15日(水) 午前10時50分~11時10分 【会場】Coral II (Hilton)

【講演番号】ID 87 口頭

Layer-by-Layer growth of highly-crystalline preferentially-oriented MOF nanofilms on solid surfaces.

結晶性 MOF ナノ薄膜の固体表面における Layer-by-Layer 成長

○牧浦理恵、坂田修身、北川宏 (所属) 大阪府立大学 ナノ科学・材料研究センター、JST-CREST、SPRING-8/JASRI、京都大学 理学研究科

本シンポジウムで取り上げる MOF を触媒やセンサなどの将来のナノデバイスに利用することが期待される中、構造およびサイズが制御された薄膜の作製およびその他の構成要素(電極など)や異種薄膜との集積は重要な課題となっています。

本講演では、新しい薄膜作製手法を開発し、世界で初めて作製に成功した配向が完全に制御された高規則性(結晶性) MOF ナノ薄膜 (NAFS-1) に関して発表します。新しい作製手法は、整列した分子一層からなる膜を作製することが可能な Langmuir-Blodgett 法(LB 法)と、この分子単層膜を一層ずつ積み上げることができる、Layer-by-Layer と呼ばれる方法を巧みに組み合わせることにより達成しました(図1参照)。この手法は、室温、常圧の穏やかな条件下で行われるため、低エネルギープロセスであることも特徴です。

この新しい手法を用いれば、異なる種類の薄膜を積み重ねることも可能であり、分離、反応、輸送など様々な性質をもつ薄膜を集積することができるため、超小型センサ、分子リアクターなど多機能・高性能なナノデバイスの実現を大きく加速することが期待されます。

【連絡先】大阪府立大学 ナノ科学・材料研究センター 特別講師 牧浦理恵

E-mail: r-makiura(at)21c.osakafu-u.ac.jp

京都大学 理学研究科 教授 北川宏

E-mail: kitagawa(at)kuchem.kyoto-u.ac.jp

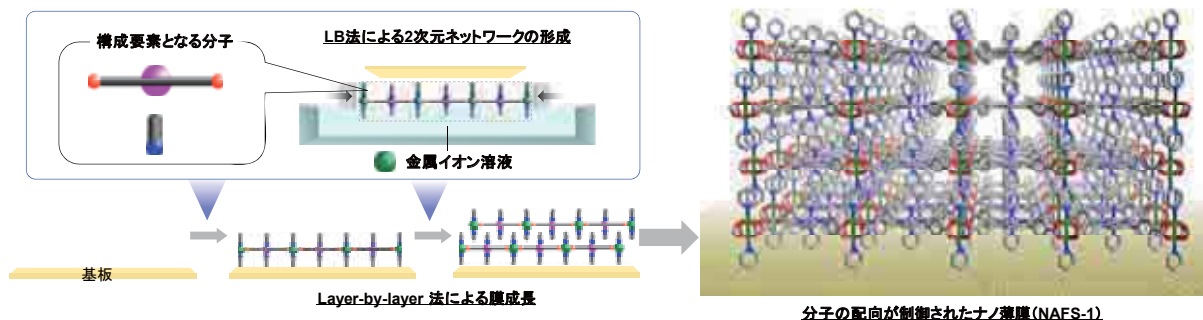


図 1

ハイライト 多孔性配向分子による難しいガス分離の挑戦！

【日時】12月15日(水)午後3時50分～4時10分 【会場】Coral II (Hilton)

【講演番号】ID 114 口頭

### Guest-Induced Structural Transformations and Specific Guest Adsorptions of Flexible Porous Coordination Polymers

柔らかな多孔性配位高分子の構造変化と選択的吸着機能

○松田亮太郎、佐藤弘志、北川進 (所属) 京都大学・(独) 科学技術振興機構

大気中から、純粋な窒素、酸素、アルゴン等のガス分子を得ることや、二酸化炭素や窒素酸化物 ( $\text{NO}_x$ )、硫黄酸化物 ( $\text{SO}_x$ ) などの環境汚染ガスを分離・除去することは、産業的及び環境問題において重要な課題です。活性炭やゼオライトなどナノメートルサイズの細孔を有したナノ細孔物質は、ガス分子を化合物中に大量に取り込めることから、吸着分離材として様々なところで使用されています。しかしながら、サイズや沸点などの性質が類似しているガス分子同士を、一般的な多孔性物質で吸着分離する事は困難であるといえます。例えば酸素とアルゴン、二酸化炭素とアセチレン、一酸化炭素と窒素などは分離する事が極めて難しい組み合わせです。

一方、多孔性配位高分子と呼ばれる新しいナノ細孔物質は、細孔の内表面の性質を様々なデザインし変化させられる事や結晶にも関わらずダイナミックに細孔の形状やサイズを変えられる特徴を有しています。本講演では、多孔性配位高分子のそのような特徴を最大限に活用し、酸素やアセチレン、アルゴンなどに特異的に吸着機能を示す多孔性配位高分子の合成手法を紹介するとともに、上で例を挙げた分離困難なガスの分離に挑戦した結果を紹介いたします(図2)。

【連絡先】600-8815 京都市下京区中堂寺栗田町 93 京都リサーチパーク 3 号館 405 ERATO 北川統合細孔プロジェクト

電話 075-322-4711, E-mail: ryotaro.matsuda(at)kip.jst.go.jp

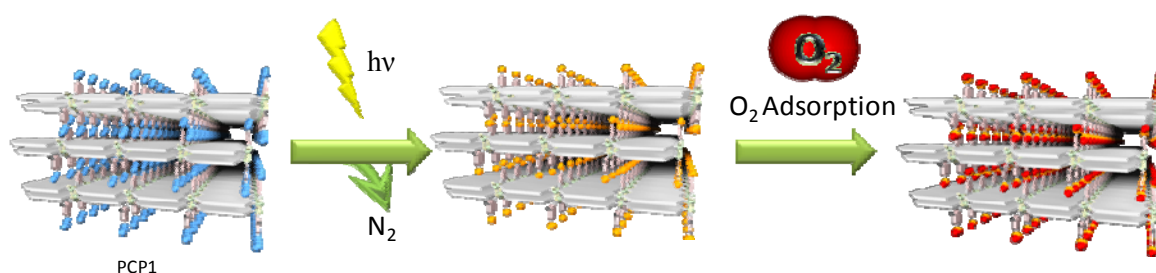


図 2. 光照射による酸素 ( $\text{O}_2$ ) の特異的吸着の様子

## #108 Dioxxygen Activation Chemistry and Catalytic Oxidation Reactions

## 酸素の活性化と触媒酸化反応

【オーガナイザー】

伊東 忍(阪大) | William B. Tolman | Wonwoo Nam | Amy C. Rosenzweig

【開催日】: 12月18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 Coral II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

芳香族化合物や脂肪族化合物の位置および立体選択的酸素官能基導入法の開発は、有機合成化学や触媒化学などの分野において重要な研究課題として古くから活発に研究されてきた。中でも、鉄イオンと過酸化水素を用いたフェントン型の酸化反応は良く知られているが、非常に活性の高いヒドロキシルラジカルが関与するため、反応の制御が難しく選択的な酸化反応には使えない。一方、生体内の反応に目をやると、複雑な有機化合物の位置および立体選択的酸素化反応が、常温・常圧の非常に穏和な条件下で達成されており、多くの場合、活性中心に単核や二核の活性中心を有する金属酵素が触媒として働いている。このような金属酵素に含まれる酸化活性種の構造や反応については多くの関心が寄せられており、主に生物無機化学や触媒化学の分野で重要な研究課題として注目されてきた。本シンポジウムでは、生体内における酸素の活性化機構の解明と、そのエッセンスを人工系に応用した触媒開発に関する研究の最前線で活躍する化学者が一同に会して情報交換と議論を行う。【口頭発表: 33件(米国22件、日本7件、ドイツ2件、イタリア1件、韓国1件、中国1件、台湾1件) ポスター発表: 27件】

## ハイライト

【日時】12月20日(月) 午前7時30分~8時5分 【会場】Coral II (Hilton)

【講演番号】ID 1670 口頭

Iron-catalyzed asymmetric oxidative coupling of 2-naphthols and its mechanism

鉄触媒を用いた2-ナフトールの酸化的不斉二量化反応とその反応機構

○香月 勲 (所属)九州大学 大学院理学研究科 名誉教授

ほとんどの有機化合物の骨格は、炭素-炭素、炭素-酸素、炭素-窒素結合を基に構築されています。講演者らのグループでは、これらの結合を選択的に生成し、副生成物が水や窒素など環境と調和する化合物に限られる反応、すなわち「環境調和型反応」を世界に先駆けて確立されました。このような要求に応えるために、各種遷移金属の特徴を生かした新規錯体の設計を行い、新たに導入した光活性型触媒などを活用した、過酸化水素や空気中の酸素を酸化剤とする各種不斉酸化反応の開発に成功されました。これらの反応のメカニズムは生体内反応のそれとは異なりますが、副生成物は水や窒素のみであり、同様の原子効率と環境調和性を示します。本講演では、最近の成果として講演者らが開発した鉄触媒を用いた2-ナフトールの酸化的不斉二量化反応とその反応機構について講演して頂きます。

【連絡先】katsuscc(at)chem.kyushu-univ.jp

## #146 Advances in Metal-Mediated Bond Activation: From Unusual Bonding Motifs to Applications in Catalysis

金属を用いた化学結合活性化の最前線：異常化学結合モデルから触媒への応用

【オーガナイザー】 Kenneth Caulton | 小宮三四郎（東農工大） | Mark Stradiotto

【日時】 12月18日（土）午前10時10分～10時30分 【会場】 Rainbow III (Hilton)

【講演番号】 ID 962 口頭

Visible-light promoted bimetallic catalysis

二核錯体による可視光促進触媒的有機変換反応

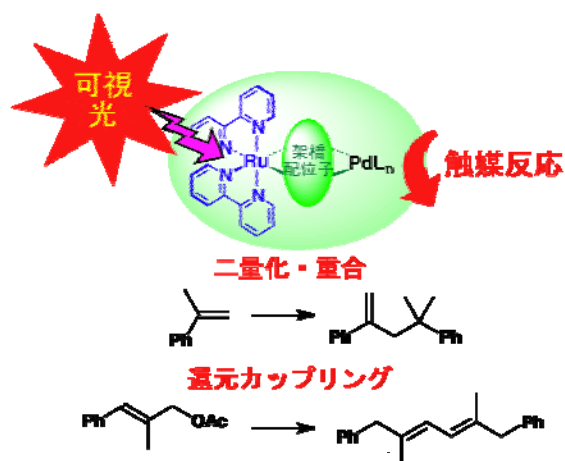
稲垣昭子・〇穂田宗隆（所属）東京工業大学 資源化学研究所

無尽蔵に放出されている太陽光エネルギーの有効利用は、環境・エネルギー問題と関連して多くの関心を集めているが、われわれは可視光（太陽光）によって促進される有機触媒反応を開発する目的で、光エネルギーを吸収できるルテニウム錯体ユニットと触媒能を有するパラジウムユニットを、さまざまな架橋配位子で架橋した二核錯体触媒を合成し、それを用いた触媒的炭素-炭素結合生成反応の探索研究を行っている。

本講演では二種類の反応について報告する。まずオレフィン類との反応では、二量化、ならびに触媒構造や反応条件によっては重合反応が進行する。この反応ではアルキル中間体のPd-C結合にオレフィンの二重結合が挿入する段階に可視光が作用することが明らかにされている。

また、この触媒系に少量のフェニルボロン酸を加えると、酢酸アリル誘導体を触媒的に還元二量化する反応が進行し、このとき同時に二重結合の位置異性化も進行して共役ジエンが生成する。

いずれの反応も可視光照射が必須であり、同様な光触媒反応は、水や二酸化炭素などの無機小分子については前例があるが、炭素-炭素結合生成を含む有機変換反応としては、これまでに例を見ない新しいタイプの反応である。発表では、反応機構解明に向けた実験結果についても報告する。



【連絡先】 E-mail: makita(at)res.titech.ac.jp



## #150 Preparation and Reaction of Early Transition Metal and Lanthanide Compounds

### 前周期遷移金属とランタナイド化合物の合成と反応

【オーガナイザー】：高橋 保(北大) | Glen B. Deacon | Zhenfeng Xi | Richard F. Jordan

【開催日】：12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後

【会場】：Hilton Hawaiian Village

#### 展 望

現在話題となっているレアメタルすなわちランタナイドや前周期遷移金属化合物とはどのような化合物なのか、その構造とは。これらの化合物はどのような反応をするのか、これまでに知られていないレアメタルの姿、前周期遷移金属の本当の姿を示す、最先端の新しい情報の提供とそれに対する議論を行う。これらの金属は高分子を生み出す重合反応の触媒としても用いられており、有機合成的な応用も行われている。本シンポジウムでは前周期遷移金属、ランタナイド化合物についての基礎的な知見とその応用について研究成果の報告が行われる。

ハイライト 根岸英一教授によるノーベル賞受賞後の帰国後の初講演

【日時】12月15日(水) 午後12時30分～1時10分 【会場】Hilton Hawaiian Village

【講演番号】 ID 125 口頭

How to Synthesize "Feebly" Chiral Organic Compounds via ZACA-Lipase-Catalyzed Acetylation Pd or Cu-Catalyzed Cross-Coupling

ZACA-リパーゼを触媒とするアセチル化、パラジウムや銅を触媒とするクロスカップリングを用いた種々の光学活性有機化合物の合成法の開発

○根岸英一(所属) パデュー大学

1995年に見出したジルコニウムを触媒とするアルケンの不斉カルボアルミネーション(ZACA反応)を利用して、さまざまな1-アルケンを2位に置換基を持つアルコールに高い収率で、また高い不斉収率で変換することに成功した。このプロセスを繰り返すことにより、生物学的に医薬的に活性をもつ天然物中間体に導かれる。高い光学純度は速度論分割で到達でき、また通常の単純なカラム精製で高い立体化学が制御された化合物が得られる。

2位に置換基を持ち、2位に不斉中心を持つ1-アルカノール類についてはZACA-リパーゼを触媒とするアセチル化反応で広範囲に満足できる方法論を提供できる。この方法だと最初の粗生成物の段階ですでに光学純度が70%eeを超え、選択性因子(E)が15-20を超えている。

R-2-メチル-1-ブタノールのように低いE因子(6以下)を持っている場合には、3-ヨード-2-メチル-1-プロパノールのようなE因子が高い化合物をまず合成し、それにパラジウムや銅を触媒とするクロスカップリングを用いることによって、通常の方法では純度の高い化合物を与えることが難しい2位に置換基を持つ1-アルカノールでも広範囲にわたって純度の高い化合物を提供できる。

【連絡先】101-8307 千代田区神田駿河台1-5 日本化学会

電話 03-3292-6163, E-mail: pacificchem(at)chemsistry.or.jp

## #156 Functional Molecules of the Heavier Main Group and Transition Metal Elements

## 高周期典型元素と遷移金属元素が織りなす機能分子化学

【オーガナイザー】：小澤文幸（京大） | Philip Power | Derek Gates

【開催日】：12月15日（水）午前・午後、16日（木）午前・夜

【会場】：口頭発表 Rainbow I (Hilton)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

元素周期表の第3周期以降に広がるケイ素、リン、イオウや遷移金属などの元素群は高周期元素と総称され、炭素、窒素、酸素などの第2周期元素とは大きく性格が異なることが知られている。従来、高周期元素を中心原子とする分子性化合物群は不安定で、その取扱が困難であったため、それら化合物の構造と性質はあまり良く分かっていなかった。近年、立体保護基などを用いてそれらの化合物を適度に安定化し、単離する方法が大幅に進展したことにより、様々な高周期元素を用いて多種多様な化合物が合成され、従来の予想をはるかに超えた構造と性質が発見され、新たな分子機能の開拓へと研究が展開されるようになった。本シンポジウムでは、機能の宝庫とよばれるこの高周期元素化合物の化学に焦点をあて、最近の進歩と今後の展望について、世界の第一級研究者を集めて討論する。

## ハイライト 元素化学の最前線

【日時】12月15日（水）午後2時30分～2時55分 【会場】Rainbow I (Hilton)

【講演番号】ID 174 口頭

## Origin of the Reactivity of Organoheteroatom Compounds under Radical Conditions

ラジカル反応条件下における有機ヘテロ元素化合物の反応性の違いの起源に関する研究

○山子 茂 （所属）京都大学化学研究所

ラジカル重合は高分子材料を合成する最も汎用性の高い方法であり、世界中で年間500万トンもの高分子化合物がこの重合法によって合成されている。これは人工的に合成される高分子化合物の約半分に相当する。しかし、ラジカル重合では分子の形を制御することができないことから、分子レベルで高分子化合物の機能を高めることに限界があった。この問題点の解決のために、リビングラジカル重合の開発がこの15年強の間に世界中で活発に行われているが、産業界で十分に利用できる技術とはなっていないのが現状である。したがって、新しく実行力の高いリビングラジカル重合の開発は学術的に重要であるのみならず、産業界へ直接インパクトを与える極めて重要な課題である。

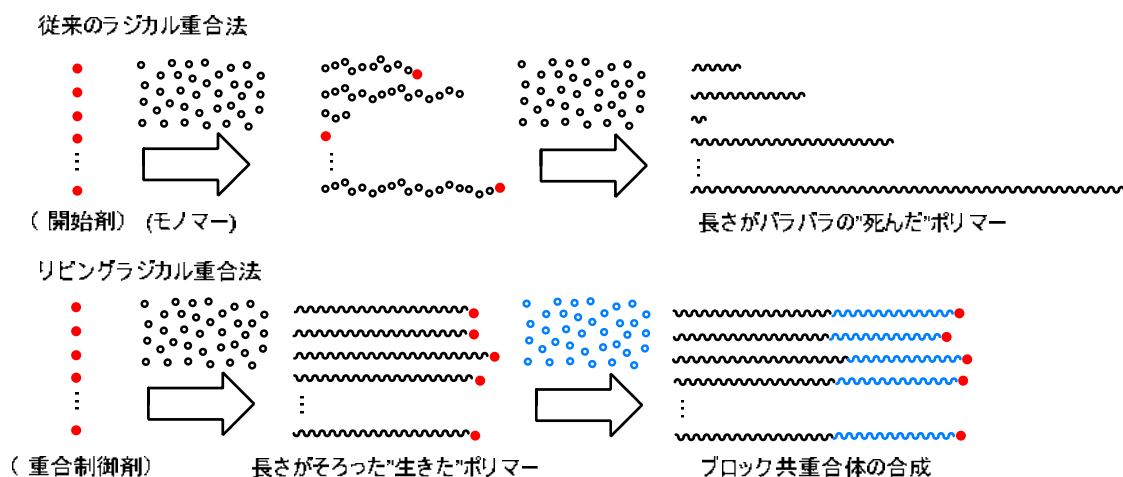


図1. 従来のラジカル重合法とリビングラジカル重合法. 重合制御剤（赤丸）として有機



テルル、アンチモン、ビスマス化合物を用いる。これにより、機能性材料の宝庫であるブロック共重合体も容易に合成可能である。

本研究者は、これまで重要性が全く認識されていなかった有機テルル、アンチモン、ビスマスといった高周期ヘテロ元素（典型元素）化合物がリビングラジカル重合の重合制御剤として極めて有効であることを明らかにすると共に、産学共同研究を通じて、高い機能を持つ高分子材料の開発にも成功し、この重合法が学術的に新規性の高い方法であるのみならず、「モノ作り」技術としても極めて高い汎用性を持つ有用な方法であることを明らかにしている。しかしこれまで、なぜテルル、アンチモン、ビスマスがこの手の反応に優れているのか？といった、元素の特性を明らかにするには至っていなかった。今回、その検討を行って元素それぞれの個性を明らかにすることができた。

【連絡先】 611-0011 京都府宇治市五ヶ庄 京都大学化学研究所  
電話 0774-38-3060, E-mail: yamago(at)scl.kyoto-u.ac.jp

ハイライト 新しい $\pi$ 結合をもつ分子

【日時】 12月16日（木）午前11時00分～11時25分 【会場】 Rainbow I (Hilton)

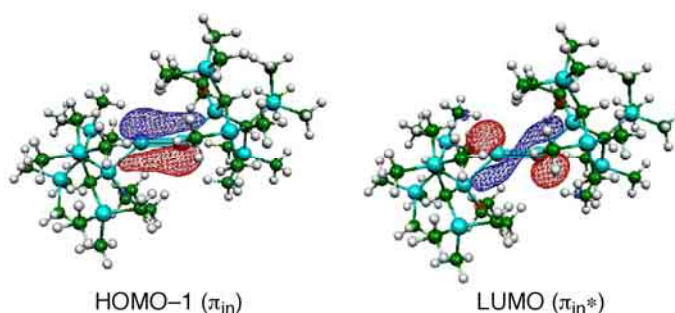
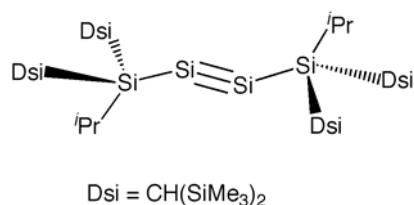
【講演番号】 ID 267 口頭

New  $\pi$ -Bonded Molecules: Disilynes  $\text{RSi}=\text{SiR}$  with Silicon-Silicon Triple Bonds and Their Unusual Reactivity

新しい $\pi$ 結合をもつ分子：三重結合ケイ素化合物ジシリンの特異な反応性

○関口 章 （所属）筑波大学大学院数理物質科学研究科

ケイ素は周期表で炭素の直下に位置し、炭素化合物と最もよく類似した化合物群を形成する。1960年代までは、「高周期族元素では多重結合をつくれぬ」という説明をする化学のテキストもあった。ケイ素二重結合化合物の発見から23年後、ケイ素三重結合化合物ジシリンを安定な化合物として合成することができた。直線構造のアセチレンとは対照的に、ケイ素三重結合化合物ジシリンは折れ曲った構造でケイ素とケイ素との間に2つの非等価な $\pi$ 結合がある。今までの化学結合の概念にない新しい様式の化学結合である。新しい $\pi$ 結合をもつ三重結合ケイ素化合物は、特異な $\pi$ 空間と反応場を形成し、反応性が極めて高く、オレフィン、アセチレン、アミン、アルコール、チオールなどと金属触媒を使用しなくとも容易に反応する。種々の有機分子を活性化できる三重結合ケイ素化合物は、合成化学や触媒化学に大きく貢献する。希少金属元素への依存度を低くし、ケイ素などの豊富で普遍的に手に入る元素を使用し、金属がもつ機能を代替することを目指した研究はますます重要であり、ケイ素三重結合化合物ジシリンはこのような夢を実現できる。



初めての単離可能な安定ジシリル

三重結合ケイ素化合物ジシリンの特異な $\pi$ 空間

【連絡先】 〒305-8571 つくば市天王台 1-1-1 筑波大学大学院数理物質科学研究科・化学専攻  
電話 029-853-4314, E-mail: sekiguch(at)chem.tsukuba.ac.jp

## # 164 Self-Assembly and Coordination Chemistry

## 自己組織化ケミストリーの最前線

【オーガナイザー】:

Makoto Fujita | Leonard MacGillivray | Stephen Loeb | Shu-Yan Yu | Michito Yoshizawa

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

(ポスター 18日(土) 午前)

【会場】: 口頭発表 Coral I (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

自己組織化は、自然界に見られるユニークな「ものづくり」の仕組みです。例えば、多くのウイルスは球状の殻を持っており、その中に核酸やタンパク質が収納されたカプセル状の構造です。この球状の殻は、数百から数千のタンパク質が自然と集まりひとりでに組み上がる、すなわち、自己組織化により出来上がっています。しかも、1つの殻に含まれるタンパク質はちょうど60の倍数であります。179個や181個ではなくて、厳密に180個のタンパク質から構成された殻が組み上がるのです。このような、自己組織化の仕組みを利用して、人工的な新しい「ものづくり」が最近、世界中で注目されています。本シンポジウムでは、自己組織化の基礎的な仕組みの解明から、特異な構造や性質の開発、さらには機能性の材料創製まで、最先端の「自己組織化ケミストリー」に関する32件の口頭発表と多数のポスター発表が行われます。多数のご参加を待ちしています。

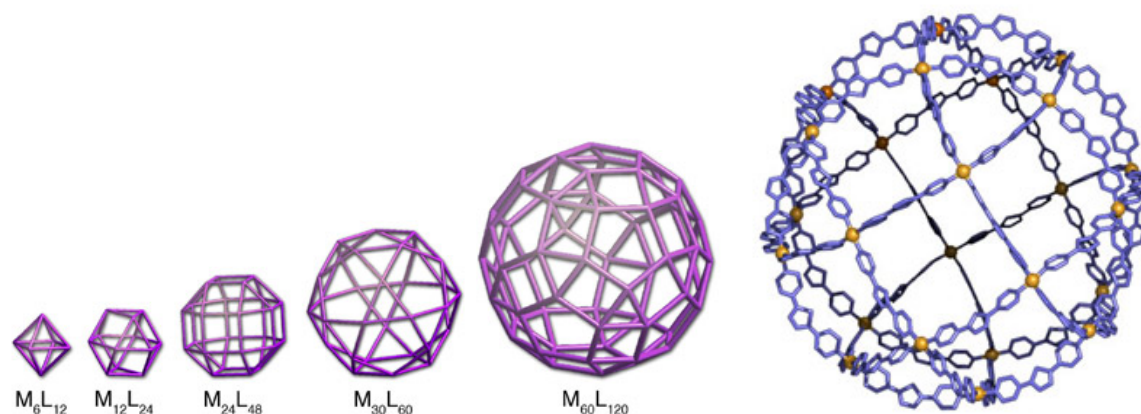


図1  $M_nL_{2n}$  ( $n = 6, 12, 24, 30, 60$ ) の組成を持つ球状分子(左図)と72成分からなる球状分子の結晶構造(右図)

## ハイライト 生体素子を使った効率的触媒反応

【日時】12月20日(月) 午前10時15分~

【会場】Coral I (Hilton)

【講演番号】ID 1686 口頭

【講演題目】チューブ蛋白質構造体による金属錯体の機能制御

(Metal complexes functionalized on tubular protein architectures)

【講演者】上野 隆史 (所属) 京都大学 物質-細胞統合システム拠点

規則正しい繰返し構造をもつ蛋白質チューブを利用して金属錯体の反応を制御しました。我々が注目した蛋白質は、バクテリオファージ T4 とよばれるウイルスの一種です。このウイルスは40個以上もの異なる部品蛋白質から構成されており、その中には、特徴的な構造や機能を持つものの、従来の有機合成的な手法を用いては合成が困難な構造体も含まれています。そこで、我々は、本来大腸菌の表面膜を貫通する役割をもつチューブ蛋白質に着目し、遺伝子工学的に目的にあう構造体を設計しました。得られたチューブ蛋白質は高い熱的安定性を持ち、かつ有機溶媒や広い pH 範囲でもその構造を保持しています。このチューブ表面の望みの位置に金属錯体を固定化する事によって、触媒反応を効率よく進行させる事に成功しました。このような手法は、蛋白

質の自己組織化をうまく使う事によって初めて達成でき、人工分子の組み合わせだけでは困難な、生体中での触媒反応等への展開が期待できます。

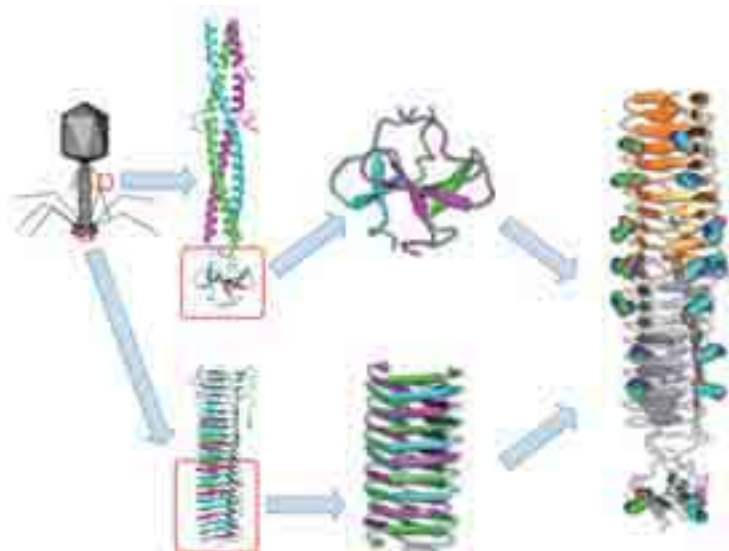


図1 バクテリオファージ T4 からのチューブ蛋白質構造体作成とその結晶構造

【連絡先】 上野 隆史 E-mail: taka(at)icems.kyoto-u.ac.jp

### ハイライト 新規エレクトロクロミック材料の自己組織化構築

【日時】 12月19日(日) 午後2時45分～

【会場】 Coral I (Hilton)

【講演番号】 ID 1541 口頭

【講演題目】 エレクトロクロミック機能を有する有機/金属ハイブリッドポリマーの創製とデバイス応用 (Device application of organic-metallic hybrid polymers with electrochromic properties)

【講演者】 樋口 昌芳 (所属) 物質・材料研究機構

従来の有機ポリマーと異なる新しいタイプのポリマーとして、有機/金属ハイブリッドポリマーを合成しました。このポリマーは、有機モジュールと金属イオンの錯形成によってポリマー主鎖が形成されています。ピスターピリジン誘導体を有機モジュールとして使い、鉄やルテニウムなどの金属イオンと錯形成させて得られたハイブリッドポリマーでは、金属イオンから有機モジュールへの電荷移動吸収によって青や赤に着色します。興味深いことに、これらのポリマーフィルムを電気化学的に酸化すると色が消える現象(エレクトロクロミック現象)を発見しました。逆に、消色状態のポリマーフィルムに還元電圧を印加するとポリマーフィルムの色は元に戻りました。この色変化は、ポリマー中の金属イオンが酸化還元されるために起こることを紫外可視吸収スペクトル測定などから明らかにしました。さらに、これらのハイブリッドポリマーを用いた表示デバイスへの応用も試みました。将来は、カラー電子ペーパーやスマートウインドウなどへの利用が期待されます。

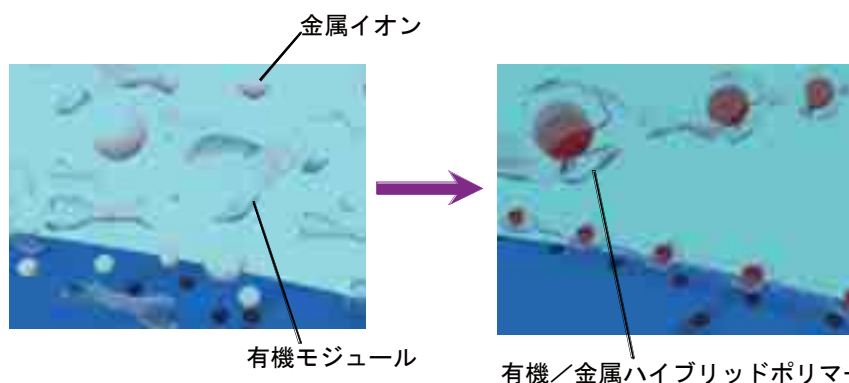


図1 金属イオンと有機モジュールの錯形成による有機/金属ハイブリッドポリマー合成が

【連絡先】 樋口 昌芳 E-mail: HIGUCHI.Masayoshi(at)nims.go.jp



## #173 Molecular Design in Bioinorganic Chemistry

## 生物無機化学における分子デザイン

【オーガナイザー】林 高史 (阪大) | David Goldberg | Pierre Kennepohl |

増田秀樹 (名工大)

【開催日】: 12月17日 (金) 午前・午後・夜、18日 (土) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Coral I (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

生物無機化学は、生体内に存在する様々な金属を含む生体分子の構造、物性、反応性、役割等を解析することを主目的として、20世紀の後半から飛躍的に発展している学際的分野である。たとえば、我々の血液の中で酸素を運搬するヘモグロビンや、代謝過程の酸化還元をつかさどる様々な酵素、物質生産に関与する生体金属触媒、光合成系に存在する金属錯体色素、あるいはセンサーや生体内の電子移動など、対象となる生体金属分子は非常に多い。近年、それらの構造や機能が次第に明らかとなり、次の標的は、より難易度の高い詳細な解析とともに、新しい機能を求めた生体金属分子の改変、さらには生体材料・デバイス・医薬への応用が考えられる。本セッションでは、複雑な生体金属分子の活性中心の構造・機能モデルの構築、金属含有タンパク質の化学的機能改変、分光光学を駆使した新しい生体金属の解析と評価、及び生体金属分子の医薬・材料への応用の4つを軸に、第一線で活躍する生物無機化学の研究者による最新の話題提供および研究討議と、今後の生物無機化学の方向性と展望を討議する。

## ハイライト 生物無機化学における分子デザイン

【日時】12月17日 (金) 午前8時50分~9時30分 【会場】Coral I (Hilton)

【講演番号】ID 622 口頭

Activation and catalytic reduction of dioxygen: Lessons from heme enzyme chemical models

酸素分子の活性化と触媒的還元: ヘム酵素化学モデルから学ぶべきこと

○成田吉徳・劉 勁剛・太田雄大・Maity Annada Charan・谷 文都 (所属)九州大学 先導物質化学研究所

生物によるエネルギー変換は環境適合型で高効率であることから、生体系のエネルギー変換機序を学ぶことは、直接水素エネルギー社会を構築する基本的な原理を提供すると考えられる。この生体系の中核は4電子移動過程を経由する水と酸素分子の相互変換を介した化学エネルギー変換にある。本発表者は反応が十分解明されていない酸素の4電子還元を行う呼吸の酵素 (チトクロム *c* 酸化酵素:  $CcO$ ) に焦点を当て、精密な化学モデル合成することより反応を解明すると共にその分子触媒構築を展開している。具体的には、 $CcO$ の活性中心であるヘムと銅錯体の構造をもとに、その連結モデルとして、右図に示すような鉄-銅二核錯体を合成した。さらに、その酸素錯体あるいはペルオキシ錯体を調製し、その構造的データを詳細に解析し、本発表者は酸素から水への複雑な還元過程の反応メカニズム解明に大きく貢献した。また、この知見は、生体内の呼吸代謝系を化学的に理解するだけでなく、エネルギー変換を担う新たな機能性分子の創製に有益な指針を与えるものと期待される。



【連絡先】812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1 九州大学先導物質化学研究所 (箱崎キャンパス)

電話 092-642-2731, E-mail: naruta(at)ms.ifoc.kyushu-u.ac.jp

## #2-194 Coordination Chemistry toward Artificial Photosynthesis and Energy Conversion Processes

### 人工光合成及びエネルギー生産を目指した錯体化学

【オーガナイザー】: 田中晃二 (分子研) | 酒井健 (九州大) | James Mukerman (Brookhaven National Laboratory) | Licheng Sun (Dalian Univ. of Technology)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 Kahili I/II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

#### 展 望

化石燃料の枯渇問題、燃焼により生ずる二酸化炭素増加の問題を解決するため、現代では再生可能かつクリーンなエネルギーの開発が盛んに行われている。このシンポジウムでは、錯体化学の観点から上記の問題にアプローチする試みとして、人工光合成及びエネルギー変換に関する研究に焦点を合わせている。光合成は生態系における唯一のエネルギー貯蔵システムであり、その代謝経路の中で遷移金属錯体が重要な役割を担うことが知られている。人工光合成研究は、光合成における重要な3つの反応、(1)光のエネルギーを吸収して電荷分離状態を作る、(2)吸収した光エネルギーを用いて水を酸化し電気エネルギーを得る、(3)光・電気エネルギーを物質に変えて貯め込む・利用する、を模して研究が行われているが、必ずしも天然と同一な化合物を用いる訳ではなく、それぞれの反応の制御可能な金属触媒開発という形で進められている。最近では、(2)の水の酸化反応(酸素発生)触媒が数多く報告され、(3)光・電気エネルギーの化学変換に関しては、光エネルギーを用いた二酸化炭素還元、水素発生などが報告されており、この分野における研究の進歩が目覚ましい。今後、このような研究を通して、化学発の新しいエネルギーシステムを社会に還元できると考えられる。

ハイライト 光エネルギーを二酸化炭素削減利用へ

【日時】12月19日(日) 午後1時~1時35分 【会場】Kahili I/II (Hilton)

【講演番号】ID 1566 口頭

#### Artificial photosynthesis using metal complexes

金属錯体を用いた人工光合成

○石谷 治 (所属) 東京工業大学 理学部

天然の光合成では、光エネルギーを電気エネルギー(還元エネルギー)に変換して、NADPHと言う物質に貯蔵している。植物の二酸化炭素を還元して糖類を作る反応にはNADPHに貯め込まれた還元エネルギーを用いている。石谷教授は、このような光エネルギーを用いた化学還元反応に焦点を絞り、特に二酸化炭素還元、NADP<sup>+</sup>をNADPHに還元する反応の研究を精力的に行っている。一般に光のエネルギーでは一分子あたり一電子分の還元力しか得られず、反応に二電子が必要な二酸化炭素やNADP<sup>+</sup>の還元反応を効率的に行うためには工夫が必要である。石谷教授は、Ru(II)やRe(I)を中心金属として有する錯体分子を、光エネルギーを集める部位として利用し、錯体の配位子置換反応をうまく利用して二酸化炭素還元を行っている。また、金属錯体をいくつか連結した分子を合成して、光還元反応の効率化も試みている。更に、生態系を模した系としては、Ru(II)錯体を利用して光のエネルギーをNADPHに貯める研究も報告している。以上のように、光エネルギーを用いた還元反応の研究は現代社会が抱える環境問題に直接アプローチするものであり、石谷教授の研究成果は世界的にも評価が高い。

【連絡先】E-mail: ishitani(at)chem.titech.ac.jp

ハイライト 酸素発生触媒のパラダイムシフト: 全く新しい分子構造の触媒

【日時】12月19日(日) 午前9時15分~9時40分 【会場】Kahili I/II (Hilton)

【講演番号】ID 1463 口頭

#### Catalysis of mononuclear ruthenium complexes in oxygen evolution from water

ルテニウム単核錯体の酸素発生触媒作用

○正岡重行、吉田将己、木本彩乃、山内幸正、酒井健(所属) 九州大学 大学院理学研究院



人工光合成の基盤となる水の分解反応は水素発生と酸素発生という2つの反応に分けることができる。このうち、酸素発生は4つの電子の移動を伴う反応 ( $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$ ) であることから、2電子の移動反応である水素発生 ( $2\text{H}^+ + 2\text{e}^- \rightarrow \text{H}_2$ ) よりも一般的に困難な反応として知られている。

この酸素発生に対する触媒としては、これまで「触媒分子内に2つ以上の金属イオンが必要」ということが常識とされてきた。しかし講演者らは近年、図に示すような金属錯体が、金属イオンであるルテニウムイオン (Ru) を1つしか含まないにもかかわらず、酸素発生触媒として非常に高い活性を有することを見出した。これは1980年代からの30年来の常識を覆す、まさに「パラダイムシフト」と呼ぶべき結果であり、人工光合成の達成、ひいてはエネルギー問題を解決するための新たなアプローチになることが期待できる。実際にこの発見以後、世界中の研究者がこの新しいタイプの触媒に注目し始めており、今やかつての常識は既に過去のものとなっている。

本講演では、この酸素発生触媒の発見や、さらに研究を進める中で明らかとなってきたこの触媒の特異な反応機構について紹介が行われる予定である。

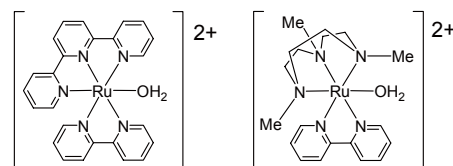


図 酸素発生触媒の分子構造

【連絡先】 812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1

電話 092-642-2598, E-mail: masaoka(at)chem.kyushu-univ.jp

## #248 Carbon-fluorine Bond Activation: a Crossroads of Inorganic, Organic, and Environmental Chemistry

### 炭素-フッ素結合の活性化：無機化学，有機化学，環境化学の接点

【オーガナイザー】：Oleg V. Ozerov (Texas A&M University) | Jennifer Love (University of British Columbia) | 秋山隆彦 (学習院大理)

【開催日】：12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後

【会場】：口頭発表 Coral I (Hilton)

ポスター会場：Kamehameha Halls I and II (Convention Center)

### 展 望

非常に強い化学結合であり、一般に活性化の困難とされている「炭素-フッ素結合」を、金属錯体等を用いて活性化する方法論およびその応用について多方面から議論する。炭素-フッ素結合は、炭素に結合した最も強い結合の一つであることから、金属錯体を用いる事により、この強固な結合を活性化する研究は、有機金属化学の研究者にとって、非常に魅力的かつ挑戦的な課題の一つである。炭素-フッ素結合は、温室効果ガスの一種であるフロンガス等に多数含まれており、炭素-フッ素結合を活性化する簡便な手法を開発する事ができれば、フロンガス等の分解も容易に行う事が可能となり、オゾン層の破壊に対する一つの解決策を提供する事になり、環境化学的な側面からも重要な課題であるといえよう。また、医薬品、農薬等の中にも炭素-フッ素結合を有する生理活性化合物が多数存在する。炭素-フッ素結合を容易に活性化し、他の官能基に変換したり、ポリフッ素化合物を部分的に脱フッ素化する事ができれば、含フッ素化合物を有用な合成中間体として用いて、様々な生理活性物質の合成を行う事が可能となり、合成化学的にも大変有用である。本シンポジウムでは、無機化学、有機化学、環境化学の研究者が同じ場で議論する事により、その問題点を明らかにし、今後の展望を議論する。

### ハイライト 炭素-フッ素結合活性化の最前線

【日時】12月15日(水) 午前9時25分~10時5分 【会場】Coral I (Hilton)

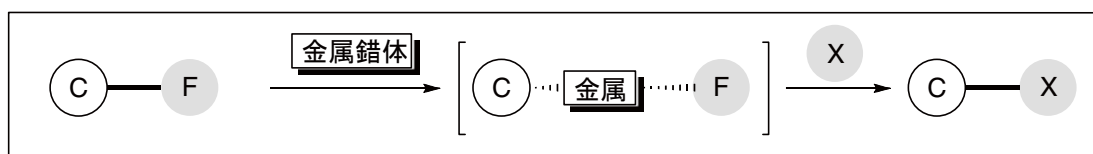
【講演番号】ID #79 口頭

#### C-F bond activation in organic synthesis

有機合成化学における炭素-フッ素結合活性化

○宇根山健治・内海慎也・片桐利真 (所属) 岡山大学 大学院自然科学研究科

炭素-フッ素結合は最も強い結合の一つであり、そのため、含フッ素化合物は一般に安定である。従って、炭素-フッ素結合を活性化させ切断する事は、困難な事と考えられている。近年、金属錯体を用いる事により炭素-フッ素結合を活性化させ、他の官能基に変換する手法が開発されつつある。講演では、有機合成化学における、「炭素-フッ素結合活性化反応」の近年の発展について紹介し、最新の研究成果も併せてその将来を概観する。



【連絡先】 E-mail: uneyamak(at)cc.okayama-u.ac.jp

## #02-251 New Frontiers in Polyoxometalate Chemistry

## ポリオキソメタレートの化学のフロンティア

【オーガナイザー】: May Nyman | 水野哲孝 (東大) | Collette Boskovic | Lin Xu

【開催日】: 12月18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 South Pacific (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

ポリオキソメタレート (POM) と呼ばれるナノサイズの金属酸化物クラスターアニオンに関する研究が盛んである。POM は、酸化還元能、酸塩機能、金属イオンに対する配位能、高い負電荷、などに基づき長い研究の歴史があるが、近年では、数百の金属原子からなるクラスターアニオンの合成とその分子構造、POM を構成ユニットとしたイオン液体、単分子磁石や三次元構造体材料、POM の高い触媒機能、などに関する新しい発見が注目を浴びている。本シンポジウムでは、新規な POM の合成とその分子構造に関する基礎的知見のみならず、触媒、比色分析、電気化学、抗ウイルス薬、イオン交換、カス吸着、表面化学、などへの応用について討論・情報交換する。また、19日(日) 午前のセッションでは、2009年ノーベル化学賞受賞者の Ada Yonath 教授に、リボソームの機能的運動性に対するポリオキソタングステートの影響、について講演をしていただき、ポリオキソメタレートの化学と微生物学の境界領域における新しいアイデアを創出する場としたい。

## ハイライト 多孔性材料

【日時】 12月18日(土) 午前9時50分~10時20分 【会場】 South Pacific I (Hilton)

【講演番号】 ID 942 口頭

## Porous metal oxide materials prepared using polyoxometalates

ポリオキソメタレートを構成ユニットとした多孔性金属酸化物材料

○定金正洋、上田渉(所属) 広島大学大学院工学研究科、北海道大学工学研究科

モリブデン及びバナジウムナノ酸化物クラスターを構成ユニットとする結晶性のマイクロポーラス金属酸化物を合成した。この金属酸化物は直径 0.4 nm の均質な細孔を有することから分子ふるい効果を示し、選択酸化触媒としても機能した。また、ポリメチルメタクリレート粒子をテンプレートとして用い、タングステンナノ酸化物クラスターを原料としてマクロポーラス金属酸化物を合成した。この金属酸化物は直径 100 nm オーダーの均質なマクロ孔を有し、マクロ孔内に白金を担持することにより光触媒として機能した。

【連絡先】 定金正洋 sadakane09(at)hiroshima-u.ac.jp

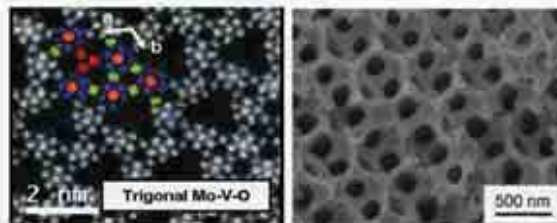


図1. (左)マイクロポーラス、(右)マクロポーラス金属酸化物の電子顕微鏡写真。

## ハイライト 電池材料

【日時】 12月19日(日) 午後1時00分~1時20分 【会場】 South Pacific I (Hilton)

【講演番号】 ID 1547 口頭

## Molecular cluster batteries of polyoxometalate materials

ポリオキソメタレートを用いた分子性クラスター電池

○吉川浩史、阿波賀邦夫(所属) 名古屋大学大学院理学研究科

近年、エネルギー材料、特に、高機能二次電池の開発が盛んである。既に、より高い充放電速度とエネルギー密度を実現するリチウム二次電池の正極材料として、12核マンガンクラスターが有望であることを報告している。今回、正極にポリオキソメタレート([PMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>3-</sup>)を用いると、260 Ah/kg と、マンガンクラスター(200 Ah/kg)や一般のコバルト酸リチウム系材料(148 Ah/kg)と比較して高い容量が得られたことを報告する。

図2. 分子性クラスター電池。正極: [PMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>3-</sup>、負極: Li

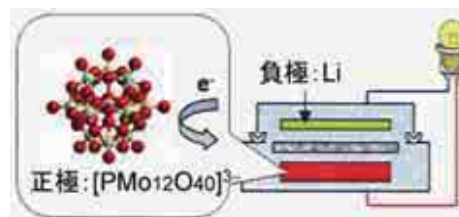


図2. 分子性クラスター電池。

【連絡先】 阿波賀邦夫 awaga(at)mbox.chem.nagoya-u.ac.jp

## #2-275 Nanoscale Characterization of Functional Materials by Nuclear Probes

## 核プローブによる機能材料のナノスケール化学計測

【オーガナイザー】:野村貴美(東大),山田康洋(理科大),J. Steven(米),A. Hill(豪),H.H. Wei(台湾)

【開催日】:12月18日(土)7:30~11:30, 12:30~16:30, 19:00~21:00, 19日(日)7:30~11:30

【会場】:口頭発表; Sea Pearl III/IV (Hilton)、18日 19:00 から South Pacific III (Hilton)

## 展 望

近年、ナノスケールで制御された高機能性物質・材料の開発が盛んであり、そのナノ構造と機能の評価のための新しい分析法の開発が求められている。このシンポジウムでは、原子核や素粒子をプローブ(探針)としたナノスケール化学計測の展望について討論する。特に $\gamma$ 線無反跳核共鳴(メスバウアー効果)、陽電子消滅、核磁気共鳴、 $\gamma$ 線摂動角相関、 $\mu$ SR(ミュオンスピン回転・緩和・共鳴)などの核化学的な分析法による機能性物質のナノスケールでの構造や機能評価について議論する。発表は33件。

## ハイライト 物質中の原子の穴の分布の観察に成功

【日時】12月19日(日)午前8時40分~9時 【会場】South Pacific III (Hilton)

【講演番号】ID 1443 口頭

Development of positron probe microanalyzer for a 2-D defect mapping

## 二次元原子空孔マップ計測のための陽電子プローブマイクロアナライザーの開発

○ 藤浪真紀 (所属) 千葉大学大学院工学研究科

物質中の原子の穴である原子空孔の分布は、材料の破壊、電子デバイスの不良化、透明性などに大きな影響を与えるためその評価法の開発が求められていた。そこで、原子空孔を検出する陽電子(電子の反粒子)を用いたマイクロアナライザーを世界に先駆けて開発した。この装置はマイクロビーム化した陽電子を二次元走査して試料に照射し、発生する消滅 $\gamma$ 線を検出することで原子空孔の二次元分布を求める装置である。本法を、純鉄の塑性変形にともなって誘起される原子空孔挙動の測定に応用したところ、変形時には一見一様にみえる領域でも数箇所原子空孔が多量に導入されていることを新たに見出し、破断の前駆体をつきとめることに成功した。さらに破断部では原子空孔が1mm以上の領域に分布していることがわかった。本法は、金属・半導体・高分子材料への応用が期待される。

【連絡先】263-8522 千葉市稲毛区弥生町1-33 千葉大学大学院工学研究科  
電話043-290-3503, E-mail: fujinami(at)faculty.chiba-u.jp

## ハイライト 巨大な磁性を示す「直線やじろべい型鉄化合物」

【日時】12月18日(土)午後7時~9時 【会場】South Pacific III (Hilton)

【講演番号】ID 1342 口頭とポスター

Mössbauer studies of linear two-coordinate Fe complexes with bulky arylthiol ligands

## かさ高いアリルチオール配位子を有する直線二配位鉄錯体のメスバウアー分光研究

○ 小林義男、長友 傑、伊藤幹直、松尾 司、渡邊功雄、石井康之、玉尾皓平 (所属) 理研

鉄(Fe)は身の回りに数多く存在し、血液や土壌など生命活動を維持する上でも不可欠な元素である。新規に開発したかさ高い立体保護基(Rind基)が窒素N、酸素Oあるいは硫黄S原子を介して鉄原子に結合した「直線型やじろべい」分子を開拓した(図1)。この化合物は鉄として非常に珍しい2配位化合物で、FeとRind基を結びつける元素の種類によって磁気的性質が極端に変化する。硫黄原子の場合-S-Fe-S-結合角が $164^\circ$ で小さな磁性を示すが、窒素原子では-N-Fe-N-結合角が直線に近づき、金属鉄にも匹敵する大きな磁性をもつことがメスバウアー分光法と $\mu$ SR法から明らかになった。磁性の発現の機構解明と応用の広がりが期待される。

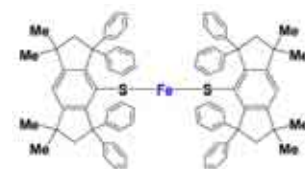


図1「直線やじろべい型」化合物

【連絡先】351-0198 和光市広沢2-1 理化学研究所 岩崎先端中間子研究室

電話048-476-4536, E-mail: kyoshio(at)riken.jp



## # 12 NMR Spectroscopy of Polymers: Innovative NMR strategies for Complex Macromolecular Systems

### NMR 法による高分子研究の最近の動向

【オーガナイザー】：朝倉哲郎(農工大) A. D. English (Dupont) H.N.Cheng(USDA) P. M. Macdonald (Toronto Univ.) A. K. Whittaker (U. of Queensland) J. L. White (Oklahoma State Univ.) H. W. Spiess (Max-Plank Inst.), 堀井文敬(福井大)

【開催日】：12月18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】 Convention Center 326B

### 展 望

私達の周りは、高分子材料から作られたモノがあふれています。より優れた高分子材料の開発には、その構造や運動性を知ることが重要ですが、多くの高分子材料は不均一な構造であり、そのような試料の解析には核磁気共鳴 (NMR) 法が有効です。高分子材料の多様化とともに、NMR の測定手法も日々進歩しています。例えば、1GHz にせまる超高磁場 NMR 装置と超高速 MAS による分解能の向上、四極子核を高分解能で測定できる MQ-MAS 法、固体  $^1\text{H}$  NMR 法、NMR イメージングの固体材料への応用等が近年、活発に用いられています。また、DNP 法という電子スピンを利用して感度を劇的に向上させる手法も発展しつつあります。本シンポジウムでは、40 件の口頭発表、3 件のチュートリアル、24 件のポスター発表があり、最新の手法を含む様々な NMR 手法を組み合わせた高分子研究発表が行われます。さらに、チュートリアルでは、固体 NMR による高分子材料のダイナミクス解析手法、PFG (Pulse Field Gradient)法を用いたポリマーの拡散解析、溶液 NMR によるポリマー解析の進展について、それらの研究の第一人者に話をします。

ハイライト 光る高分子、その特性の起源を探る

【日時】12月18日(土) 午後3時30分~4時00分 【会場】 Convention Center 326B

【講演番号】 ID 845 口頭

### Elucidation of the Backbone Conformation in Polyfluorene in Different Phases by Solid-State NMR

固体 NMR によるポリフルオレンの主鎖コンホメーション解明

○梶 弘典、福島達也、木内洋平、後藤 淳 (所属) 京都大学 化学研究所 分子材料化学研究領域

現在、世界中で実用化に向けて有機 EL に関する研究開発が活発に進められている一方で、その礎となる基礎科学はまだ確立されていません。そのような状況の中、我々はアカデミックな観点から、有機 EL に関する基礎研究を行っています。今回の講演では、優れた高分子系有機 EL 材料であるポリフルオレン(PFO)の主鎖コンホメーションを二次元二量子遷移固体 NMR 法という、固体 NMR の中でも先進的な測定手法を用いて精密解析を行った結果について報告します(図)。この測定法では、高分子のコンホメーションを、結晶・非晶状態を問わず、定量的に精密に解析することができます。本研究により、 $\beta$ 型 PFO のねじれ角が  $180^\circ$  であり、 $2_1$  ヘリックス構造をとっているという実験的検証をはじめ得ることができました。また、PFO が固相中でも側鎖融解挙動を示すこと、さらに、薄膜においては、非晶状態にありながら主鎖が基板に対して平行配向することも明らかとなりました。このような分子のコンホメーションや配向分布はデバイス特性に大きく影響します。今後、構造-特性相関を明確にすることにより、さらに優れた特性を有する材料・デバイスの開発に寄与したいと考えています。

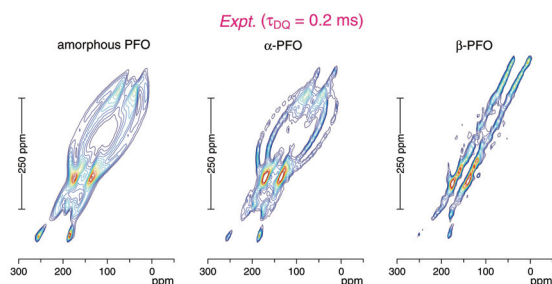


図 ポリフルオレンの二次元二量子遷移固体 NMR スペクトル



【連絡先】 〒611-0011 宇治市五ヶ庄 京都大学 化学研究所 分子材料化学研究領域  
電話 0774-38-3149, E-mail: [kaji@sci.kyoto-u.ac.jp](mailto:kaji@sci.kyoto-u.ac.jp)  
Web page: <http://molmat.kuicr.kyoto-u.ac.jp/>

ハイライト 古くて新しいゴムの研究—核磁性からの展望

【日時】 12月19日(日) 午前9時30分~10時00分 【会場】 Convention Center 326B  
【講演番号】 ID 1049 口頭

### Analysis of Molecular Motion of Rubbers Under the Fast MAS

高速マジック角試料回転中におけるゴムの分子運動解析

○浅野敦志、堀俊介、北村成史、田中千賀子、黒津卓三(所属) 防衛大学校 応用科学群 応用化学科

ゴムの研究というと「古い」というイメージがありますが、ゴムの物性とナノレベルの構造との関連性は、今でも解明されていないことが多く、特に植物由来の天然ゴムは、脱石油、二酸化炭素低排出世界にとって必要な材料として再認識されていて、更なる高機能化と有効利用が求められている材料の一つです。このような背景から、私は原子核の磁性を観測する固体核磁気共鳴(NMR)法を用いて、ゴムのナノレベルの構造や運動性と物性との関連性を解明することを目標としています。今回の講演では、タイヤなどに使われる、合成ゴムSBRと二酸化珪素(SiO<sub>2</sub>)からなる複合材料で起きる伸張下での弾性率低下や、東南アジアで採取された天然ゴムが伸張時に起こす配向挙動などについて、固体NMR法から議論した結果について報告します。一例として天然ゴムが固体NMRを測定中に延伸されていく様子を捉えたスペクトルを図に示します。固体NMR法は通常、試料管を高速で回転させながら測定しますが、図のスペクトルは高速回転した後に静止させた状態で測定しています。一番上は回転する前、中間のスペクトルは回転中の伸張を制限した場合、一番下は伸張を制限していない場合です。このように天然ゴムの伸張度に応じてスペクトルが変化します。この変化はゴム分子鎖の規則的な配向に影響されたためと考えられます。配向挙動は実際のゴム物性に大きく寄与するため、固体NMR現象との相関を解明することにより、材料の特性をナノレベルで解明することが可能となり、ゴムを改良して有効利用する際の特性解析に役立つと期待されます。

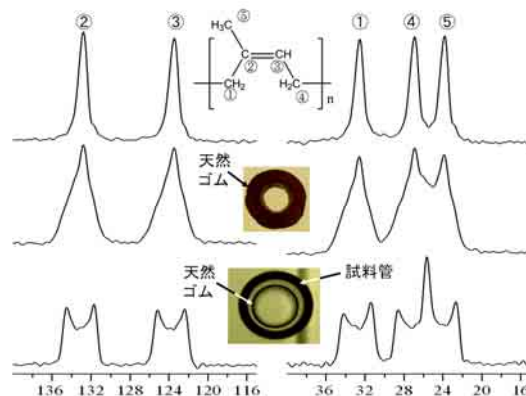


図 伸張前(上)、伸張途中(中)、伸張後(下)の天然ゴムの固体NMRスペクトル

【連絡先】 〒239-8686 神奈川県横須賀市走水1-10-20 防衛大学校 応用科学群 応用化学科  
電話 046-841-3810, E-mail: [asanoa@nda.ac.jp](mailto:asanoa@nda.ac.jp)  
Web page: <http://www.nda.ac.jp/~asanoa/>

## # 3-42 Chemistry and Functional Properties of Soft Interfaces

## ソフト界面の化学と機能特性

【オーガナイザー】: 高原 淳 (九州大) | Kookheon Char (ソウル大学), 栗原和枝 (東北大)、前田瑞夫 (理研) | Zhaohui Su (長春応用化学研究所) | Gregory G Warr (Univ. Melbourne) | Kenneth Wynne (Virginia Commonwealth Univ.)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前、午後、夕方、18日(木) 午前

【会場】: 口頭発表 325B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

高分子、液晶、界面活性剤、コロイドや生体高分子などの柔らかい材料はソフトマテリアルと分類され、それが気体や液体、固体と接する界面は「ソフト界面」と呼ばれる。ソフト界面の化学的・物理的な性質は濡れ性、摩擦特性、接着、生体適合性、電子物性などの現代社会に必要な高機能材料の様々な性質に大きな影響を及ぼす。そのためにソフト界面の構造と性質を自在に操ることにより新しい機能性の発現が期待される。本シンポジウムでの活発な研究討議により 1) ソフト界面の構造と動的特性の精密な制御、2) ソフト界面の構造や物性を解析する技術、3) ソフト界面の新規な機能特性発現、が実現し、この分野の科学と技術が大きく発展することを期待される。

.....  
**ハイライト** 超滑らかな表面を目指して: 新規分子集合体“濃厚ポリマーブラシ”の利用

【日時】12月16日(木) 午前14時35分~15時00分 【会場】326B (Convention Center)

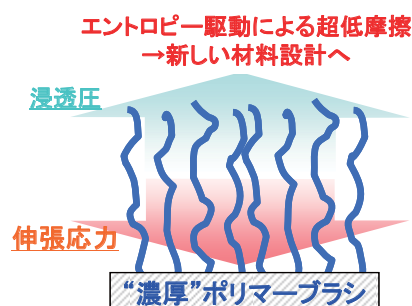
【講演番号】ID195 口頭

Entropically Driven Super-Lubrication of Concentrated Polymer Brushes in Solvents

溶媒中における濃厚ポリマーブラシのエントロピー駆動超潤滑

○辻井敬亘、野村晃敬、Weiping Gao、大野工司、福田猛 (所属) 京都大学 化学研究所

ポリマーブラシとは十分な密度で末端固定されたポリマー鎖の集合体を指し、表面特性を大きく左右する。当研究室ではリビングラジカル重合法により、飛躍的に高い密度の“濃厚ポリマーブラシ”の合成に成功し、良溶媒中において伸びきり鎖に匹敵するほど高度に伸張された形態をとることを実証した。この膨潤ポリマーブラシ同士を対抗させて摩擦特性を調べた結果、(従来の、比較的密度の低い) 準希薄ポリマーブラシ間では荷重の増大に伴って低摩擦領域から約3桁も摩擦係数の大きい領域への転移を示すのに対し、濃厚ポリマーブラシ間では高荷重においても摩擦係数が0.0005以下という極めて小さな値を示すことを発見した。この極低摩擦特性は、濃厚系ゆえの大きな浸透圧が大きな荷重を支えることに加え、いかなる圧縮状態でも、その高度に伸張された形態ゆえにブラシ同士が相互に貫入しないためと理解される。いずれもエントロピー駆動による効果である。省エネルギー・低環境負荷の観点から摩擦・摩耗・潤滑の制御は極めて重要な課題であるが、上記の低摩擦発現機構の理解に基づき、極低摩擦特性を示す新規ソフトマテリアルの設計指針を提案する。



濃厚ポリマーブラシ間では高荷重においても摩擦係数が0.0005以下という極めて小さな値を示すことを発見した。この極低摩擦特性は、濃厚系ゆえの大きな浸透圧が大きな荷重を支えることに加え、いかなる圧縮状態でも、その高度に伸張された形態ゆえにブラシ同士が相互に貫入しないためと理解される。いずれもエントロピー駆動による効果である。省エネルギー・低環境負荷の観点から摩擦・摩耗・潤滑の制御は極めて重要な課題であるが、上記の低摩擦発現機構の理解に基づき、極低摩擦特性を示す新規ソフトマテリアルの設計指針を提案する。

【連絡先】 E-mail: tsujii(at)scl.kyoto-u.ac.jp

.....  
**ハイライト** ソフト界面による生命現象の制御を目指して

【日時】12月16日(木) 午前9時10分~9時35分 【会場】326B (Convention Center)

【講演番号】ID 140 口頭

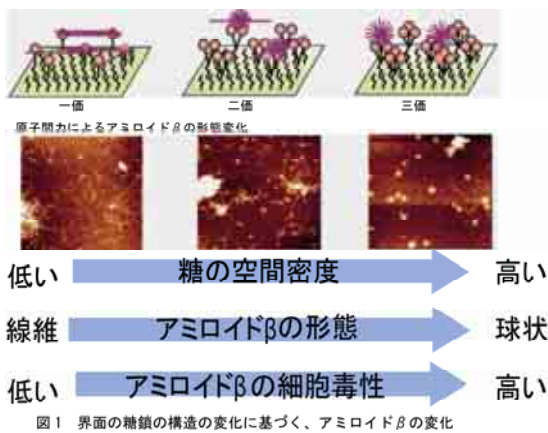
Dendritic sugar interface and biological functionality

樹状糖鎖界面創製と生体機能解析

○三浦佳子 (所属) 九州大学大学院工学研究院

細胞の表面には、糖脂質、糖タンパク質など、“糖鎖（糖化合物が連なった化合物）”がある。糖鎖とタンパク質の相互作用が生命の信号として働き、生命活動が支えられ、ときには病気の発症の原因となっている。糖鎖の働きは細胞膜上での密度や提示状態によって変わると言われているが、はっきりした証拠はない。そこで、人工的に糖の密度や提示状態を制御した界面を作成し、生体で起こっている生命信号の働きを解析した。

そのために、デンドリマーと呼ばれる、明確なナノ構造を持つ、多分岐の特殊な高分子を利用して、糖鎖の密度と提示を制御した。デンドリマーの末端に硫酸基を持つ糖鎖を結合させて、金の基板の上に糖を組織的に並べた。この界面に対して、アルツハイマー病の原因タンパク質である、アミロイドβを相互作用させた。硫酸基を持つ糖鎖の密度が高くなると、アミロイドβの結合は強くなり、形態はナノ線維から丸い塊へと変化し、丸い塊では細胞毒性を発揮するようになった。この結果は硫酸化糖の密度がアルツハイマー病の発症に関係することを示唆した（下図）。また、本研究より、生理活性を持つ分子の界面提示によって、生命現象を自由にコントロールできることが示された。



【連絡先】 819-0395 福岡市西区元岡 744 九州大学大学院工学研究院化学工学部門  
 電話 092-802-2749, E-mail:miuray(at)jaist.ac.jp

## # 3-64 Polymer Materials Performance, Degradation and Optimization

### 高分子材料の性能・劣化・最適化

【オーガナイザー】:

Mathew Celina (Sandia National Laboratories) | Tim Dargaville | 工藤久明 (東大)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後、17日(金) 午前

【会場】: 口頭発表 323A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

本シンポジウムは、高分子材料の過酷な環境での利用や、先進的な利用に焦点をあてている。高分子材料を、その性能や特性を向上させ、またそれらを長期間にわたり維持して利用するためには、その発現や劣化の機構の解明が必要で、さらに、用いられる環境の条件を踏まえた、利用できる期間の予測・評価が重要である。

本シンポジウムの発表は、主に次の3分野、a)過酷な環境(放射線、熱、光、化学物質等への暴露)や特殊な環境(生体内、宇宙環境等)での高分子材料の劣化、b)放射線加工やグラフト(接木)重合技術等による高性能高分子材料の創成、c)バイオマテリアルやナノマテリアルおよびそれらの複合材料等の実用化へ向けた取組み、で構成される。

とりわけ、高分子材料の劣化の化学的機構や寿命予測・評価に関する研究は、部品等から巨大プラントにいたるまで様々なシステムの安全性の保証、ひいては社会の安全・安心への貢献という点で、大きな意義を持っている。近年、科学技術の進展につれて、高分子材料を劣化させる因子は多様化し、また複数の劣化因子の作用の順番が問題になるなど、条件も複雑化している。この重要だが難解な課題に果敢に挑戦している研究例が多く発表される。

ハイライト 原子力発電所の高経年化対策の最前線

【日時】12月16日(木) 午前8時~8時30分 【会場】323A (Convention Center)

【講演番号】ID 167 口頭

### Polymer Oxidation Mechanisms by Thermal and Radiation Ageing for Cables in Nuclear Power Plant

原子力発電所のケーブルの熱及び放射線劣化による高分子材料の酸化機構

○瀬口忠男<sup>1</sup>、田村清俊<sup>1</sup>、島田明彦<sup>1</sup>、大島武<sup>1</sup>、工藤久明<sup>2</sup> (所属) 1:(独) 日本原子力研究開発機構、2: 東京大学 大学院工学系研究科

### 概 要

現在、わが国の電力の約3割を供給している原子力発電所において、運転開始から三十年以上を経過するようなプラントの高経年化対策が喫緊の課題となっている。新規プラントの建設も容易ではないため、六十年を視野に入れた運転期間の延長も検討されている。高経年化において、取替えや補修が困難でかつ重要な機能を持つ機器類の劣化研究が各界ですすめられているが、そのひとつにケーブルの絶縁劣化がある。本講演では、原子力発電所のケーブル絶縁用高分子材料の劣化メカニズムが、数十年を数カ月で模擬する加速劣化試験により研究されている。原子力発電所では、熱および放射線の作用により、高分子が酸化して劣化するが、実用の絶縁材料に配合されている酸化防止剤が、1%程度の低濃度の添加により、熱劣化を効果的に抑制すること、しかし放射線に対しては酸化防止剤が分解することが明らかになった。また、熱劣化でも、実環境よりも極端に高温にした加速劣化では、酸化防止剤が蒸発し、劣化が進行することが明らかになった。従来、酸化機構は、過酸化物質等を介した連鎖反応とされてきたが、その寄与は大きくないことがわかり、高分子の酸化劣化に関する新しい反応メカニズムを提唱する。

【連絡先】319-1195 那珂郡東海村白方白根 2-4 日本原子力研究開発機構安全研究センター  
電話 029-284-3936, E-mail: tamura.kiyotoshi(at)jaea.go.jp







## #3-98 The New Age of Advanced Materials: Supramolecular Architectures and Smart Materials

## 最先端材料の新展開：超分子アーキテクチャーとスマート材料

【オーガナイザー】: Karen Wooley (Texas A&M University) | Frank Caruso (The University of Melbourne) | Myongsoo Lee (Seoul National University) | 相田卓三 (東大院) | 八島栄次 (名大院)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Hawaii Convention Center 321B

展 望: 高分子化学・超分子化学はボトムアップナノテクノロジーの中核となる基盤技術である。本シンポジウムでは、(1) 精密に設計された高分子の新合成法と応用、(2) 生体関連スマートナノ材料、(3) キラル高分子・超分子からなるスマート材料、(4) 超分子化学を基本とする機能性ソフトナノ材料の設計と応用、(5) 有機・無機物を基本とするスマート材料、といった最も進歩の著しい研究分野にハイライトし、まさに世界第一線の研究者の講演により先端材料(ソフトマテリアル)の最新の進歩を展望し、革新的科学技術創成の可能性を探る。

ハイライト 望み通りのポリマーを美しく創る

【日時】12月15日(水) 午前7時30分~8時00分 【会場】321B (Convention Center)

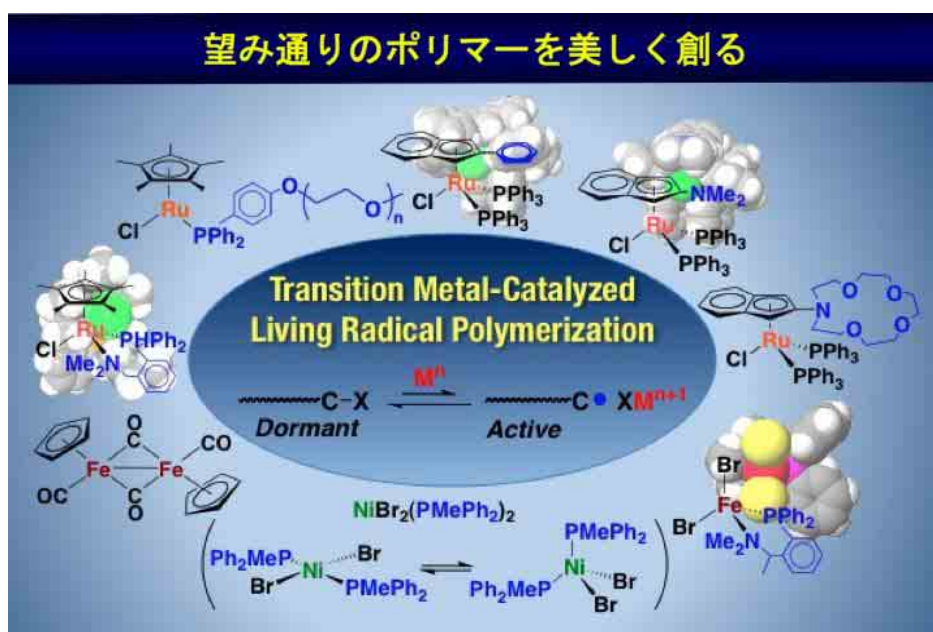
【講演番号】38 口頭

Advanced and Smart Polymeric Materials via Metal-Mediated Living Radical Polymerization

金属触媒・精密ラジカル重合による先端スマート高分子材料

○澤本光男 (所属) 京都大学 大学院工学研究科 高分子化学専攻

コンピューター(フォトレジスト)や表示材料(色素分散剤)などの先端分野では、思い通りの大きさ(分子量)をもち思い通りの役割(機能)を果たすスマート・ポリマーが求められている。人の顔にはその人の人生が映されているというが、ポリマーがスマートになるには、その誕生(開始)から成熟(生長)までの一生を精確に進める必要がある。この講演では、金属触媒を用いた精密な重合によって、スマート先端材料ポリマーを「望み通りに美しく創る」方法と実例を紹介する。たとえば、特定の機能を果たす部分(機能基)を望み通りの位置(配列)にもつ星型ポリマー触媒、色素を安定に分散させる両親媒性ポリマーなどについて述べる。



【連絡先】〒615-8510 京都市西京区京都大学桂 京都大学大学院工学研究科高分子化学専攻  
電話: 075-383-2600; E-mail: sawamoto(at)star.polym.kyoto-u.ac.jp

## ハイライト 分子イメージングに有効なナノサイズの分子集合体

【日時】 12月15日(水) 午後2時30分～3時00分 【会場】 321B (Hawaii Convention Center)

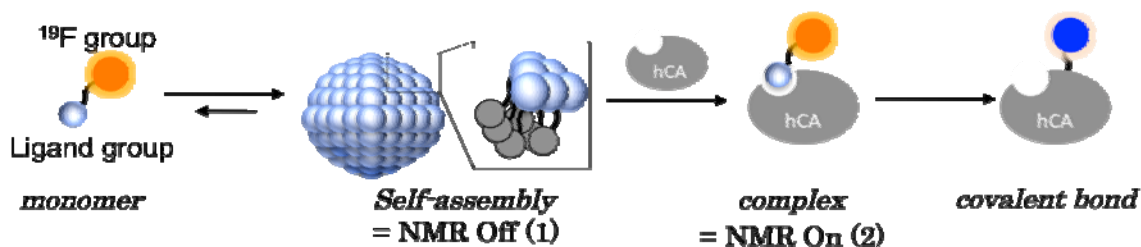
【講演番号】 106 口頭

### Self-assembled nano-probe for labeling and imaging endogenous protein in test tube and in live cell

細胞内在性の蛋白質をラベル化してイメージングする自己組織性のナノ分子集合体

発表者名：○浜地 格(所属) 京都大学 大学院工学研究科

我々のグループは、ひとりでに集合してナノメートルサイズの球状構造を形成する分子が、狙いをつけた特定のタンパク質にくっつくことで崩壊し、バラバラになることを偶然発見した。この性質を利用すると、特定の蛋白質だけに、選択的に目印(ラベル)をつけることができ、また、そのことによって特定のタンパク質を可視化/イメージングできることを、試験管実験だけでなく細胞実験でも実証した。これは今までにない新しいバイオイメージングの原理であり、生物個体内での蛋白質の目印付けや可視化を目指した分子材料開発を加速することが期待される。



ナノ分子集合体による蛋白質のイメージングとラベリングの模式図

[連絡先] 615-8510 京都市西京区京都大学桂 京都大学大学院工学研究科 浜地 格

電話：075-383-2754 (直通)、FAX：075-383-2759 電子メール [ihamachi\(at\)sbchem.kyoto-u.ac.jp](mailto:ihamachi(at)sbchem.kyoto-u.ac.jp)

## # 3-102 Molecular-Based Ordered Materials Formed Through Self-Organization

## 自己組織的に形成する秩序性分子材料の開発

【オーガナイザー】：加藤隆史（東京大学）、Colin Nuckolls (Columbia Univ.)、Douglas Gin (Colorado Univ.)、菊池裕嗣（九州大学）、Xuefeng Guo (Peking Univ.)、Matthew Francis (UC Berkeley)

【開催日】：12月18日（土）午後・夜、19日（日）午前・午後・夜、20日（月）午前

【会場】：口頭発表 321B (Convention Center)

ポスター発表 Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

分子の集合状態を制御し、組織化することは、先端技術が求める機能性材料を生み出すための有力な手法である。自己組織化構造が形成すると、電気的、光学的、化学的、生体的機能を新たに発現することが知られている。ナノ・マイクロメートルレベル、そして階層的なスケールにおける分子材料の自己組織化により、分子構造に基づいて制御された機能性材料—例えば、液晶やゲル、コロイド、無機/有機複合材料、分子結晶が得られる。ナノ・マイクロ相分離や、非共有結合性の相互作用による超分子の形成は、そのような機能性材料構築の鍵である。今回のシンポジウムでは、制御された分子集合構造に基づく機能性材料の構築について、最新のトピックスや新たな方向性を報告し、ディスカッションを行う。

ハイライト 生体超分子ポリマーの作製と機能について

【日時】12月18日（土）午後2時05分～2時30分 【会場】321B (Convention Center)

【講演番号】ID 861 口頭

## Cyclodextrin-Based Ordered Materials Through Self-Organization

シクロデキストリンを用いた規則構造体の自己組織化

○原田明（所属）大阪大学大学院理学研究科

糖が環状につながった分子、シクロデキストリンは環の内部に疎水的な空孔を有し、その環の大きさに応じた特定のサイズの分子を選択的に取り込む。このゲスト分子を包摂する特徴的な性質、またその低毒性ゆえに、シクロデキストリンは物理化学的な分野から医薬品や化粧品のような応用分野まで、幅広い研究が行われている。原田らは、シクロデキストリンを利用し、超分子ポリマー構造を作製し、多くの成果を上げてきた。今回は孔径の異なるシクロデキストリンポリマーと、ゲスト分子を側鎖に有するポリマーとの基質特異的な複合体形成について報告する。

【連絡先】原田明 E-mail: harada(at)chem.sci.osaka-u.ac.jp

ハイライト 分子秩序の制御による高機能有機デバイスの開発について

【日時】12月19日（日）午前7時45分～8時10分 【会場】321B (Convention Center)

【講演番号】ID 1081 口頭

## Organic Light-Emitting Devices Using Single Crystals

単結晶を用いた有機発光デバイスの開発

中野谷一、垣添勇人、○安達千波矢（所属）九州大学未来化学創造センター

有機半導体、有機発光デバイスの研究は、これまで主にアモルファス材料を用いて行われてきた。アモルファス材料は、作製が容易であるなどの利点があるが、電荷の移動は低速である。高速電荷輸送には分子秩序の制御が必要不可欠となる。安達らは究極のデバイス特性を目指し、単結晶を用いた材料作製を研究している。P5V4 (図 1) の単結晶を電界効果型トランジスタに用いることで、デバイス特性の向上に成功している。また、厚い単結晶膜を電化移動層に用いたダブルヘテロ構造をもつ有機発光ダイオードを作製し、単結晶中の高い電荷移動性により、非常に低い電圧で駆動することを示した。

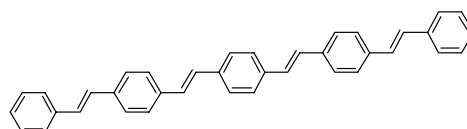


図 1. P5V4 の分子構造

【連絡先】安達千波矢 E-mail: adachi(at)ctsf.kyushu-u.ac.jp

## #127 Polymer Nano-Hybrids at Bio-Interfaces

## 高分子ナノハイブリッドの生体材料への展開

【オーガナイザー】：中條善樹（京大） | Kenneth J. Wynne (Virginia Commonwealth Univ) | Kathryn Uhrich (Rutgers Univ) | Chang-Sik Ha (Pusan National Univ)  
 【開催日】：12月17日（金）午前・午後、18日（土）午前  
 【会場】：口頭発表 327 (Convention Center)  
 ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

本シンポジウムは、プラスチックの原料である有機高分子と、金属や鉱物、骨や歯などの原料である無機材料を分子レベルで融合させたナノハイブリッド材料を用い、特に生体医療分野への応用展開を図り成果を挙げている研究者が一同に介して開催される。例えば、原子数百個が集まって構成されるナノ微粒子は原子とも巨視的な金属とも異なる性質を示したり、ガラスの主成分であるシリカは微細構造により特異な科学的性質を示すようになる。ナノハイブリッド材料を用いると、これらの小分子でもマクロの材料でも得られないナノ材料特有の性質を、生体材料として応用することができる。これらの成果は、今まで直接視ることが困難であった生体現象を検出することや、薬物を細胞レベルで配送するシステム、さらには薬剤自身に環境や状況に応じた薬効発現を行わせることなど、インテリジェントな薬剤分子や次世代医療技術の創出へとつながる。本シンポジウムでは、元々、高分子・無機・ナノ構造・生体材料など各々の分野において著名な業績を有しつつも、異分野との融合を試み、実際に業績を上げつつある研究者達が最新の成果について発表を行う。

## ハイライト 高感度の機能性 MRI 造影剤を開発

【日時】12月18日（土）午前8時10分～8時35分 【会場】327 (Convention Center)  
 【講演番号】ID 705 口頭

Construction of MRI contrast agents using nanobuilding blocks, dendrimers, polymers, and nanoparticles, for the quantitative analysis of biological events

定量的に生体反応を追跡するための高分子材料を基盤とした機能性 MRI 造影剤の開発

○田中一生、中條善樹（所属）京都大学 大学院工学研究科

MRI は体にダメージを与えることなく、体内の様子を画像化することができる。さらに、MR 画像において影を作り出す造影剤という物質を用いることで、例えば血管や特定の臓器、さらには病変部位のみを鮮明に画像化することができる。本発表では、MRI 造影剤の高感度化と共に、生体反応を画像化するための機能性造影剤の開発について述べる。特に、 dendrimer や微粒子等の高分子ナノ材料の特性を活かした MRI 造影剤の作成について、最近の成果を紹介している。

まず、Gd を含む陽性造影剤の高感度化に取り組んだ。耐熱性プラスチックで用いられている物質を MRI 造影剤に適用することで、既存の市販品と比べ 100 倍高感度 の造影剤を得ることができた。(図 1) 次に、重金属元素を使わない造影剤を作成することを目指した。フッ素を持つ物質とナノ微粒子を用いることで、酵素反応や環境変化を検出する造影剤を作成することができた。以上の成果は特に癌の早期診断に役立つと考えられる。発表ではこれらの造影剤の分子設計指針と得られた結果について報告する。

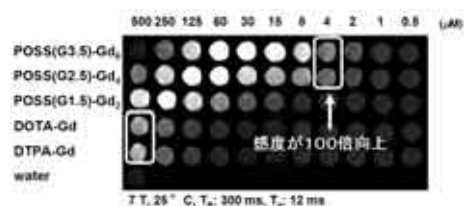


図 1. 新規造影剤の MRI 画像.

【連絡先】615-8510 京都市西京区京都大学桂 京都大学大学院工学研究科高分子化学専攻  
 電話 075-383-2608, E-mail: kazuol23(at)chujou.synchem.kyoto-u.ac.jp



## #136 Synthesis, Structure, and Physical Properties of Advanced Polymer Gels

## 先端的高分子ゲルの合成、構造、物性

【オーガナイザー】：伊藤耕三（東大） | 柴山充弘（東大） | Ron Siegel（University of Minnesota） | Chi Wu（Chinese University of Hong Kong）

【開催日】：12月17日（金）午前・午後、18日（土）午前・午後

【会場】：口頭発表 321B (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

高分子ゲルは、液体を含んだ網目状の高分子であり、私たちの体を構成しているだけでなく、食品、医療品、工業製品などに幅広く利用されている。たとえば、寒天やゼラチン、ソフトコンタクトレンズや高吸水性樹脂、ドラッグデリバリーシステムなどが代表的な例である。本シンポジウムでは、最近目覚ましい進展が見られるゲルの分野の世界的な第一人者が集結し、最新の成果を発表する。

## ハイライト 生体分子を感知するゼリー

【日時】12月18日（土）午前11時～11時30分 【会場】321B (Convention Center)

【講演番号】ID 685 口頭

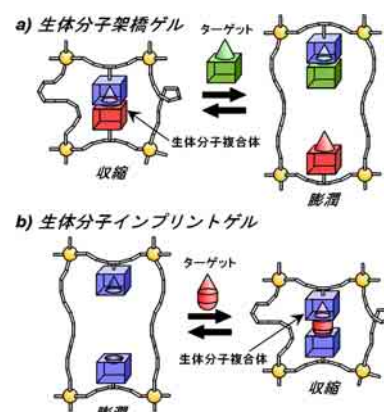
## Bioconjugated hydrogels that respond to a target biomolecule

ターゲット生体分子に対応するバイオコンジュゲートゲル

○宮田隆志（所属）関西大学 化学生命工学部

外部環境変化に応じて膨潤収縮するゲルは刺激応答性ゲルやスマートゲルとよばれ、DDSやセンサーシステムなどへの応用が期待されている。我々は、医療用スマートゲルを開発するために、身体の異常などを示す生体分子をシグナル刺激とする生体分子応答性ゲルの合成を試みてきた。その重要な合成戦略は生体分子複合体をゲルネットワーク可逆的架橋点として利用することであり、大別して二種類の生体分子応答性ゲルを合成してきた。その一つは予め生体分子複合体をゲルネットワークに結合させた“生体分子架橋ゲル”であり、もう一つはターゲット生体分子と相互作用するリガンドを最適に配置した“生体分子インプリントゲル”である（図1）。例えば、DNAをターゲットとした生体分子架橋ゲルはDNA配列を厳密に認識して膨潤し、逆に生体分子インプリントゲルは次第に収縮した。この他、抗原や腫瘍マーカーなどに応答するスマートゲルも合成し、微粒子や薄膜、マイクロ流路バルブへの応用も検討した。このような生体分子応答性ゲルをDDSや診断、イメージングなどに利用することにより、従来の診断や治療に代わる新しい医用システムを構築することが可能になると期待できる。

【連絡先】宮田隆志 E-mail: tmiyata(at)kansai-u.ac.jp



## ハイライト 物質透過のオンオフ特性を示すゲル膜

【日時】12月17日（金）午前7時45分～8時15分 【会場】321B (Convention Center)

【講演番号】ID 311 口頭

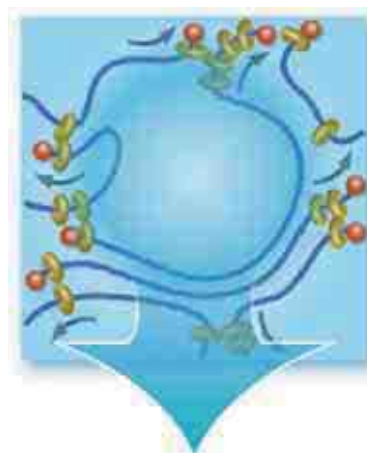
## Movable Cross-links Produce Novel Features in Hyperelasticity and Fluid Permeability of Polymer Gels

可動な架橋点が生むゲルの特異的な超弾性挙動と液体透過特性

○浦山 健治（所属）京都大学大学院工学研究科材料化学専攻

環動ゲルは超弾性（ゴム弾性）を示し、様々な変形様式での応力とひずみの関係は、網目鎖の絡み合い相互作用がない単純な理想気体モデルに近いことがわかった。従来ゲルの挙動は同モデルから著しく逸脱することが知られており、この結果は理想気体的な弾性挙動が観察された初めての例である。加えた変形に応答して移動する架橋点は、鎖の絡み合い相互作用をほとんど消失させるのかもしれない。従来ゲル膜を透過する液体の流量は、加えた圧力に単純に比例する。環動ゲル膜の透過流量は、低圧力では非常に小さいがある圧力に達すると急激に増加する特異的な挙動を示した。環動ゲル膜は、圧力によって液体の透過流量をオンオフ制御できる機能をもつといえる。ある圧力で架橋点や未架橋環状分子の移動が生じ、網目サイズや網目-溶媒間の摩擦係数が大きく変化すると考えられる。本研究の成果は架橋点の可動性が創出するゲルの物性と機能を明らかにしたものであり、ゲル材料の研究開発の指針として大きな意義をもつ。

【連絡先】浦山 健治 E-mail: urayama(at)rheogate.polym.kyoto-u.ac.jp





## #152 Nano Structure and Function of Organic-Inorganic Hybrid Polymers 有機-無機ハイブリッド高分子のナノ構造と機能

【オーガナイザー】：松川公洋（大阪市工研）

【開催日】：12月18日（土）午前・午後、19日（日）午前・午後、20日（月）午前

【会場】：口頭発表 302AB (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

有機高分子は無機材料と比べて機械特性や熱安定性に劣り、逆に無機材料は加工性、分子設計容易性が悪い。これらトレードオフを克服する技術として有機高分子と無機成分をナノレベルで融合させた“有機-無機ハイブリッド”が創出された。しかし、分子・ナノ構造の設計自由度や機能安定性など、有機高分子と無機材料トレードオフとなる各々の優れた性能や機能を同時に高度なレベルで両立する材料創製は困難であり、有機-無機ハイブリッドの概念を超えるブレイクスルーが求められるようになってきている。このシンポジウムでは有機、無機に限定されることなく周期表の全元素を対象として、元素特有の性質を利用した分子設計・機能設計を行っている研究者がそれぞれの研究を発表し議論を深めることで、有機-無機ハイブリッドを超える未来材料への展開を期待するものである。

ハイライト キラルな可溶性ラダー型ポリシルセスキオキサン

【日時】12月18日（土）午後3時45分～午後4時

【会場】302AB (Convention Center)

【講演番号】ID 903 口頭

Preparation of ladder-like polysilsesquioxanes forming chiral conformations and hexagonal stacking structures

キラル基含有ラダー型ポリシルセスキオキサンの創製とナノ構造制御

○金子 芳郎（所属）鹿児島大院理工

ポリシルセスキオキサン (PSQ) は、Si-O 結合由来の熱的・力学的・化学的安定性に加えて、有機置換基の存在により有機材料との相溶性に優れるなどの特徴を有することから、有機-無機ハイブリッド材料の分野を中心に注目されている。しかし、PSQ は三官能性有機シランモノマーの重縮合により合成されるため、通常、不規則な三次元ネットワーク構造が形成され不溶性の材料が得られやすい。金子らは、アミノ基含有オルガノトリアルコキシシランの強酸水溶液中での重縮合を行うことで、ヘキサゴナル相に積層するロッド状のPSQ が得られることを見出し、この水溶性アミノ基含有ラダー型PSQ に対してキラル基の導入反応を行うことで、有機溶媒に可溶性キラル基含有ラダー型PSQ が作成することを見出した。

【連絡先】 E-mail: ykaneko(at)eng.kagoshima-u.ac.jp

ハイライト 優れたイオン伝導性を示す有機ホウ素イオンゲルの開発

【日時】12月19日（日）午後3時30分～午後3時45分

【会場】327 (Convention Center)

【講演番号】ID 1215 口頭

Design of organoboron ion gels and their ion conductive properties

有機ホウ素イオンゲルの設計とそのイオン伝導性

○松見紀佳（所属）名大院生命農

近年、環境対応自動車の燃費改善による温暖化ガス排出削減等の観点から、リチウムイオン2次電池の開発競争が熱を帯びている。従来型のニッケル水素電池と比較して2倍から3倍のエネルギー密度を有するリチウムイオン2次電池であるが、数年前に頻発した電池のリコール問題に象徴されるように安全面の課題解決が普及拡大への鍵となっている。そのためのアプローチとして、安全志向のセパレータの開発や制御系の技術による安全管理が図られているが、電解質開発の立場において望まれるのは燃えない電解質の開発である。松見らは1-ブチル-3-メチルイミダゾリウムクロリド中でセルロースとボラン・テトラヒドロフラン錯体を反応させることにより、3級ホウ素を有する新たな有機ホウ素系イオンゲル電解質の合成に成功した。得られたイオンゲルはいずれも $10^{-3} \sim 10^{-4} \text{ Scm}^{-1}$ オーダーのイオン伝導度を示し、イオン液体自身に匹敵する値を示した。

【連絡先】 E-mail: matsumi(at)agr.nagoya-u.ac.jp

**#03-219 Radical Polymerization Kinetics and Mechanisms****ラジカル重合の反応速度論とメカニズム**

【オーガナイザー】: Greg Russel (University of Canterbury, New Zealand) | 後藤淳 (京大) | Robin Hutchinson (Queen's University, Canada) | Graem Moad (CSIRO, Australia) | Per Zetterlund (University of New South Wales, Australia)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 323A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

**展 望**

ラジカル重合は、操作が簡便で、多彩なモノマーに適用できるため、学際的にも実際的にも幅広く利用されている有用な高分子合成法である。工業的には、世界の高分子の約半数がラジカル重合によって生産されている。本シンポジウムでは、ラジカル重合の反応速度論とメカニズムに関する研究成果が会する。(1) 均一系の通常のラジカル重合、(2) 乳化重合等の不均一系の通常のラジカル重合、および(3) 近年登場した制御ラジカル重合/リビングラジカル重合をテーマとして含む。ラジカル重合は、主要で、重要で、活発な研究分野である。その工業プロセス化や、ラジカル重合による新しい高分子材料の着実な創製には、ラジカル重合の反応速度論的詳細や反応機構の理解が不可欠である。本シンポジウムでは、学際ならびに産業界からの講演をお招きする。

**ハイライト** ラジカル重合の反応のしくみに迫る

【日時】12月19日(日) 午前7時50分~8時30分 【会場】323A (Convention Center)

【講演番号】ID 1064 口頭

**Notes on Kinetics of Conventional and Controlled/Living Radical Polymerizations**

通常のラジカル重合および制御/リビングラジカル重合の反応速度論的研究

○福田猛 (所属) 京都大学 化学研究所

ラジカル重合の反応速度論に関する幾つかの問題が概説される。(1) 二種類のモノマーからなるラジカル共重合の速度式、(2) 分子量や分子量分布を制御できる制御/リビングラジカル重合の速度式、および(3) 停止速度定数の定義等が含まれる。第一に、共重合において、その成長過程に、成長ラジカルの末端ユニットのみならず、その前末端ユニットが寄与する「前末端基効果」が、例外的でなく一般的に成立することが確立されている。一連の実験で、前末端基効果が、停止過程にも驚くほどよく成立することを明らかとなった。第二に、ラジカル重合では、ラジカル濃度の定常状態が、最も重要な反応速度論的概念の一つである。通常のラジカル重合では、この概念に基づき、シンプルでよく知られた重合速度式が導出されている。制御/リビングラジカル重合においても、同様に、ラジカル濃度の定常概念は本質的に重要で、この概念に基づき、すべての制御/リビングラジカル重合系に適用できる体系的な速度式が導かれた。第三に、停止速度定数の定義について、その整合性について議論される。

【連絡先】611-0011 京都府宇治市五ヶ庄 京都大学化学研究所

## #03-231 Amphiphilic Polymers: Fundamentals and Applications

## 両親媒性高分子 — 基礎から応用まで

【オーガナイザー】：佐藤尚弘（大阪大） | 秋吉一成（京都大） | Françoise Winnik (Univ. Montreal) | Charles McCormick (Univ. Southern Mississippi)

【開催日】：12月17日（金）午前・午後、18日（土）午前・晩

【会場】：口頭発表 Room 325B/308A (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

高分子材料の新しい応用をめざして、様々な新規高分子が合成されている。その中で、1本の高分子鎖に親水性部位と疎水性部位をあわせもつ両親媒性高分子は、生体高分子との類似性からもわかるように、特に水溶液中で様々な機能性を発揮する高分子として注目されている。親水性部位と疎水性部位の種類を変えたり、高分子鎖中での配列様式を変えることにより非常に多様な両親媒性高分子が合成できるが、合成された両親媒性高分子は水溶液中（あるいは有機溶媒中）で様々な構造の自己集合体を形成する。そして、その集合体構造が両親媒性高分子の機能や物性に著しい影響を与えるため、高分子の化学構造の分子設計とともに高次構造の制御も、その応用上重要な課題となっている。しかしながら、その化学構造と集合体構造の多様性・複雑性のために、両親媒性高分子の基礎的な理解はいまだに十分ではない。そしてそのために、両親媒性高分子の応用において経験と勘に頼らざるを得ない状況が続いている。本シンポジウムは、両親媒性高分子の基礎から応用までの広い範囲の研究者が一堂に会し、この現状の問題点を改善すべく企画された。

ハイライト 両親媒性高分子の抗菌剤への応用

【日時】12月17日（金）午後1時40分～2時10分 【会場】325B (Convention Center)

【講演番号】ID 516 口頭

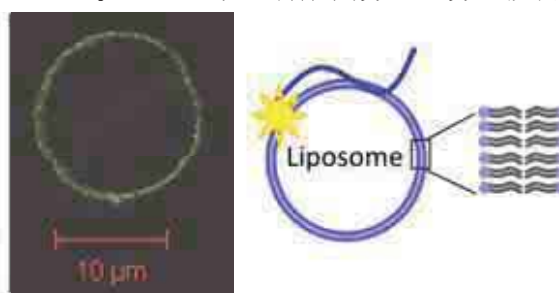
## Design of Amphiphilic Polymers as Antimicrobial Agents

抗菌性の両親媒性高分子の設計

○黒田賢一（所属）ミシガン大学歯学部

耐性菌の出現は、我々の健康を脅かす脅威であり、新しい抗菌剤の開発は人類にとっての急務である。本講演では、両親媒性の合成高分子を細菌の耐性機構が働かない新しい抗菌剤として利用することをめざした最新の研究が紹介される。そのような合成高分子の分子設計には、細菌の細胞膜に作用して死滅させる天然のカチオン性（正の電荷を有する）両親媒性ペプチドが参考にされている。具体的には、カチオン性のアンモニウム基と疎水性のアルキル基を共有するメタクリレート系の比較的分子量のランダム共重合体（2種類のユニットがランダムに重合反応してできる高分子）が合成され、多種類の細菌に対する

抗菌性と人間の赤血球や上皮細胞に対する低毒性が実証された。右の図には、バクテリア細胞膜を模倣した巨大単層ベシクル表面へのそのような高分子鎖の吸着を示している。この共重合体には規則的なモノマー連鎖様式や水溶液中での高次構造形成能は認められず、そのことから天然ペプチドの抗菌作用においても、 $\alpha$ らせんや $\beta$ シートなどの二次構造が重要ではないことが示唆された。抗菌性ペプチドと比較して、両親媒性の合成高分子は安価でかつ様々な化学修飾が可能であり、抗菌剤としての応用上の有利さを有している。



A fluorescent dye-labeled polymer bound to Giant Unilamellar Vesicle (GUV) (POPC/POPG (1:1))

【連絡先】黒田賢一 E-mail: kkuroda(at)umich.edu

### #3- 257 Frontiers of Precisely Controlled Polymer Synthesis: Fine Control of Polymerization Reaction and Impact on Advanced Material Designs

精密制御高分子合成の最前線—重合反応の精密制御と先端高分子材料設計

【オーガナイザー】：北山辰樹(大阪大), Judit Puskas (The University of Akron),

Graeme Moad (CSIRO, Australia), 青島真人 (大阪大), 上垣外正巳 (名古屋大)

【開催日】：12月18日(土)午後・夕方、19日(日)午前・午後、20日(月)午前

【会場】：口頭発表 313A(18日午後), 323C(18日夕方), 322AB(19-20) (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

#### 展 望

20世紀後半から今世紀にかけての重合化学の目覚ましい進展は、ラジカル反応を含む広範な反応機構による”リビング重合”を実現した。これによって、高分子の分子量、分子量分布、立体構造、末端構造、連鎖構造、分岐・櫛形・星形・環状などの鎖構造などを従来にも増して精密に制御して合成することが可能になり、先端的高分子材料の設計の自由度を格段に高めている。特にここ10年ほどは、いわゆる”リビングラジカル重合”の発展と普及によって、ブロックコポリマーや末端反応性ポリマーをはじめとする高機能高分子の合成が一般化しており、今回も関連するいくつかのシンポジウムが企画されている。本シンポジウムでは、リビングラジカル重合に限らず、アニオン重合、カチオン重合、配位重合、メタセシス重合等の連鎖重合、重縮合、縮合反応による連鎖重合(連鎖縮合重合)に関する研究を広くカバーし、重合反応の基礎から高分子材料設計までを見通せるプログラムを企画した。また、大学関係の研究者の発表に加え、重合反応の精密制御がもたらす outcome を示す事例として、企業における末端反応性ポリマーやブロックコポリマーの実用化研究を招待発表に含めた。

ハイライト1 連鎖縮合重合による芳香族ポリアミドの構造制御

【日時】12月19日(日)午後2時40分～3時10分 【会場】322AB (Convention Center)

【講演番号】ID 1189 口頭

Synthesis and properties of poly(*m*-benzamide) architecture

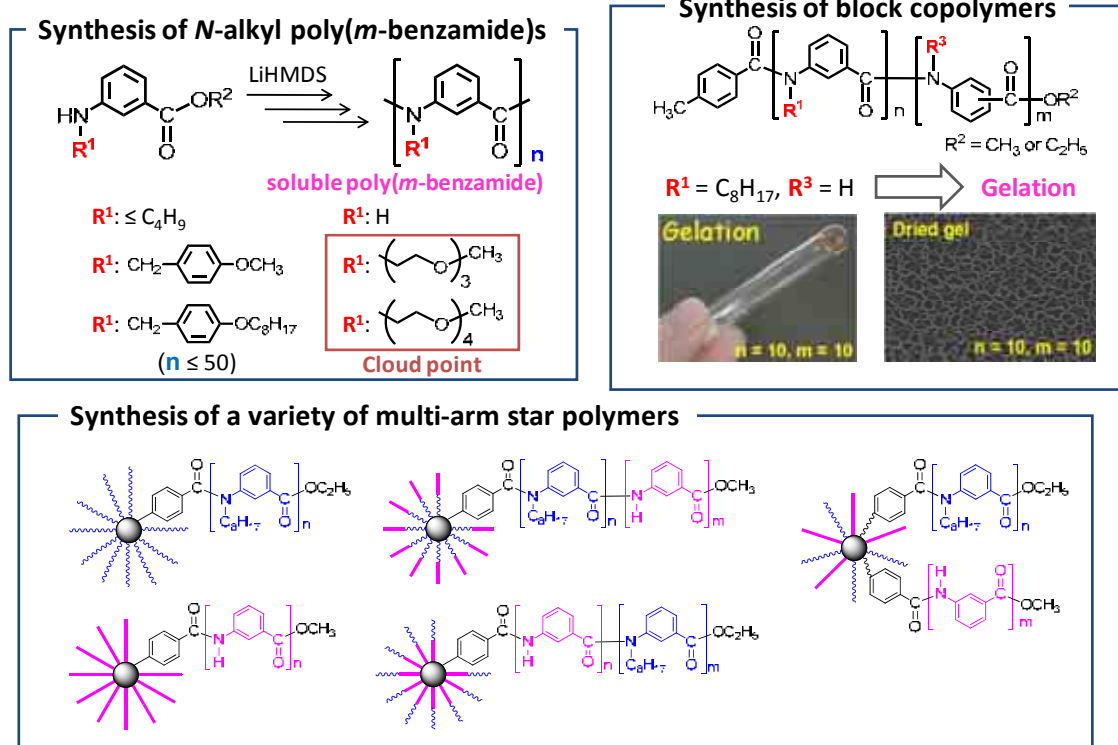
ポリ(*m*-ベンズアミド)の構造制御合成とその特性

○横澤 勉、大石智之、横山明弘(神奈川大学)

[yokozt01\(at\)kanagawa-u.ac.jp](mailto:yokozt01(at)kanagawa-u.ac.jp)

ブロック共重合体やスターポリマーなどの種々の高分子アーキテクチャーを合成するにはリビング重合は不可欠な重合法である。しかし、芳香族系高分子が合成できる縮合重合は、付加重合のように重合活性種を伝播できない逐次重合機構で進行するため本質的にリビング重合は不可能と思われてきた。しかし、芳香環を持つ縮合系モノマーには反応性基AとBが互いに置換基効果を及ぼし、Aが他のモノマーと反応することによってBに及ぼす置換基効果に変化して次のモノマーはこの末端Bに優先的に反応するものがある。これらのモノマーの縮合重合は逐次重合ではなく、連鎖重合で進行してリビング重合と同様に分子量の制御された分子量分布の狭い縮合系高分子を与える。我々は共鳴効果が活用できるパラ置換モノマーの重合で連鎖縮合重合を達成し、種々のアーキテクチャーを合成してきた。本発表では誘起効果の変化に基づくメタ置換モノマーの連鎖縮合重合とそれを活用したアーキテクチャーの合成について述べる。





ハイライト2 アニオン重合による全アクリルエラストマーの工業化

【日時】12月19日(日)午後0時30分~1時 【会場】322AB (Convention Center)

【講演番号】ID 1183 口頭

Studies of living anionic polymerization of (meth)acrylates in the presence of di-phenoxy alkylaluminum

ジフェノキシアルキルアルミニウム存在下での(メタ)アクリル酸エステルのリビングアニオン重合に関する研究

○濱田健一; 森下義弘; 栗原豊明; A. H. Mueller、(株)クラレ、Univ. Bayreuth

[Kenichi\\_Hamada\(at\)kuraray.co.jp](mailto:Kenichi_Hamada(at)kuraray.co.jp)

アニオン重合の工業規模での実施例にはスチレン—ジエン系ブロックポリマーの生産が知られている。アクリル系モノマーのアニオン重合は古くから研究され、リビング重合の可能な系も知られているが、低温での反応が要求されるなど制約が大きく、工業的規模での実用化例はこれまでなかった。本発表者らは、アルキルリチウム開始剤に嵩高いアルミニウム化合物を添加することによって、メタクリル酸メチル (MMA) とアクリル酸ブチル (BA) のトリブロックコポリマーをアニオンリビング重合で合成する技術の開発に成功し、製品の上市に向けて量産化に着手している。アクリルガラス (ポリ MMA) の高い軟化点をもつブロックとアクリルゴム (ポリ BA) の柔らかさをもつブロックからなるこのブロックコポリマーは、アクリル樹脂特有の透明性、耐候性、接着性、柔軟性に優れた熱可塑性エラストマーの特性を示す。本講演では、この合成反応の基盤となるアルミニウム化合物存在下での重合挙動を速度論研究等をもとに明らかにし、工業規模で実施可能な $-10^{\circ}C$ でもリビング性が発揮される重合系を確立した経緯が発表される。



## # 14 Cooperative Catalysis

【オーガナイザー】: 魚住泰広 (分子研) | Rick Danheiser | Kuiling Ding | Atsushi Nishida

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後、18日(土) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Sea Pearl I/II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II (Convention Center)

## 展 望

分子の構造変換を自在に司る化学合成触媒の開発は、基礎研究から実践的化学合成プロセスへの展開にいたるあらゆる研究ステージにおける中心課題の一つである。今日、これら触媒の単独の機能を精密化・高機能化する旧来の研究から、例えば「酸と塩基」「固有の性質を持つ複数の金属」「反応を実施する媒体と触媒」など複数の機能が共同作業的に働くことで従来では実現できなかった分子変換を達成する「Cooperative Catalysis (共同作用触媒)」の開発研究が新しい潮流を生み出しつつある。本シンポジウムでは Cooperative Catalysis の概念に立脚した精緻かつ効率的な化学合成触媒の分子設計、触媒調製、反応システム開発、不斉触媒反応への適用、さらに医薬や材料などの合成プロセスへの展開について集中的・総合的に議論する。

## ハイライト Cooperative Catalysis (共同作用触媒)

【日時】12月18日(土) 午後3時30分~4時20分 【会場】Sea Pearl I/II (Hilton)

【講演番号】ID 1308. 口頭

## Recent Progress in Asymmetric Cooperative Catalysis

不斉共同作用触媒の進歩

○ 柴崎正勝 (所属) 微生物化学研究所

「Cooperative Catalysis (共同作用触媒)」の概念に立脚した分子性不斉触媒の設計・開発について概観するとともに、最新の成果を紹介します。

たとえば電子を与える性質 (ルイス塩基性) の分子を「酸と塩基が同時に働く共同作用触媒システム」によって活性化する仕組みを紹介します。すなわちアリルシアニドやチオアミドを酸・塩基共同作用触媒と反応させると、触媒の酸部分がこれら分子の電子を引き入れて特定の炭素-水素結合を切れやすくします。続いてその炭素-水素結合を触媒の塩基部分で切断する、という二重の活性化 (共同作用) によって炭素上にマイナスの性質を持たせることができます。この活性化を経てアリルシアニドやチオアミドの C=O や C=N 結合への付加反応が触媒的に進行します。このとき、予め触媒に不斉環境を巧みに導入しておけば、これら付加反応は高い立体選択性をもって触媒的に進行します。また希土類元素であるネオジミウムとナトリウムから設計された複合金属触媒を用いたニトロアルドール反応についても言及します。紹介する一連の反応は付加型の反応であり、出発原料分子に含まれる1つの原子も無駄にしない原子効率 100%の反応です。

【連絡先】 [mshibasa\(at\)bikaken.or.jp](mailto:mshibasa@bikaken.or.jp)



**#4-18 C-H Functionalization, Memorial Symposium for Professor Keith Fagnou****C-H 変換化学シンポジウム**

【オーガナイザー】: Helene Lebel (Universite de Montreal) | 伊丹健一郎 (名古屋大) | Tom Driver (University of Illinois at Chicago)

【開催日】: 12月18日(土) 午後、19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 Coral IV (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

**展 望**

グリーンケミストリーの実践必要性が叫ばれる中、効率的かつ直接的な有機分子変換法の開拓は火急の課題である。特に、有機化合物に最も豊富に存在する炭素-水素 (C-H) 結合の直接的化学変換は、理想的な有機合成方法論の最たるもののひとつとして認識されている。このような「C-H 変換化学」は合成化学の新しい潮流として現在極めて大きな注目を集め、活発な研究が世界的に展開されているとともに、産業界からも多くの関心を集めるようになってきている。本シンポジウムでは、「C-H 結合の活性化・官能基化」の基礎・応用研究を推進する世界的トップランナーの研究者を結集し、最先端の研究成果の発信と将来の展望についての密な討論を行なう。なお、本シンポジウムは昨年秋 38 歳の若さで不運にもこの世を去った Keith Fagnou 教授 (University of Ottawa, Canada) の追悼シンポジウムでもある。Fagnou 教授は、彗星の如く現れ、独自の触媒の開発を通じて C-H 結合の活性化・官能基化に関わる難問を次々と解決してきた、まさに本分野の世界的リーダーであった。

**ハイライト C-H 結合活性化の最前線**

【日時】 12月19日(日) 午前10時35分~11時30分 【会場】 Coral IV (Hilton)

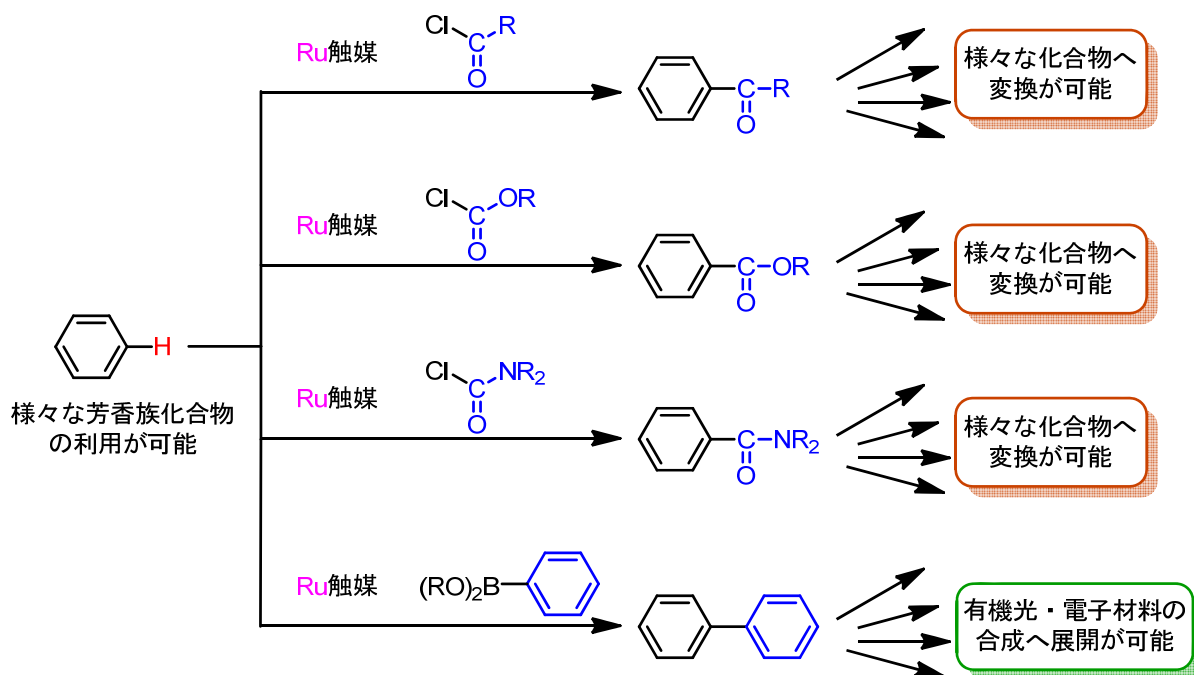
【講演番号】 ID 1737 口頭

**Ruthenium-catalyzed Regioselective Introduction of Carbonyl Functionality on Aromatic Ring via C-H bond Cleavage**

ルテニウム触媒による C-H 結合切断を経る芳香環上への位置選択的カルボニル基導入  
○垣内史敏 (所属) 慶應義塾大学 理工学部

人間がより良く、快適に生活するために、身の回りには様々な衣料品、電気製品、医薬品など人間が作った物が豊富にあります。それらの中に有機化合物を利用して作った物が多くあります。利用目的に合った有機化合物を合成するために、様々な反応が開発されてきました。中でもファインケミカルズの合成には、1980-1990年代に精力的に研究されたクロスカップリング反応が多用され、この素晴らしい反応の恩恵で多岐にわたる化合物を効率的に合成できるようになりました。

21世紀に入り、反応工程の削減と化学廃棄物の削減を可能にする変換反応の一つである炭素-水素結合を利用した触媒的官能基導入反応が注目され、有機合成化学分野で現在活発に研究が行われています。この反応は、予め高反応性の置換基を原料に導入しておく必要が無い等の特長を有しています。本講演では、炭素-水素結合を利用した炭素-炭素結合生成反応の中でも、有機合成において重要度が高いケトンやエステル、アミドなどの極性炭素官能基の導入を可能にした新規触媒反応の開発に関する研究成果と、有機光・電子材料への利用が期待されている縮合多環式芳香族化合物を、炭素-水素結合の炭素-炭素結合への変換を利用して合成する新手法の開発についての研究成果を紹介する予定です。



【連絡先】 223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1 慶應義塾大学理工学部化学科  
 電話 045-566-1591, E-mail: kakiuchi(at)chem.keio.ac.jp

## # 4-29 Designed pi-Electronic Systems: Synthesis, Properties, Theory and Function

### パイ電子系化合物の自在デザイン — 理論から合成、物性、機能まで

【オーガナイザー】: Michael M. Haley (Univ Oregon) | 久保孝史 (阪大) | Graham Bodwell | 戸部義人 (阪大)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後・夜、17日(金)

【会場】: 口頭発表: South Pacific II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

有機発光ダイオードや有機薄膜太陽電池のような先端機能性有機材料は、「動きやすい電子」をもったパイ電子系化合物からできている。本シンポジウムでは、「動きやすい電子」をもつパイ電子系化合物の構造や電子の状態を自在にデザインし、新たな合成法を駆使することにより未知の化合物を合成するとともに、その化合物自体や集合体としての新奇物性ならびに将来的に利用しうる機能について研究を行った成果について発表と討論を行う。

### ハイライト 芳香族性とトポロジー

【日時】 12月15日(水) 午後1時10分~1時50分 【会場】 South Pacific II (Hilton)

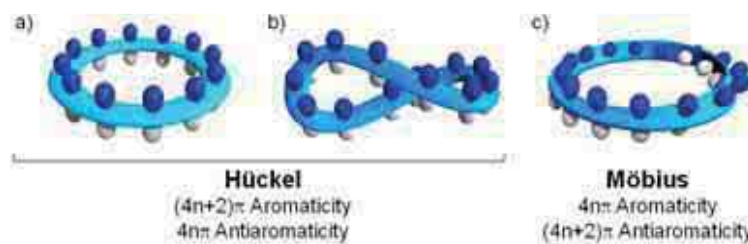
【講演番号】 ID 93 口頭

#### Möbius Aromaticity in Expanded Porphyrins

メビウス芳香族環拡張ポルフィリン

○大須賀篤弘 (京都大学 大学院理学研究科)

通常芳香族化合物では、ある p 軌道が  $\pi$  共役系に沿って一周したときに元と同じ位相の p 軌道へと戻ってくる (下図 a)。8 の字型にねじれた構造であっても同様のトポロジーをとることができる (下図 b)。このような  $\pi$  共役系の広がり方をヒュッケルトポロロジーと分類し、 $(4n+2)\pi$  共役系で芳香族性を発現する (ヒュッケル則)。これに対し、ある p 軌道が元とは逆の位相へと戻ってくる環状共役系をメビウストポロジーと言い (下図 c)、 $4n\pi$  共役系で芳香族性を示すことが理論的に予測されていた (メビウス芳香族性)。しかし、滑らかに連なりかつ捻じれた  $\pi$  共役構造をもつこのような電子系は、合成上の困難から近年にいたるまで存在しなかった。最近発見したメビウス芳香族性環拡張ポルフィリンについて、芳香族性とトポロジーの概念に着目して議論する。



【連絡先】 大須賀篤弘、E-mail: Osuka(at)kuchem.kyoto-u.ac.jp

### ハイライト 開殻パイ電子系化合物の物性機能開発

【日時】 12月15日(水) 午後3時30分~4時10分 【会場】 South Pacific II (Hilton)

【講演番号】 ID 98 口頭

#### Stable High-Spin Molecules in Materials Science

安定高スピン種を用いる物性機能開発

○岡田恵次、鈴木修一、小寄正敏 (大阪市立大学 大学院理学研究科)

通常有機化合物は反磁性であるが、ラジカルやラジカルイオン種は常磁性を示すものが多い。常磁性はスピン間に磁氣的相互作用のない状態であり磁石の性質は示さないが、これらをうまく組み合わせ固体中の配列を制御し磁氣的相互作用をもたせることにより、磁石の性質を付与することができる。ここではラジカル、ラジカルイオン種、磁性金属のスピン等を用いて磁性体を得るための試みを紹介する。また、高スピン種の応用的課題として、スピンサイエンスの知見を活用した高効率で長寿命の三重項光電荷分離状態を発生させる試みについても紹介する。

【連絡先】 岡田恵次、E-mail: okadak(at)sci.osaka-cu.ac.jp



## # 45 Chemistry of Novel Nanocarbons – Fullerenes, Carbon Nanotubes and Related Materials

### 新奇ナノカーボンの化学

【オーガナイザー】：赤坂 健 (筑波大) | Fred Wudl (UC Santa Barbara) | Yuliang Li (Chinese Aca. Sci.)

【開催日】：12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後・夕方、17日(金) 午前

【会場】：口頭発表 Iolani I/II (Hilton)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

1996年ノーベル化学賞受賞のフラーレンやナノチューブ、そして本年2010年ノーベル物理学賞受賞のナノグラフェン等を代表とするナノカーボンは、その発見以来多くの基礎研究が行われ、電気を流しやすい性質、あるいはシリコンのような半導体の性質など、様々な物理的かつ化学的特性を有することが分かって来ています。近年では応用研究も盛んに行われています。材料などへの応用を幅広く実現するためには、これらナノカーボンの化学研究が非常に重要です。本年2010年ノーベル化学賞受賞のカップリング反応に代表されるように、化学反応によってナノカーボン物質を無限と言って過言でない多彩な機能性を有した新たな物質に化学変換させることができます。本シンポジウムでは、有機化学、無機化学、物理化学、理論化学、さらには材料化学など、様々な観点からナノカーボンの化学研究を行っている研究者が一同に会し、研究成果ならびに現在の研究状況について発表し、さらに議論を深め、ナノカーボン化学の進展を図ります。

### ハイライト 最短カーボンナノチューブ

【日時】12月15日(水) 午前10時15分～10時45分 【会場】Iolani I/II (Hilton)

【講演番号】ID 16 口頭

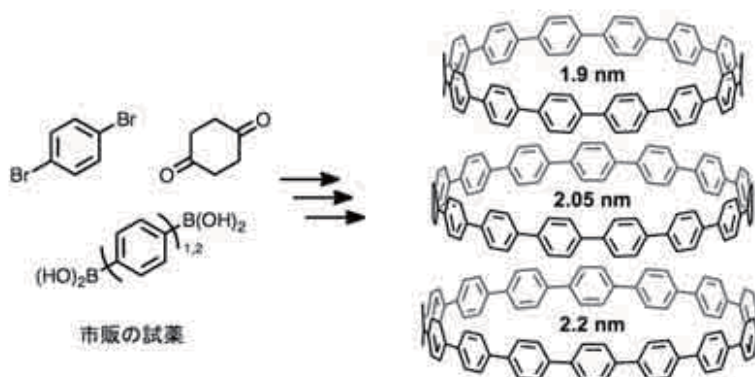
### Metal catalysis for nanocarbon chemistry

金属触媒が拓くナノカーボン化学

○伊丹健一郎 (所属) 名古屋大学大学院理学研究科

カーボンナノチューブ (CNT) は、間違いなく次世代マテリアルズサイエンスの主演となる物質です。これまで CNT は、物理的手法によって合成されてきましたが、これら既存の手法には、様々な構造の CNT が混合物という形でしか得られないという本質的な欠点が依然として残っています。構造が明確に定まった「純正 CNT」を手にするには、今後のナノカーボン研究を分子科学的に発展・深化させるために必要不可欠であり、この分野における究極の課題のひとつとされています。

名古屋大学の伊丹健一郎教授らは、「最短カーボンナノチューブ」であるシクロパラフェニレンを狙った直径で自在に作り分ける革新的手法の開発に世界で初めて成功しました。まさに「分子レゴ」ともいえるべき有機合成化学の技によってなされた成果です。現在ナノカーボン科学・マテリアルズサイエンスの起爆剤として大きな脚光を浴びているシクロパラフェニレン類を自在に合成する技術の登場は、「純正 CNT」の完全化学合成に向けた第一歩として、関連分野に大きなインパクトを与えるものです。



狙った直径の最短カーボンナノチューブを作り分け

【連絡先】伊丹健一郎 E-mail: itami(at)chem.nagoya-u.ac.jp



## # 4-47 New Directions of Supramolecular Chemistry toward Nanomaterial Science, Biomedical Science, and Supramolecular Catalyst

### ナノマテリアル・バイオメディカル・触媒を指向する超分子化学の新機軸

【オーガナイザー】青木伸（東京理大） | 灰野岳晴（広島大） | J. T. Davis | W.-S. Chung

【開催日】：12月15日（水）午前・午後、16日（木）午前・午後、17日（金）

【会場】：口頭発表 South Pacific IV (Hilton)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

超分子化学は、分子集積によって、新機能をもつ三次元的構造を創出する科学である。本シンポジウムでは、ユニークな有機・物理・生物学的な性質をもつ分子集積系を取り上げ、超分子化学の新しい方向性を見出すことを目的とする。例えば、外部因子に応答するメタロ超分子、固相表面上の二次元的自己集積体、金属を三次元的に配列した dendrimer、自己集積ポリマー、超分子触媒・創薬・センサー・機械など様々な方面への広がりを展望する。

### ハイライト 2次元結晶工学

【日時】12月15日（水）午後3時30分～3時55分 【会場】South Pacific IV (Hilton)

【講演番号】ID 177 口頭

### Two-Dimensional Self-Assembly of Triangular Molecules on Surfaces via Alkyl Group Interdigitation: Dynamics and Control.

固液界面において三角形分子が形成する2次元分子集合体の制御と動的挙動

○戸部 義人（大阪大学大学院基礎工学研究科）

ボトムアップアプローチによる超微細加工の一つに、分子の自己集合による固体表面上の2次元ナノ構造（単層膜）形成（「2次元結晶工学」）がある。発表者らの目的は、適切に設計された有機分子による固体表面上での複雑な自己集合パターン形成とその動的機能の開発である。基板上的ナノ構造は主に走査型トンネル顕微鏡によって分子分解能（1 nm以下）で観察される。本講演では、幾何学的コア構造と長鎖アルキル基をもつ分子が固液界面で形成する自己集合体と、その空孔への動的異分子取り込みについて紹介する（右図はその例）。



【連絡先】戸部 義人、E-mail: tobe(at)chem.es.osaka-u.ac.jp

### ハイライト 協同的応答機能をもつメタロ超分子

【日時】12月16日（木）午後3時15分～3時40分

【会場】South Pacific IV (Hilton)

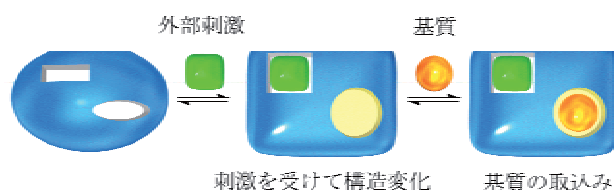
【講演番号】ID 337 口頭

### Design and Synthesis of Metallo-Supramolecular Systems with Cooperative and Responsive Functions

協同的あるいは応答的な機能をもつメタロ超分子の設計と合成

○鍋島 達弥（筑波大学大学院数理物質科学研究科）

生体内では外部刺激に機能が連動する「協同的」機能をもつ分子が、体内の物質バランスを調節するなど、精密な機能の発現に重要な役割を果たしている。発表者らはこの点に着目し、金属イオンや電子に応答する協同的機能をもつ分子のうち、同じ刺激であっても異なるイオンに対し正反対の親和力を示す分子、劇的で多段階の取り込み制御ができるアニオン捕捉分子など、発表者らが開発した一分子多機能性やマルチ応答性をもつ分子群を紹介する。



【連絡先】鍋島 達弥、E-mail: nabesima(at)chem.tsukuba.ac.jp

## # 4-80 Marine Natural Products: Isolation, Biology, Ecology, and Synthesis 海洋天然物、探索、生物・生態学、化学合成

【オーガナイザー】: Jon Rainier (U. Utah) | 村田道雄 (大阪大) | Ray Andersen (U. British Columbia)

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後、18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前

【会場】: 口頭発表 South Pacific IV (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

海洋天然物は、医薬品開発につながる天然資源として脚光を浴び続けている。また、この分野は我が国をはじめ、米国、カナダ、オーストラリアなど環太平洋の諸国が世界をリードしてきており、本国際会議では毎回のこの分野のシンポジウムが開催されている。

今回は、海洋天然物化学における最新の展開を、新しい化合物の発見、その化合物の薬としての効き目、また、化合物を効率的に合成して次なる応用につなげる研究成果を一堂に集め、多方面からの研究成果を聞けるシンポジウムにすることができた。我が国から14名におよぶ口頭講演者が参加することを見ても、国際的な貢献の高さが伺える。なかでも、早稲田大学・中尾洋一博士は、海洋天然物の医薬品としての利用価値を独自のアプローチで追求している気鋭の研究者であり、今回は、現在なお深刻な感染症であるマラリアなどの特効薬を海洋生物から探し出す研究について、最先端の成果を発表する予定である。

ハイライト Marine Natural Products: Isolation, Biology, Ecology, and Synthesis - Saturday (海洋天然物化学: 単離・生物学・環境学・合成)

【日時】12月18日(土) 午前8時30分~9時00分 【会場】South Pacific IV (Hilton)

【講演番号】ID1060 口頭

Antiprotozoan agents from marine invertebrates

海洋無脊椎動物からの抗原虫剤の探索

○中尾洋一、石上進太郎 (所属) 早稲田大学 理工学術院、後藤康之、河津信一郎 (所属) 帯広畜産大学 原虫病研究センター、松本芳嗣 (所属) 東京大学 大学院農学生命科学研究科

マラリア・トリパノソーマ・リーシュマニアなどに代表される原虫感染症は熱帯・亜熱帯地域で特に大きな問題となっており、世界中で年間数百万人が新たに感染している。我が国もODAやJICAなどの国際協力事業を通じて、これらの感染症が問題となっている国々との間で研究・教育・援助活動を精力的に行っており、その研究レベルも世界的に見ても非常に高い水準にある。にもかかわらず、いまだに特効薬が見いだせないものや、特効薬が存在してもすでに耐性原虫が生じているものなど、地球規模での環境変化による感染拡大に対する有効な対策が遅れているのが現状である。

一方、ユニークな構造や強い生物活性を有する化合物の宝庫であることが知られる海洋生物から新たな医薬品を探索しようとする海洋天然物化学の分野において、我が国の研究レベルは世界最高水準である。お互いに高い研究レベルを有する我が国の原虫感染症分野と海洋天然物化学分野の研究グループが連携すれば、世界的に見ても原虫感染症対策をリードすると期待されるが、その連携はあまり進んでいないのが現状である。

そこで、原虫感染症と海洋天然物化学の研究分野の連携を強め、今後の原虫感染症対策をより充実させるために、全国共同利用施設である帯広畜産大学原虫病研究センターとの共同研究を開始し新たな抗原虫剤の探索を行っている。この結果、海綿(カイメン)および腔腸(サンゴ類)などの海洋無脊椎動物から新たな抗原虫剤を見出してきた。特に、現状では特効薬がないリーシュマニア原虫に対して非常に強い抗原虫活性を有する新規化合物を見出すことに成功したので、本化合物を中心に海洋生物由来抗原虫剤の紹介をする。

【連絡先】169-8555 新宿区大久保 3-4-1 早稲田大学 理工学術院

電話 03-5286-3160, E-mail: ayocha(at)waseda.jp

## #115 New Advances in Metal-Catalyzed Alkylation and Fluoroalkylation

## 金属触媒を用いるアルキル化およびフルオロアルキル化手法の新展開

【オーガナイザー】 : David Vicic (University of Hawaii) | Vy Dong (University of Toronto) | 神戸宣明 (大阪大学)

【開催日】 : 12月17日(金) 午前・午後、18日(土) 午前・夕刻

【会場】 : 口頭発表 Iolani I/II (Hilton)

ポスター会場 : Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

今年のノーベル化学賞に輝いたクロスカップリング反応は、有機化学物の基本骨格を形成する炭素-炭素結合を生成させる最も重要な反応の1つである。この反応を利用すると、有機分子同士を結合させて、全く新しい有機化合物を合成することができる。未来技術の発展が新物質の創製に依存していることから、社会に対する合成化学の貢献は極めて高く、今回の受賞につながった。ところが、従来のクロスカップリング反応技術は、芳香族類やオレフィン、アセチレンなどの不飽和結合を有する化合物を連結するには有用であるが、最も基本的な飽和炭化水素ユニット(アルキル鎖)を連結する事は困難と考えられてきた。しかしながら、10年ほど前よりこの未開拓分野が大きく発展しつつある。本シンポジウムでは、この分野に焦点をあてて、有機分子に飽和炭化水素鎖(アルキル鎖)やフッ素を有するアルキル鎖を導入する新しい触媒反応の開発研究の最新成果を発表すると共に、同分野の研究動向と将来の方向に付いての情報交換・意見交換を行う。これらの技術開発により、新物質の効率的合成が可能となり、化学の社会へのいっそうの貢献が見込まれる。

## ハイライト 鉄を触媒とするクロスカップリング反応の実現 : 脱貴金属を目指して

【日時】 12月17日(金) 午後1時50分~2時30分

【会場】 Iolani I/II (Hilton),

【講演番号】 ID 916 口頭

Iron-catalyzed cross-coupling reaction: An effective method of alkylating various organometallic reagents

鉄触媒によるクロスカップリング反応 : 様々な有機金属試薬を用いる効率的アルキル化手法

## ○中村 正治 (京都大学化学研究所教授)

持続社会を確立するという社会的に重要な命題を解決する上で、省資源、省エネルギー、環境調和を目指した研究・開発は不可欠である。新技術の確立には、電子・光学技術を支える先端機能材料や医薬品等の生理活性物質など、新物質の開発がその基礎となる。有機合成は、様々な鍵物質の創出を通してこれら未来技術の創出を支えてきた。その有用性が認められて本年度のノーベル化学賞がパラジウム(Pd)触媒を用いるクロスカップリング反応に決まった。現在の合成技術は、Pdの様な貴金属を触媒とする技術に頼っており、希土類元素を含む資源としての金属元素の確保が社会的問題となっている。よって、貴金属に頼っていた合成技術を、地球上に大量にかつ普遍的に存在する金属元素(マグネシウムやアルミニウム、亜鉛、鉄など)を用いる技術に置き換える事が強く望まれている。ここで取り上げるハイライトは、Pdを用いるクロスカップリング反応を、身の回りに普遍的に存在する鉄(Fe)を触媒として活用する事により実現する為の基礎研究であり、将来の大きな発展が期待される。

【連絡先】 中村正治 教授 (京都大学化学研究所)

tel/fax: 0774-38-3180/3186

E-mail: masaharu(at)scl.kyoto-u.ac.jp

## #132 New Dimensions of Green Sustainable Chemistry: Novel Reactions and Catalysts

### グリーン・サステイナブル・ケミストリーの新展開：新反応と新触媒

【オーガナイザー】：Paul Anastas (Yale), Michael J. Krische (Texas), Tamim F. Braish (Pfizer) | 小林 修 (東大) | Chao-Jun Li (McGill)

【開催日】：12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後、17日(金) 午前

【会場】：口頭発表 Coral V (Hilton)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

グリーンケミストリーの最新の研究成果を集めたシンポジウム。

ハイライト 鈴木反応をわずか数秒で実現！

【日時】12月15日(水) 午前10時～10時30分

【会場】Coral V (Hilton)

【講演番号】ID 211 口頭

Instantaneous cross-coupling using catalytic membrane-installed microchannel devices

マイクロチャンネルリアクターを用いる迅速クロスカップリング

○魚住泰弘 (所属) 分子研

一般に有機分子は「油」の性質を持つため石油由来の有機溶剤に溶かして化学反応に供される。これら化学反応が水中でできれば環境調和性に優れ、有機溶剤が持つ毒性・引火性も回避した安全なプロセスとなる。本講演では、水にも有機物にも馴染む両親媒性高分子に固定化した遷移金属錯体触媒による水中での精密な有機化学反応の開発について紹介する。またこれら水中機能性高分子触媒をマイクロ流路の中で膜状に発生させ、その触媒膜を備えたマイクロ流路内に反応原料を流すことで、流路内の滞留時間1～5秒という短時間で鈴木反応が達成された。

【連絡先】魚住泰弘 [uo\(at\)ims.ac.jp](mailto:uo(at)ims.ac.jp)

ハイライト ナノテクノロジーでクリーンな酸化反応を実現

【日時】12月15日(水) 午前8時45分～9時

【会場】Coral V (Hilton)

【講演番号】ID 207 口頭

Environmentally benign oxidations catalyzed by polymer incarcerated metal nanocluster catalysts

金属ナノクラスター触媒を用いる環境にやさしい酸化反応

○宮村浩之、小林 修 (所属) 東大

酸化反応は有機合成化学において最も重要な化学反応の一つである。酸化反応のなかで最も理想的と考えられるのが酸化剤として分子状酸素を使う手法である。すでに、ポリスチレンを基盤とする高分子に金属ナノクラスターを担持した固相触媒がヒドロキノンのキノンへの酸素酸化反応を有効に触媒することを見いだしている。有機合成化学において、DDQやクロロニルといった酸化力の高いキノンは汎用される強力な酸化剤であるが、通常化学量論量以上用いられる。そこで、これらのキノンが反応系中で酸素によって再活性化できれば、環境に優しくかつ汎用的な酸素酸化反応系が構築できる可能性がある。酸化耐性のある高分子に白金クラスターを担持した触媒を用いることで触媒量のオルトクロロニル存在下、常温常圧条件下、酸素を酸化剤としてジヒドロピリジン、インドリンの酸化反応、酸化的脱保護反応が円滑に進行した。本反応系は高価なキノンの使用量を減少させることができ穏和な条件下反応が進行することから、他の多くの酸化反応や大スケールへの応用も期待できる。

【連絡先】小林 修 E-mail: [shu\\_kobayashi\(at\)chem.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:shu_kobayashi(at)chem.s.u-tokyo.ac.jp)



## # 04-148 Design and Synthesis of Biologically Active Compounds for Elucidating Mode-of-Action

### 作用機構解明を志向した生物活性化合物の設計と合成

【オーガナイザー】: 大石 徹 (九大) | Craig J. Forsyth (Ohio State University) | Hee-Yoon Lee (KAIST)

【開催日】: 12月18日(土) 午後、19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Honolulu III (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

多様な構造を有する天然有機化合物は様々な生物活性を示し、新しい薬剤開発のリード化合物として人類の疾病治療に貢献してきた。また、分子プローブを用いた作用標的分子の解明や作用機構の解明により、新しい機能を持った有機分子の設計・合成を行う研究へと展開している。本シンポジウムでは、疾病の新しい治療薬開発につながる人工分子のデザインと合成、および活性評価についてトピックとして取り上げる。本シンポジウムの発表件数は141件(うち口頭発表29件、ポスター発表112件)が予定されている。ハイライト以外にオハイオ州立大学の Forsyth 教授、シカゴ大学の Kozmin 教授などの講演も注目される。

### ハイライト 生物活性化合物の設計と合成の最前線

【日時】12月19日(日) 午前9時30分~10時 【会場】Honolulu III (Hilton)

【講演番号】ID 1767 口頭

#### Cell death control molecules

細胞死を止める分子をつくる

○袖岡幹子 (所属) 理化学研究所 基幹研究所 袖岡有機合成化学研究室

発生の途中などで不要になった細胞が自殺するように死んでいく細胞死「アポトーシス」に対し、細胞が強い傷害を受けたときに起きる受動的な細胞死が「ネクローシス(壊死)」である。袖岡氏は、酸化ストレスによって誘導されるネクローシスだけを強く抑制する分子「IM-54」の設計・合成に成功した。脳や心臓の血管が一度詰まった後で再び血液が流れるようになると、活性酸素によって脳や心臓の細胞が損傷してネクローシスを起こす。実験でマウスの心臓の血管を縛った後、再び開くと心機能不全により10分ほどで死んでしまうが、IM-54を投与しておくともうは死ななくなることを明らかにした。ネクローシスだけを抑制するIM-54のような分子を手掛かりに、ネクローシスで重要な働きをするタンパク質や、そのシステムを解明していくことができると期待されている。

【連絡先】袖岡幹子 E-mail: sodeoka(at)riken.jp

### ハイライト 新しい生物活性を有する化合物探索の最前線

【日時】12月19日(日) 午後3時30分~4時 【会場】Honolulu III (Hilton)

【講演番号】ID 1994 口頭

#### Small molecule tools for cell therapy

細胞治療に向けた小分子ツールの探索

○上杉志成 (所属) 京都大学 物質-細胞統合システム拠点・化学研究所

上杉氏は、化合物ライブラリーのスクリーニングによって、ヒト培養細胞の接着と増殖を促進する小分子化合物を発見した。アドヘサミンと名付けたこの化合物は、細胞表面のヘパラン硫酸に結合して、生理的な細胞接着や増殖を亢進している。細胞治療を助ける化合物として期待されている。

【連絡先】上杉志成 E-mail: uesugi(at)scl.kyoto-u.ac.jp



## #216 Molecular Complex Systems: Reversible Aggregation/Disaggregation of Organic Molecules

### 分子系高次構造体—有機分子の可逆的会合解離システム

【オーガナイザー】: 山口雅彦 (東北大) | Byeang Hyeon Kim (POSTECH) | Deqing Zhang (IC-CAS)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Honolulu I (Hilton)

#### 展 望

オングストロームサイズの有機分子の化学から、ナノメートルサイズの有機大分子の化学に進み、さらにマイクロメートルサイズの分子系高次構造体の化学を展開する物質のボトムアップアプローチに興味もたれている。これは従来知られていなかった高い機能性と環境調和性を兼ね備えた新しい分子、物質あるいは材料を提供することが可能になるためである。加えて、生物機能を深く理解する手がかりになるとも期待される。このシンポジウムでは分子系高次構造体化学のひとつの方向性として、可逆的に解離会合を起こす分子あるいは分子集合体システム研究の最近の進展について講演と討論を行う。合成小分子、タンパク質、DNA、合成高分子、精密合成有機大分子などの様々な構造と性質の有機化合物をとりあげ、熱、光、濃度、溶媒、イオンや小分子の存在下などの環境において、可逆的に結合あるいは解離する現象を検討する。この構造変化現象の発見、機構の解明、学術的な意義、応用への発展性について議論する。

ハイライト 会合解離システムによる分子系高次構造体

【日時】12月19日(日) 午後2時25分~2時45分 【会場】Honolulu I (Hilton)

【講演番号】ID 2015 口頭

#### Enantiodifferential approach to target protein of a bioactive metabolite

マメ科植物の就眠運動メカニズム解明への化学的アプローチ

○海老根真琴、中村葉子、真鍋良幸、楊剛強、猪俣翔、上田実 (所属) 東北大学大学院理学研究科

科学技術が発達した現在でも、動植物の生命現象には未知の部分が多く残されています。その精密なシステムを正確に理解することは、簡単ではありませんが人類に多くの利益をもたらすと期待できます。

我々は、マメ科植物の「就眠運動(※注1)」に関わる化学物質を特定し、LCFと命名したその化合物を用いて就眠運動メカニズムの全容解明を目指しています。現在はLCFの標的タンパク質を探索していますが、植物体内に混在する膨大な種類のタンパク質から目当てのタンパク質を探し出すことは容易ではありません。我々は、LCFとそのエナンチオマー(※注2)を用いてそれぞれに結合するタンパク質を調査し、LCFにのみ結合するものを探し出すという手法で、LCFの3次元構造を特異的に認識するタンパク質の検出を行っています。

※注1: 昼間は葉を開き、夜間は葉を閉じる、およそ24時間周期の葉の開閉運動。光や温度、湿度などの外的要因に関わらず植物の体内時計により制御されている。

※注2: 平面構造は同じだが立体構造はちょうど鏡に映したもののように互いに真逆であるもの。物性は同じだが3次元構造が異なる。

【連絡先】東北大学大学院理学研究科化学専攻有機化学第一研究室

教授 上田実

mail: ueda(at)m.tohoku.ac.jp

## #222 Practical Applications of Basic Research on Molecular Recognition

## 分子認識に関する基礎研究の応用への展開

【オーガナイザー】: W. L. Hinze (Wake Forest Univ) | 加納 航治 (同志社大) | C. J. Easton (Australian Nat. U)

【開催日】: 12月16日(木) 午後、17日(金) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Honolulu I (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

これまでに Pedersen, Cram, Lehn らノーベル賞受賞者が火付け役となって、分子認識 (Molecular Recognition) に関する基礎研究が活発に行われてきた。しかし、クラウンエーテル以外に幅広く実用に供せられるホスト-ゲスト系は、いまだその数が限られている。例えば、シクロデキストリンをホストとするカラムクロマトグラフィーは、分子認識の基礎研究が実用化された数少ない例の1つである。本セッションは、まだまだ実用化の可能性が残されている分子認識研究を掘り起こし、基礎に裏打ちされた実用化を目指す研究の起爆剤となることをその目的とする。

ハイライト 実用可能なヘムタンパク質モデル

【日時】12月16日(木) 午後2時~2時30分 【会場】Honolulu I (Hilton)

【講演番号】ID 964 (口頭)

Unique properties of heme-protein models composed of iron porphyrins and cyclodextrin dimers

鉄ポルフィリンとシクロデキストリン二量体からなるヘムタンパク質モデルの特性

○加納航治 (所属) 同志社大学 理工学部

我々の体の中には多様なヘムタンパク質があり、酸素の運搬・貯蔵 (ヘモグロビンやミオグロビン)、エネルギー変換 (チトクローム類)、異物の代謝 (チトクローム P-450)、酸化触媒 (カタラーゼ) などの働きをしている。これらのヘムタンパク質はプロトヘム IX という共通の補欠分子族とそれぞれに異なるタンパク質とのホスト-ゲスト錯体であり、タンパク質の種類によって、その働きが変わる。このヘムタンパク質の機能を、入手しやすい人工の鉄ポルフィリンと合成されたシクロデキストリン二量体の包接錯体で再現すると、この人工物は天然のヘムタンパク質に驚くほどよく似た挙動を示す。一般には非常に実現困難な水中での酸素分子捕捉や、血液中の一酸化炭素捕捉をいとも簡単に成し遂げるし (ヘモグロビンやミオグロビンと同じ機能)、青酸ガス中毒を解毒する (メトヘモグロビンと同じ機能) こともできる。このような結果は、完全人工のモデル系が人工血液や火災時の一酸化炭素および青酸ガス中毒解毒に応用できることを示唆している。

【連絡先】610-0321 京田辺市多々羅 同志社大学理工学部 加納航治

電話 0775-65-6624, E-mail: kkano(at)mail.doshisha.ac.jp

## # 279 Recent Advances in Natural Products as Anticancer Agents

## 抗腫瘍性天然有機化合物に関する最近の進歩

【オーガナイザー】: David G. I. Kingston (Virginia Polytechnic Institute & State Univ) |  
Ronald Quinn | 松永茂樹 (東大院農) | Ji-Kai Liu

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後・夜、18日(土) 午前・夜

【会場】: 口頭発表 South Pacific III (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

現在臨床で使われている抗腫瘍物質(抗がん剤)の半数以上は、陸上植物や微生物から発見された化合物(天然物)または、その構造を基に化学合成された誘導体である。人工合成によって新しい化合物を見つけ出そうという試みも、有機化学の草創期から続けられているが、目覚ましい発見は少ない。現在でも、天然物がほぼ唯一で、もっとも有望な抗腫瘍物質の供給源である。本シンポジウムでは、様々な天然資源から、効率よく抗腫瘍物質を探し出したり、生産させたりするための新しい試みやその成果についての報告がなされる。

ハイライト 新しい作用機序の抗腫瘍性物質の発見

【日時】12月17日(金) 午後12時50分~1時25分

【会場】South Pacific III (Hilton)

【講演番号】ID 931 口頭

Mode of action of an anticancer agent that inhibits pre-mRNA splicing

プレ mRNA スプライシングを阻害する抗腫瘍物質の作用機序

○吉田稔 (所属) 理化学研究所

細菌の培養液から発見された FR901464 は強力な抗腫瘍物質で、細胞内の遺伝子発現に対して異常な作用を示した。この作用機序を詳細に検討した結果、タンパク質の鋳型となる mRNA のスプライシングを特異的に阻害するという前例のないメカニズムであることが判明した。この抗腫瘍物質の作用機序と生物活性について紹介する。

【連絡先】 E-mail: yoshidam(at)riken.jp

ハイライト 構造改変抗腫瘍性ペプチドの大腸菌による生産

【日時】12月17日(金) 午後12時50分~1時25分

【会場】South Pacific III (Hilton)

【講演番号】ID 935 口頭

Recent progress on the biosynthesis of peptide antitumor antibiotics 日本のマイクロシ  
抗腫瘍ペプチド性抗生物質の生合成研における最近の進歩

渡邊賢二、大栗博毅、○及川英秋 (所属) 静岡県大、北海道大

放線菌などの微生物は、非タンパク構成アミノ酸を含むペプチドを種々生産する。微生物における生産機構の解析ならびに各段階の化学反応を触媒する酵素を遺伝子工学的に生産させることにより、大腸菌を用いてペプチドを作り出すことが可能となった。この手法を発展させれば、研究者が望む形のペプチド分子を大腸菌に作らせることができるようになる。

【連絡先】 E-mail: hoik(at)sci.hokudai.ac.jp

## #04-283 Transition Metal Catalysis: Mechanism and Practice

## 遷移金属触媒：機構と実用

【オーガナイザー】：野崎京子（東大） | Jeffrey Stryker | F. Dean Toste

【開催日】：12月17日午後、18日午前・午後、19日午前

【会場】：口頭発表：*Honolulu II (Hilton)*

ポスター会場：*Kamehameha Halls II and III (Convention Center)*

## 展 望

本シンポジウムは均一系遷移金属触媒反応の最近の進歩を多角的にとらえる。主題は以下の通りである。

- 1) 触媒の高活性化
- 2) 複雑な化合物のワンポット合成
- 3) ユビキタス金属の利用

遷移金属触媒の機構的考察も議論の対象とする。

## ハイライト

特になし

【連絡先】野崎京子 E-mail: nozaki(at)chembio.t.u-tokyo.ac.jp



## #5-24 Ultrafast Intense Laser Chemistry

## 超高速強光子場科学

【オーガナイザー】：山内 薫 (東京大学) | Robert Levis (Temple University) | Andre Bandrauk (University of Sherbrooke)

【開催日】：12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後・夜、17日(金) 午前

【会場】：口頭発表 KoKo Crater (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

分子は強い光の場の中でどのように振舞うのか、そして、強い光の場をデザインすることによって分子のダイナミクスを制御できるのか？本シンポジウムでは、この本質的な問題に正面から取り組みます。近年の高輝度超短パルスレーザー技術の発展は、原子や分子が光と混合した新しい状態（ドレスと状態）の生成を可能としたばかりか、分子のダイナミクスを光によって制御するための新たな視点を提供することとなりました。そこで、実験と理論の立場から、強光子場科学の第一線で活躍する研究者が世界中から集い、最新の成果を発表し、強光子場分子科学のフロンティアの更なる拡大を目指します。特に、アト秒領域の光の発生、超高速水素マイグレーション過程、超短レーザー場における原子・分子による電子散乱、X線自由電子レーザーによる多価イオンの発生など最新の話題を取り上げます。

ハイライト 高強度紫外レーザー場中化学反応の電子励起機構

【日時】12月15日(水)午後1時50分～2時20分 【会場】KoKo Crater (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 086 口頭

Dissociative ionization of ethanol in intense UV laser fields studied by photoelectron-photoion coincidence momentum imaging

光電子・光イオン同時計測運動量画像法による高強度紫外レーザー場中エタノールの解離性イオン化の研究

○板倉隆二<sup>1</sup>、生田朋也<sup>1,2</sup>、穂坂綱一<sup>1</sup>、赤木浩<sup>1</sup>、山内薫<sup>1,3</sup>、横山淳<sup>1</sup>、神成文彦<sup>2</sup>

(所属)<sup>1</sup>日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門、<sup>2</sup>慶応義塾大学大学院 理工学研究科、<sup>3</sup>東京大学大学院 理学系研究科

強レーザー場と分子の相互作用は高次の非線形過程であり、摂動的な光励起とは本質的に異なる。波長を紫外にすると解離反応を促進する分子が多いことは知られているが、光反応を支配する電子励起は、電離も伴う複雑な過程であり、詳細はわかっていない。本研究は、電離と電子励起機構の解明を目指し、紫外波長の強レーザー超短パルス照射により同一分子から生成した光電子と解離イオンを同時に観測した。図に示すように、実験装置内に静電場を掛け、生成した電子とイオンを、異なる2つの位置敏感検出器へと誘導した。対象としたエタノール分子には、複数の解離経路があり、電子励起状態との相関が知られているので、解離イオン種の観測によって最終電子励起状態の情報を得ることができる。レーザー強度が  $10 \text{ TW/cm}^2$  以下の場合、電離と同時に電子励起状態が生成され、そのまま解離する割合は、全イオン収量の7割以上にも上ることが明らかとなった。レーザー強度を上げていくと、電離の時には、電子基底状態の生成が優勢になるが、その後、同じレーザーパルス内で、段階的な電子励起が起り、解離へ進行することが明らかとなった。レーザー強度の関数として得られたイオン化および電子励起経路の分岐比の定量的な詳細について、解析を進めることによって、レーザーパルス波形整形技術と組み合わせた高効率な光化学反応制御に向けた指針を得ることができると期待される。

【連絡先】619-0215 京都府木津川市梅美台8-1-7

日本原子力研究開発機構 関西光科学研究所

電話 0774-71-3489, E-mail: itakura.ryuji(at)jaea.go.jp

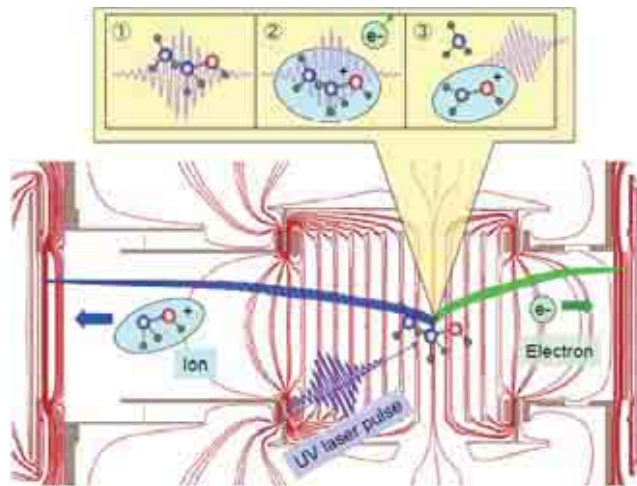


図 1. 電子・イオン運動量同時計測概念図. 挿入図 (上) は、①レーザー電場中エタノールが②電離、③解離する様子.

ハイライト 強い光で分子の結合を自在に操る

【日時】12月15日(水) 午前8時10分～8時40分

【会場】KoKo Crater (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 010 口頭

Control of Vibration and Fragmentation of  $C_{60}$  by Intense Near-Infrared Pulses: First-Principles Molecular Dynamics Simulation

高強度近赤外パルスによる  $C_{60}$  の振動と解離の制御 — 第一原理分子動力学シミュレーション —

○河野裕彦<sup>1</sup>、新津直幸<sup>1</sup>、菊池美裕<sup>1</sup>、中井克典<sup>2</sup>、戸田幹人<sup>3</sup> (所属)<sup>1</sup>東北大学、<sup>2</sup>東京大学、<sup>3</sup>奈良女子大学

強いレーザー光は分子振動エネルギーが多く、結合に素早く流れていく過程に打ち勝つことができ、今や光によって結合選択的な反応を起こせる時代になった。しかし、制御の機構を実験的に解明することは難しく、理論のサポートが必要とされている。本研究グループは、光が原子核の運動を決めるポテンシャル面を歪ませる効果を取り込んだ時間依存断熱状態法とよばれる第一原理的手法を開発し、強いレーザー場中に置かれたエタノールの結合選択的解離の機構などを解明してきた。反応制御が困難とされる  $C_{60}$  のような大きな分子でも、いくつかのフェムト秒パルスの列の間隔を特定の分子振動の周期と一致させることによって、大きなエネルギーをその振動モードに注入できることを示した(図参照)。どの振動を励起するかによって、続いて起こるストーンウエールズ転位の回数が異なり、 $C_{60}$  のネットワーク構造が異なったものになる。この構造制御によって解離生成物の収率を制御できる。この結果は、 $C_{60}$  の特定の解離生成物の収率を最大にするパルスが実験ではなぜパルス列であるかを説明しており、理論が反応制御実験の結果を第一原理的に解釈でき、実験に新たな指針を与え得ることが示された意義は大きい。

【連絡先】河野 裕彦 E-mail: hirohiko-kono(at)m.tohoku.ac.jp

### $C_{60}$ の選択的分子振動励起

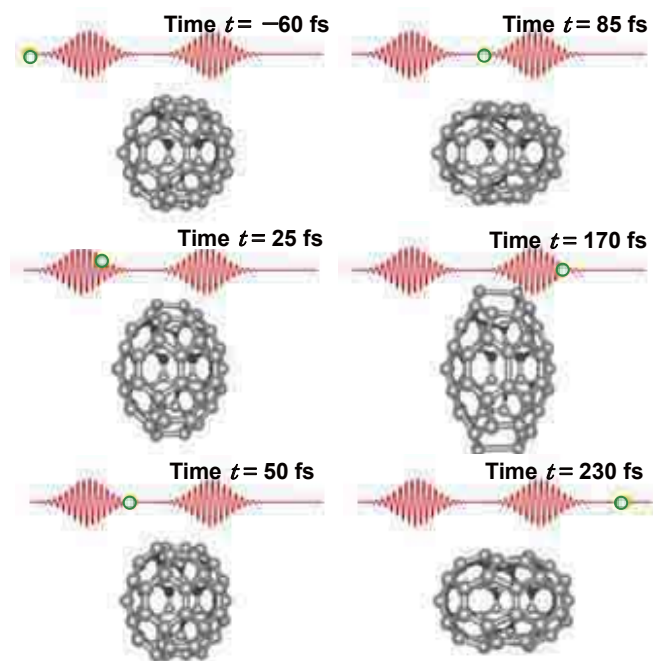


図 2 光強度  $7 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 、パルス長 30 fs の 2 つの近赤外パルスと相互作用する中性  $C_{60}$  のスナップショット。各時刻での電場強度を●印で示す。60 eV ものエネルギーが偏長と扁平の構造を繰り返す振動モードに注入され、ストーンウエールズ転位を経て、 $C_2$  の脱離が始まる。

## #37 Advances in Quantum Monte Carlo

## 量子モンテカルロ法の最近の進展

【オーガナイザー】：田中成典（神戸大） | William A. Lester, Jr. | Stuart M. Rothstein

【開催日】：12月15日（水）午前・午後、16日（木）午前、午後、夜、17日（金）夜

【会場】：口頭発表：Ewa (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

量子モンテカルロ (Quantum Monte Carlo; QMC) 法は、原子・分子・凝集系の量子状態を精密に計算できる計算手法として、分子軌道法や密度汎関数法とは別の独自の研究開発の歴史を持っている。本シンポジウムでは、主に拡散量子モンテカルロ (Diffusion Quantum Monte Carlo; DMC) 法を中心とした基礎理論ならびに応用計算の最近の進展が扱われる。取り上げられるトピックスとしては、まず、多体波動関数のノード位置の最適化に関する考察が挙げられ、この点は電子系の厳密なエネルギーや物理量を得る上で重要な研究対象である。また、こういったフェルミ系の波動関数の負符号問題に煩わされないいくつかの新手法も提案されている。さらに、QMC法の結果は原理的には用いる基底関数には依らないが、実際には（何らかの近似的な取り扱いが含まれるため）基底関数の依存性を持つ。従って「質の良い」基底関数の使用が必要となり、この点に関する講演も含まれている。また、以下の「ハイライト」で取り上げられているような (RQMC法などの) 新たなアプローチの開発やその応用なども紹介される。さらに、電子だけでなく、分子系における原子核の量子効果をQMC法で扱う研究も増えつつあり、DMC法や経路積分量子モンテカルロ (Path Integral Quantum Monte Carlo; PIMC) 法が活用されている。これらのアプローチにより、分子系の振動・回転状態の非調和性なども正確に記述される。応用計算としては、水、分子クラスター、金属水素化物、分子結晶、生体分子、エネルギー変換・貯蔵材料、電池材料など様々な系の基底状態ならびに励起状態が取り扱われている。

## ハイライト Reptation Quantum Monte Carlo 法の開発と応用

【日時】12月16日（木）午前7時50分～8時30分 【会場】Ewa (Sheraton Waikiki)

【講演番号】228 口頭

Reptation quantum Monte Carlo: Application to ground-state properties of water

Reptation Quantum Monte Carlo 法の開発と水分子への応用

○S.M. Rothstein, W.K. Yuen and D.G. Oblinsky (Brock University)

Reptation Quantum Monte Carlo (RQMC) 法は最近注目を集めている量子モンテカルロ法における新しいアプローチである。この方法では「reptile」と呼ばれる粒子配置の鎖をサンプリングし、エネルギーだけでなく、ハミルトニアンと非可換な物理量の計算も精度良く行うことができる。原子・分子系の電子状態を精密に計算する手法として知られている拡散量子モンテカルロ法における難点の一つであった population control bias の問題もこの方法によって回避できる。しかしながら、Baroni と Moroni によって提案されたオリジナルの手法では、time-step bias が大きくなるケースがあるという問題があった。本講演では、伝播関数の非可逆性に着目して RQMC 法の改良を行い、time-step bias に関しても良好な結果を得た。水分子の基底状態の計算を例にとりその有効性が示されている。

【連絡先】 Department of Chemistry, Brock University, St. Catharines, Ontario, Canada

E-mail: srothste(at)brocku.ca

【連絡先】 神戸大学大学院システム情報学研究科 田中成典

E-mail: tanaka2(at)kobe-u.ac.jp



## # 75 Dynamics and Mechanisms of Photochemical Reactions of Biological Proteins

### 生体タンパク質の光化学反応ダイナミクスと反応機構

【オーガナイザー】：寺嶋正秀(京大)| Keith Moffat(The University of Chicago)| Pill-Soon Song (Pill-Soon Song)

【開催日】：12月18日(土) 午後、19日(日) 午前・午後

【会場】：口頭発表 Honolulu (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

地球上の生命にとって光は必要不可欠であり、生物が光をどのようにエネルギーに変えたり、情報として取り入れているかを分子レベルで明らかにすることは、化学の分野での重要な研究テーマとなっている。特に、光を吸収する発色団から、生体機能発現に直接関係するタンパク質へどのような速度で、どのように情報が受け渡されるかという問題は、生物・化学・物理・医学の多くの分野での重要な問題となっており、こうした分野の研究者間の密接な連携が必要とされる。ここでは、実験物理化学者、理論化学者、生物物理研究者を講演者として、幅広い立場から光受容タンパク質の反応機構を議論する。特に、生体分子構造や構造揺らぎの観点から、いかにして光エネルギーを有効に利用しているかという点に重点を置く。また、これは最近注目されている、オプトジェネティクスと呼ばれる光を使った新しい機能の作製というトピックスにも関係しており、工学的な幅広い見地からの興味も持たれている。

### ハイライト 光受容タンパク質反応解析の最前線

【日時】12月18日(土) 午後12時40分～1時10分 【会場】Honolulu (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 1223 口頭

#### Dynamics and mechanisms of photochemical reactions of biological proteins

生体タンパク質の光反応ダイナミクスと機構

○寺嶋正秀 (所属) 京都大学 大学院理学研究科

光反応ダイナミクスを研究する際の困難な点は、光を吸収する発色団分子に注目されるあまり、周囲のタンパク質部分の構造変化やエネルギー変化についての情報が得られない点にある。また、構造揺らぎと機能との関係についても調べる手段がほとんどなかった。こうした従来不明だった反応ダイナミクスと機能との相関を解明する新しい手法について報告する。

【連絡先】606-8502 京都市左京区北白川 京都大学理学研究科

電話 075-753-4026, E-mail: mterazima(at)kuchem.kyoto-u.ac.jp

### ハイライト オプトジェネティクスについて

【日時】12月19日(日) 午後3時50分～4時20分

【会場】Honolulu (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 1482 口頭

#### Optogenetics: The structure and function of natural and engineered photoreceptors

オプトジェネティクス：天然および工学作成した光レセプターの構造と機能

○Keith Moffat (所属) シカゴ大学

ある光感受タンパク質を別の生物に組み込み、新規な光応答を得るための技術がオプトジェネティクスと呼ばれる、新しい工学的手法である。この手法を使うことで、頭で考えていることを光信号として取りだしたり、光を使って生物の動きをコントロールするといった新しい使用法が生まれてくる。こうしたオプトジェネティクスの概念と方法を、天然タンパク質だけでなく工学的に作成されたタンパク質を用いて実証し、進むべき方向性を解説する。

【連絡先】シカゴ大学 E-mail: moffat(at)cars.uchicago.edu



#87

## Spectroscopic Probes of Intramolecular and Intermolecular Interactions in Molecules and Molecular Clusters

### 分子と分子クラスターの分子内および分子間相互作用の分光学的研究

【オーガナイザー】：関谷 博 (九大) | Timothy Zwier | Masaaki Fujii | Seong Keun Kim

【開催日】：口頭発表 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後・夜  
ポスター発表 12月17日(金) 午前

【会場】：口頭発表 Kohala/Kona (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

#### 展 望

水や生体分子など実在系の物質のほとんどは分子の集合体である。分子集合体の性質や生体分子の機能は、複雑な分子間相互作用や反応素過程の連動によって発現する。このシンポジウムでは、分子および分子の集まりであるクラスターの実験と理論・計算の最先端の研究成果について講演と討論が行われる。最近、生体分子、大サイズのクラスターなど実在系に近い分子や分子クラスターを対象とする研究に強い興味もたれている。本シンポジウムの講演者の多くは、気相において分子や分子クラスターを生成させて、レーザー分光法を用いた研究を行っている。生体分子を壊さないで蒸発させる方法や大きなクラスターのサイズを分けて測定する方法において、顕著な発展が見られる。その他、分子間相互作用、反応過程について調査するための新規な分光法の開拓や結果を予測・解析するための理論・計算方法の開拓においても大きな発展が遂げられている。これらの研究成果が米国、カナダ、韓国、日本など環太平洋の国々だけでなく、イギリス、フランスなどヨーロッパからの著名な研究者の招待講演において紹介される。一般講演とポスターセッションにおいては、主にこの分野の将来を担う20-30代の若手研究者の講演が行われる。

#### ハイライト 最も小さい氷

【日時】12月15日(水)午後1時30分~1時55分 【会場】Kohala/Kona (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 152 口頭

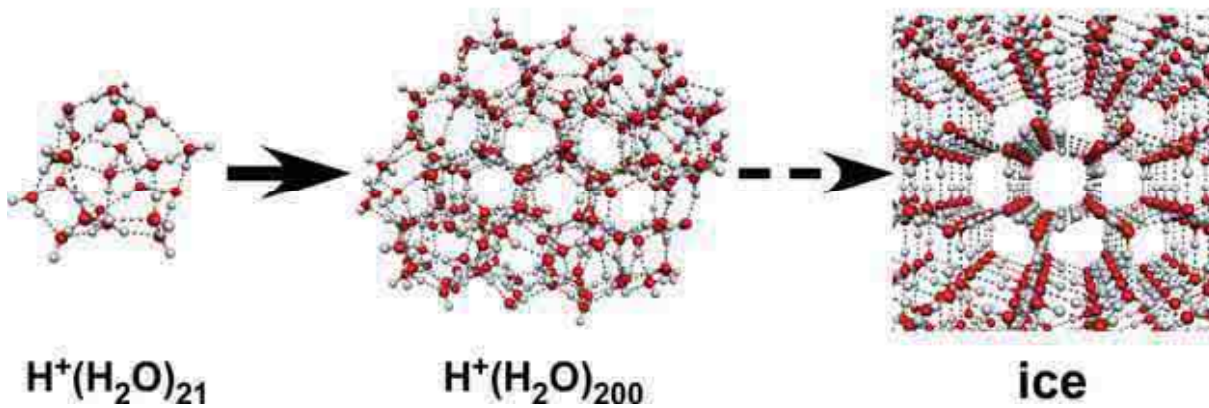
#### Infrared Spectroscopy of Size-Selected Large Water Clusters

サイズ選択された大きな水クラスターの赤外分光

○ 藤井朱鳥 (所属) 東北大学 大学院理学研究科

.....

水は最も身近であり重要な物質であるが、未だに多くの謎がある。その一つが氷結晶に関するものである。氷結晶は、6個の水分子が環を作り、それが3次元的に組み合わされて六方晶と呼ばれる形をとる。隙間が大きく密度が低いので、氷が水に浮く原因となる。それでは、水分子が何個集まったらこの様な特徴的な構造が実際に作られるのだろうか？決まった数(これを「サイズ」と呼ぶ)だけの分子によって作られる分子集合体は「(気相) クラスター」と呼ばれる。これまで、2個~20個ほどの水分子が集まってどのような構造を作るかが盛んに研究されてきた。しかしこのような分子数の領域では、氷の骨格となる6分子の環は時折見られるものの、それが組み上がって氷状の構造を作り始めることはなかった。分子数が少ないと、低温でもクラスターの形は氷結晶とは全く異なってしまうのである。そこで今回、厳密な分子数の特定のために電荷を持つプロトン(水素原子核、H<sup>+</sup>)を含む水のクラスターを対象として、その構造を赤外分光と呼ばれる手法でこれまでにない大きなクラスターまで系統的に調べた。その結果、水100-200個の領域でクラスター内部に氷結晶状の構造が形成され始めることが示された。すなわち、氷を細かく砕いていくと、「氷」でいられるのは100分子ほどの大きさまでであり、これより小さな氷は存在できないのである。



【連絡先】 980-8578 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-3 東北大学 大学院理学研究科 化学専攻 電話 022-795-6572, E-mail: asukafujii(at)m.tohoku.ac.jp

**#05-116 Anharmonic Vibrations of Molecules and Clusters: Experimental and Theory****分子とクラスターの非調和振動 – 実験と理論**

【オーガナイザー】: H. Kjaergaard | S. Ishiuchi | D. McNaughton | S. Xantheas

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後、18日(土) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Akaka Falls/Iao Needle (Sheraton Waikiki)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

**展 望**

赤外分光により測定される分子振動は、化学結合の状態を調べるためのよい指標である。現在、計算機と汎用の分子シミュレーションソフトウェアの進歩により、実験で得られた赤外スペクトルと計算で得られた理論スペクトルを比較して分子構造を決定することが可能となった。しかし、計算の汎用性のためには、調和振動子近似に基づく基準振動解析に頼らざるを得ない。この方法は「固い分子」に対しては比較的よい結果を与えるが、柔らかく揺らぎの大きな分子ではほとんど役に立たない。また、高エネルギーの振動状態や複数の振動が同時に起こる様な振動状態に対しても、定量的な結果を得ることは難しい。しかし、近年、大気化学の分野で近赤外から可視領域の高エネルギー振動状態の光吸収が問題になり、定量的に信頼できる計算手法が必要となってきた。また実験手法の進歩により、分子クラスターの様な柔らかい分子系の赤外分光が可能となり、この様な系では非調和振動の理論計算が不可欠であることが判ってきた。このシンポジウムでは、非調和振動の実験と理論による最新の研究成果を取り上げ、これらの諸問題を論ずる。

ハイライト スペクトルで見る原子転移反応

【日時】12月18日(土) 午前9時20分~9時40分

【会場】Akaka Falls/Iao Needle (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 1078 口頭

Ionization induced site switching reaction in phenol/Ar cluster: Spectroscopic view of dynamical motion of Ar atom

フェノール・Ar クラスターのイオン化誘起サイトスイッチング反応—スペクトルで見る Ar 原子の動き

○石内俊一、宮崎充彦、酒井誠、藤井正明(所属)東京工業大学 資源化学研究所、

O. Dopfer(所属)ベルリン工科大学、K. Müller-Dethlefs(所属)マンチェスター大学  
発表者らは、フェノールに Ar 原子を付着させると通常はベンゼン環の上に Ar 原子が付くが、ベンゼン環から電子を1個剥ぎ取り正イオンにすると、Ar 原子が OH 基の先に移動すること(イオン化誘起サイトスイッチング反応)を見出した。この様な Ar 原子の動きは正に非調和振動そのものであり、分光学的に大変興味深い。講演では、このイオン化誘起サイトスイッチング反応を非調和振動の視点からどのように理解したらよいかを議論する。

【連絡先】226-8503 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259 東京工業大学資源化学研究所  
電話 045-924-5269, E-mail: ishiuchi.s.aa(at)m.titech.ac.jp

ハイライト 生体分子の非調和振動

【日時】12月18日(土) 午後7時~9時

【会場】Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

【講演番号】ID 1299 ポスター

Conformational analysis of the guanine nucleosides based on ab initio anharmonic vibrational calculation

非経験的非調和振動計算によるグアニンヌクレオシドのコンフォメーション解析

○浅見祐也、三枝洋之(所属)横浜市立大学大学院 生命ナノシステム科学研究科、

八木清(所属)山梨大学燃料電池ナノマテリアルセンター

横浜市大のグループはレーザー脱離法を利用した気相核酸塩基の分光研究を行っており、核酸塩基類のコンフォメーションを赤外分光により解析している。また、山梨大のグループは独自に開発した非経験的非調和振動計算ソフト(SINDO)を用いて、核酸塩基類の赤外スペクトルの計算による再現を試みている。講演では実験で得られた幅の広いスペクトルが非調和振動計算によりどのように説明されるかを議論する。

【連絡先】横浜市立大学 E-mail: saigusa(at)yokohama-cu.ac.jp

**#138 Molecular Theory for Real Systems and Chemical Reactions****実在系と反応系に対する分子理論**

【Organizers】：榊 茂好（京大）、高塚和夫（東大）、山下晃一（東大）、Mark Gordon, Martin (Iowa State Univ.), Head-Gordon (CA Berkley), Yoon Sup Lee (KAIST), Shuhua Lee(Nanjing Univ.)

【開催日】：12月15日（水）午前・午後、16日（木）午前・午後・夜、17日（金）午前・午後

【会場】：口頭発表：Oahu (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

**展 望**

計算機を使った理論計算は現代の化学研究に欠くことの出来ない重要な研究手法となっています。これは理論的方法の進展と同時に計算機の進展によるものです。現在、我が国では、次世代スーパーコンピュータ計画が進行中であり、この研究プロジェクトにも理論化学・計算化学チームが参加しています。米国でも同じようなスーパーコンピュータ計画（ブルーウォーター計画）が進行中で、日米がその開発を競争しています。今回の環太平洋化学会のシンポジウムでは、実際の実験化学者が研究対象としている化合物や化学反応に対して、理論化学・計算化学がどのようにアプローチしようとしているか、どのように成果を上げているか、を中心に講演とポスター発表を選んでいきます。内容的には、量子化学計算の精度を上げる研究、大きな化合物の計算、化学反応、分子の動的な振る舞い、などに関する研究を紹介いたします。我が国をはじめ、米国、中国、韓国、カナダ、オーストラリアなどの第1線で活躍している研究者の発表が目白押しになっています。このシンポジウムで、理論化学・計算化学の電子状態法および反応ダイナミクス法に関する最近の進展がほとんどカバーされています。理論化学・計算化学は、化合物や反応に関して基礎的な理解を与えてくれますし、実験をしなくても結果の予測が可能です。計算機をどのように有効に使用できるか、はこれからの化学の進展を大きく左右しますので、この分野での研究の重要性は一層大きくなると思われれます。

**ハイライト**

【日時】12月15日（水）午後3時45分～4時10分

【会場】Oahu (Sheraton Waikiki)

【講演番頭】ID 28

**Recent development of divide-and-conquer electronic structure calculation: Application to open-shell system**

分割統治法による電子状態計算法の開発と開殻系分子への適用

○中井浩巳（所属）早稲田大学 先進理工学部

量子化学では、物質の多種多様な構造や性質を、原子核と電子の状態に関する基礎方程式に基づいて理論的に解明し、予測することも可能になります。今日の化学で重要な研究対象であるナノ・バイオなどの複雑系では、取り扱う電子数も増え、また求められる計算精度も高くなります。そのため、最先端のスーパーコンピュータを用いても計算できないケースも出てきます。主な原因は、量子化学計算では電子数  $N$  の増加に対して  $N^4$  以上で計算時間がかかるためです。分割統治(DC)法は計算時間を  $N$  の1乗に比例するように短くするための方法(O(N)法)であるが、密度汎関数理論(DFT)に限定されていた。本発表では、このDC法を一般的な方法（電子相関を含んだ波動関数理論）に拡張し、高精度計算に成功している。さらに、通常取扱いが困難であるラジカルなどの分子についてDC法を改良し、その適用にも成功した点を強調したい。たとえば、図1のようにスピンの非局在化する場合(a)、局在化する場合(b)、いずれもDC法で正しくスピン分布が計算されている。開殻系は、磁性、光物性、導電性など様々な物性と関係するため、それらの材料設計には本手法は有効であると期待されている。



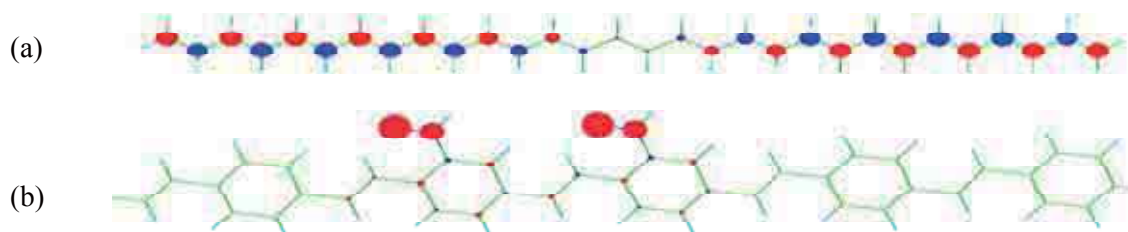


図1. (a)オリゴエンカチオン( $C_{30}H_{32}^+$ ), (b)NOH 置換オリゴスチレン( $C_{72}N_2O_2H_{56}$ )におけるスピン分布 ( $\alpha \cdot \beta$  スピンの大きさを赤・青丸の大きさで表示).

【連絡先】 169-8555 新宿区大久保 3-4-1 早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科  
電話 03-5286-3452, E-mail: nakai(at)waseda.jp

### ハイライト

【日時】 12月16日(木) 午前8時~10時

【会場】 Oahu (Sheraton Waikiki)

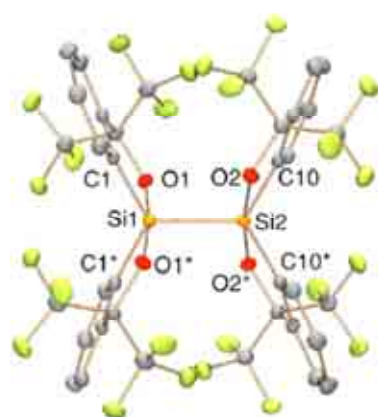
【講演番号】 ID 311 口頭発表

### Interesting Bonds and Reactions Provided by Heavier Group 14 Elements

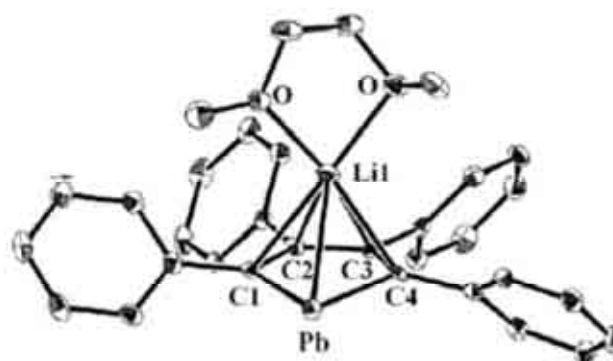
高周期14族元素の興味ある結合と反応

○永瀬 茂 (所属) 分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域

炭素、窒素、酸素などの第2周期元素は、有機化学において中心的な役割をなしている。遷移金属を利用した化学の最近の進展には目覚ましいものがあるが、主役は炭素を基本とする骨格である。ケイ素 (Si)、ゲルマニウム (Ge)、スズ (Sn)、鉛 (Pb) は炭素と同族の14族元素であるので、炭素に匹敵する、あるいは高周期元素ならではの結合と反応が期待できる。従来の化学結合、芳香族性、歪みなどの概念や反応則は炭素を基本とする第2周期元素の化合物を中心に確立されてきたものであり、高周期元素を骨格にもつ化合物にも同じように適用できるかは興味ある課題である。本発表では、高周期元素を骨格にもつ化合物が炭素化合物といかに類似しているのか、あるいは相違するのかを明らかにする。このために、多重結合化合物、芳香族化合物、超原子化合物の構造と反応を取り上げて、実験との共同研究の最近の成果の幾つかを紹介する。これらは、簡略化したモデル計算ではなく、現実の系をそのまま扱える量子化学計算の進展によっている。



5配位ケイ素間の結合  
Nature Chem. (2010)



鉛を骨格にもつ芳香族化合物  
Science (2010)

【連絡先】 444-8585 岡崎市明大寺町字西郷中 38 分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域 E-mail: nakai(at)waseda.jp

## #05-140 Re-Encounter of Computational Chemistry and Chemometrics

## 計算化学と計量化学の再遭遇～類似異文化の交流を求めて

【オーガナイザー】：高木達也（阪大院薬）・【Co-Organizer】相田美砂子（広島大院理）、長谷川健（東工大院理工）、Marcel Maeder (The Univ. of Newcastle)、Richard Ming Wah Wong (National Univ. of Singapore)

【開催日】：12月18日（土）午後、19日（日）午前

【会場】：口頭発表 Akaka Falls/Iao Needle (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

広義の計算機化学は、大きく分けて、2つの潮流がある。1つが量子化学など、理論を基礎に、化学反応や材料設計、医薬品設計を行い、その謎を解こうとする分野で、「計算化学」と呼ばれ、もう一つが、多くの実験結果（例えば髪の毛の近赤外光の散乱）から、数学を使って、有用な情報（髪の毛の水分量）を見いだそうとする分野で、「計量化学」と呼ばれる。

両者は何故か、誕生以来、別々の道を歩み、発展してきた。しかしながら、私たちは、近年の人々の「化学」に対す多様な要求・願望を実現するためには、両者が互いに相補い合う必要性が出てきたのではないだろうかと考え、このシンポジウムを企画した。例えば、計算化学で得られた分子の様々な性質をデータとして、計量化学の手法を用いて材料設計などを行うことも珍しくなくなってきた。

しかしながら、今まで、国際学会において、両分野の第一線の研究者が会し、議論することは、少なくとも積極的になされてこなかった。本シンポジウムは、両分野の研究者の相互討論を介し、両分野の国境を「融解」することにより、新規な材料や医薬品の設計、化学現象、生化学反応の解明など、計算機化学の新しい展開に寄与することを目指して開催される。是非多数の方にご来場頂き、高度情報化時代の化学の新しい姿をご覧頂きたいと願っている。

## ハイライト 多角入射分解分光法～新しい薄膜の構造解析法

【日時】12月18日(土)午後0時30分～1時15分 【会場】Akaka Falls/Iao Needle (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 1166 口頭

Use of chemometrics as a theoretical framework for development of a novel spectroscopic technique

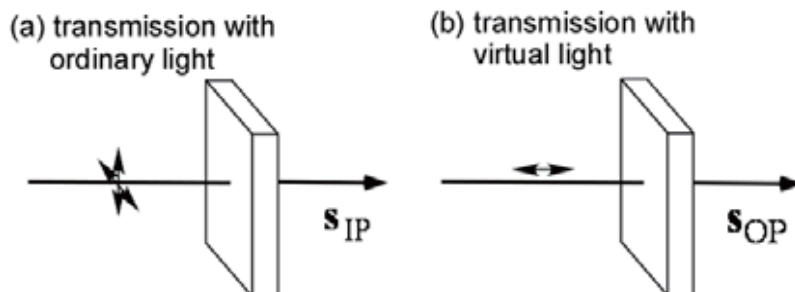
ケモメトリックスを理論的土台とした新しい分光法の開発

○長谷川健（所属）東京工業大学 大学院理工学研究科

ケモメトリックスは分析化学の一角を担う重要な分野として世界的に認識されているが、物理化学ではどうだろうか。ケモメトリックスは、多変量データを多次元のベクトルとして扱い、物性値を予測・分類する目的で利用されるというコンセプトにほとんど変化がない。また、基礎となる回帰式に含まれる“誤差項”には、ノイズやエラー程度の小さな量が格納されるという認識があった。このため“予測式”という域を超えて理論式を記述する目的で扱われることがなく、物理化学からほど遠い存在であった。

もっとも基本的な Classical Least Squares (CLS)回帰式は、検量目的で使われることは少ないが、詳しく検討した結果、測定値のうち外部変動に線形に応答する部分と、非線形に応答する部分を識別し、分離する能力を持つことに気付いた。この“線形・非線形分離”という機能を積極的に利用し、分光計測のための基礎理論を書くことを思いついた。

そのための系として、薄膜の分光測定で核となる TO および LO 関数を同時測定する原理を、縦波光概念による仮想光計測(下図(b))という考え方で構想し、CLS 回帰式で構築した。その結果、非金属基板上の薄膜について、初めて LO 関数の測定に成功し、TO 関数との独自測定も達成した。



【連絡先】 275-0012 目黒区大岡山 2-12-1 W4-13  
 電話 03-5734-2238, E-mail: ftir.guy(at)gmail.com

ハイライト 生命化学へ切り込むための計算化学と情報化学

【日時】 12月18日(土) 午後3時15分~3時45分

【会場】 Akaka Falls/Iao Needle (Sheraton Waikiki)

【講演番号】 ID 1171 口頭

Theoretical study on dipole moments of amino acid residues

アミノ酸残基の双極子モーメントについての理論研究

○三枝俊亮、相田美砂子 (所属) 広島大学 大学院理学研究科

生命の営みを支えるタンパク質の機能や活性部位を予測するために、タンパク質を構成しているアミノ酸残基の双極子モーメントは重要な役割を果たす。すなわち、個々のアミノ酸残基の双極子モーメントを求めることは、生命の機能解明にとって重要である。しかし、アミノ酸の双極子モーメントを実験的に求めることは困難であり、また、タンパク質中において多様な構造をもつアミノ酸側鎖について、双極子モーメントを計算で求めることは困難であった。そのため、これまでは、アミノ酸が、単独の状態、ある構造において示す双極子モーメントの計算値が使われてきた。「タンパク質の中のアミノ酸残基の双極子モーメント」は、求められていなかった。本研究では、 $\alpha$ ヘリックス構造を形成している、主鎖を含めたアミノ酸残基の、しかも、側鎖が多く配座をとりうることも考慮にいれ、それらの平均値として、双極子モーメントを求めることに成功した。このような双極子モーメントは、今後、生命系の機能を明らかにするためのシミュレーションに広く使われていくと考えられる。

【連絡先】 相田 美砂子 maida(at)hiroshima-u.ac.jp

## #163 Cold Molecules and Quantum Computation/Information Processes

## 冷却分子と量子計算 / 量子情報

【オーガナイザー】山下晃一（東大院工） | 百瀬孝昌（British Columbia 大） | K. B. Whaley（UC Berkeley）

【開催日】：12月15日（水）午後、16日（木）午前・午後・夜

【会場】：口頭発表 Waianae, Lanai (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

極低温領域にある分子は室温での分子とは極めて異なった挙動をすると予想され、現在、極低温領域での分子科学は物理化学分野での新しい主要研究分野として急速に進展している。革新的な実験手法の新規開発による冷却分子ガス生成のチャレンジが行われているが、依然として到達可能な温度は1ミリケルビン領域である。実験技術のさらなる進歩によりシンポジウムの開催される2010年末にはナノケルビン領域に達しているかも知れない。このような極低温での分子は全く新しい物質状態にあると考えられ、自然の対称性や基本定数の時間依存性、分子物質波干渉といった、化学や量子物理の基本的問題や種々の応用を研究する新たな場を提案する。シンポジウムでは冷却分子を創り出す実験手法、あるいは量子コンピュータや量子情報への応用に関するホットトピックス、光格子にトラップされた分子、マイクロチップにトラップされた分子による量子デバイス、冷却分子の自己集積などについて、世界の最先端で活躍中の研究者による招待講演を中心に議論する。

## ハイライト 冷却分子による量子コンピュータに向けて

【日時】12月16日（木）午前7時30分～8時

【会場】Lanai (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 201 招待講演

## Control of rovibrational states of molecules by shaped femtosecond mid-infrared pulses towards quantum computation

量子計算への応用を目指した波形整形した赤外超短パルスによる分子の振動回転状態の制御

○百瀬孝昌（ブリティッシュ・コロンビア大学化学科）

分子には極めて長い寿命の振動回転の固有状態が多数存在する。この振動回転状態を量子情報処理の基礎になる量子ビットとして活用することで、原子2準位系などでは実現不可能な多ビット論理演算をはじめとする様々な量子情報処理の可能性が広がると期待されている。しかし、分子を用いた量子情報処理技術の開発は他の手法に比べてきわめて遅れていた。我々は、波形整形した中赤外フェムト秒レーザーを用いて分子の複数の振動回転状態の重ね合わせ状態を緻密に制御することで、分子の振動回転固有状態を用いた各種量子ゲート操作を実現することが可能であることを理論的に示し、かつその制御に必要な中赤外フェムト秒レーザーの波形整形技術を開発することに成功した。また、分子を量子情報処理に応用するために必要不可欠な、周囲との相互作用を抑制した環境下での分子の空間捕捉をめざし、冷却分子の生成および光格子への捕捉技術の開発に取り組んでいる。

【連絡先】E-mail: [momose\(at\)chem.ubc.ca](mailto:momose(at)chem.ubc.ca)

## ハイライト 分子の波動関数をデザインする

【日時】12月16日（木）午後7時35分～8時5分 【会場】Lanai (Sheraton Waikiki)

【講演番号】ID 408 招待講演

## Ultrafast coherent control of ultracold molecules

極低温分子の超高速コヒーレント制御

○大森賢治（分子科学研究所）

私たちは、フェムト（ $10^{-15}$ ）秒レベルで整形したレーザーパルスでオングストローム（0.1ナノメートル）サイズの分子の波動関数をデザインすることによって、世界最速スパコンより1000倍速くナノより小さい分子コンピューターを開発することに成功した。この分子コンピューターは、Nature, ScienceDaily, EurekAlert(AAAS), PhysOrg, PopSci など各国の主要なメディアで大きく報道され、現在世界的な反響を呼んでいる。今後、分子コンピューターを連結し大規模化するためには、分子1個1個を空間的に保持する必要がある。私たちはこのために二つのアプローチを探求している。一つは液体ヘリウム温度に冷却された固体水素結晶中の分子を用いる手法である。もう一つは、レーザー冷却した極低温ルビジウム（Rb）原子を結合させた極低温 Rb<sub>2</sub>分子を光で捕捉する方法である。前者については、最近、固体水素結晶中の分子の波動関数をレーザー光を用いて観測し、これらの干渉を世界で初めて高精度で制御することに成功した。後者については、整形したフェムト秒レーザーパルスを用いて、極低温 Rb<sub>2</sub>分子を生成することに成功している。

【連絡先】E-mail: [ohmori\(at\)ims.ac.jp](mailto:ohmori(at)ims.ac.jp)



## # 171 The Nanostructure-Enhanced Photochemical Reactions

## 新しい光エネルギー変換プロセス；ナノ構造増強プラズモン光化学反応

【オーガナイザー】三澤弘明(北大) | Prashant Kamat | Ken Ghiggino | Mostafa El-Sayed

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Kahuku (Sheraton Waikiki)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

近年、二酸化炭素の排出量の増加や化石燃料の枯渇など地球規模の環境・エネルギー問題が顕在化しつつあり、それを解決する一つの方法論として光エネルギー変換システムに大きな関心が寄せられている。これらシステムの高効率化を実現するためには反応系に投入された光エネルギーを余すところなく利用できる革新的な「光反応場」を構築することが極めて重要となる。本シンポジウムでは、時間的・空間的に閉じ込められた光である局在表面プラズモンと分子/物質系と結合させる「光-分子強結合反応場」に関する研究の第一線にて世界をリードする研究者を招聘し、理論・実験・応用に関する最新の研究成果を公表・議論する。

【日時】 12月15日(水) 午前9時~9時20分 【会場】 Kahuku (Sheraton Waikiki)

【講演番号】 ID 47 口頭

Photochemical reactions on nano-engineered gold particles; 金ナノ構造による光-分子強結合反応場の創成; ○三澤弘明、上野貢生、村澤尚樹、西島喜明、横田幸恵 (所属) 北海道大学 電子科学研究所

地表に到達する太陽エネルギーの40%以上は波長800nm以上の赤外光で占められているが、赤外光を有効に光電変換する太陽電池はほとんど存在しない。高い変換効率を有する太陽電池を実現するには、赤外光を電気エネルギーに変換できる革新的な光電変換技術の開発が不可欠である。我々は、独自のナノ構造作製技術と方法論を基礎に金属ナノ構造を用いて赤外光を高効率に捕集・局在させる光アンテナの作製、および新しい原理により近赤外光を光電変換する方法論を見出した。酸化チタン単結晶上に光アンテナ構造として、金ナノロッド構造体を作製した。光電気化学測定では、金ナノロッド構造体のプラズモン共鳴スペクトルとほぼ一致する光電流アクションスペクトルが観測された。本系の内部量子効率プラズモン共鳴波長において~15%と比較的高い値を示し、光アンテナ構造による光捕集効果だけでなく、金ナノ構造が示すプラズモン増強効果が光電流の発生に寄与していることが示唆された。なお、電子ドナーを含まない電解質水溶液のみで200時間以上安定に光電流が観測されたことから、水分子から電極系の正孔への電子注入が起きているものと考えている。

【連絡先】 電話 011-706-9358, E-mail: misawa (at)es.hokudai.ac.jp

【日時】 12月15日(水) 午後2時10分~30分 【会場】 Kahuku (Sheraton Waikiki)

【講演番号】 ID 130 口頭

Protein crystallization by strong photons-molecules coupling fields photochemical reaction; 光-分子強結合反応場によるタンパク質の結晶化促進 ○奥津哲夫(群馬大院工)

光-分子強結合場を用いてタンパクの光化学反応を起こさせ、タンパクの結晶化を促進する研究に取り組んだ。タンパクを結晶化させX線結晶構造解で構造を明らかにすることで創薬に必要な情報が得られる。本研究で行ったタンパクの光化学反応が結晶化を促進させる機構について説明する。タンパクの溶液は溶解度の数十倍の濃度になっても結晶化しないことがある。この理由はタンパクが結晶化するとき分子が凝集し小さな集合体を形成しても、不安定であるために分解しやすく、臨界核が形成されないからである。光誘起結晶化とは、タンパクの光化学反応により共有結合性の安定なタンパクダイマーを形成させ、臨界核の形成を促すものである。本研究ではタンパクの光励起を光-分子強結合場を用い、可視光の多光子励起で行った。タンパクを励起するためには紫外光を必要とするが、紫外光照射によりタンパクは変性する問題がある。本研究では光-分子強結合場によるマイルドな励起により、タンパクをできる限り変性させず、効率よく結晶化に導くことが可能となる方法を開発した。光-分子強結合場として、一辺が300nmのチェッカーボード状の金ナノ構造を用いた。

【連絡先】 電話 0277-30-1242, E-mail: okutsu(at)chem-bio.gunma-u.ac.jp

## # 5-212 Frontiers of State-to-State Dynamics

## 状態から状態への化学の最前線

【オーガナイザー】: Cheuk Y. Ng (UC Davis) | Arthur Suits (Wayne State U) | Scott Kable | Kopin Liu (IAMS) | 鈴木俊法 (京大・理研) | Xueming Yang (DICP)

【開催日】: 12月18日(土) — 19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 Nihau (Sheraton Waikiki)

ポスター会場:

## 展 望

化学反応を自在に操ることは化学者の夢である。さらに人類に有益な物質を選択的に生成し、環境負荷の少ない文明を実現することは人類に共通の命題でもある。しかし、温度、圧力、濃度などの巨視的な条件を調整することでは十分な反応制御を行うことは難しかった。分子には、反応しやすい状態と反応しにくい状態がある。そこで、分子の状態を統計熱力学統計的に分布させるのではなく、ある特定の状態に分布させれば、反応をより効率的に起こさせることが可能となる。また、このような研究は、従来反応条件の乱雑さのために隠されてきた、化学反応機構の詳細を明らかにし、より優れた反応制御法の開発のためにも必須である。近年の実験技術の高度化により、例えばレーザーを用いて分子を特定の電子状態や振動状態に分布させ、反応物のある状態から反応を開始させ、生成物のどの状態になるかを徹底的に研究することが可能となった。本シンポジウムの5つのセッションでは、この状態から状態への化学を研究する第一線の研究者が一堂に会し最新の成果を議論する。

## ハイライト 状態から状態への化学の最前線

【日時】 12月19日(日) 午後7時30分~7時50分 【会場】 Nihau (Sheraton Waikiki)

【講演番号】 ID 1569 口頭

## Time-resolved photoelectron imaging on pyrazine using a femtosecond UV laser and a VUV free-electron laser

フェムト秒紫外レーザーと真空紫外自由電子レーザーを用いたピラジン分子における時間分解光電子イメージング

○小城吉寛<sup>a</sup>・Suet Yi Liu<sup>a,b</sup>・藤貴夫<sup>a</sup>・西澤潔<sup>a,b</sup>・堀尾琢哉<sup>c</sup>・水野智也<sup>a</sup>・高口博志<sup>a,d</sup>・永園充<sup>e</sup>・富樫格<sup>e,f</sup>・登野健介<sup>e</sup>・矢橋牧名<sup>e</sup>・仙波泰徳<sup>f</sup>・大橋治彦<sup>e,f</sup>・木村洋昭<sup>e,f</sup>・石川哲也<sup>e</sup>・鈴木俊法<sup>a,c</sup>(所属) 理研基幹研<sup>a</sup>・台湾交通大<sup>b</sup>・京大<sup>c</sup>・広島大<sup>d</sup>・理研 XFEL<sup>e</sup>・JASRI<sup>f</sup>

日本が国家基幹技術として建設を進めている X 線自由電子レーザー(XFEL)は、化学反応のスナップショットを原子分解能で追跡することを可能にする夢の光源である。本研究では、XFEL 開発のための試験器として建設された極短紫外自由電子レーザーを用い、さらにフェムト秒レーザーと同期を取ることで、化学反応途上の分子に起こる電子状態変化を追跡した時間分解光電子イメージング (TRPEI) の報告である。分子を第一の紫外光パルスで光励起し、遅延時間を設けた第二の真空紫外光パルスで分子をイオン化し、放出電子の速度・角度分布から分子の電子・振動・回転状態の時間発展を観測した。第一の実験では、ポンプ光 324 nm を用い、ピラジンを一重項状態  $S_1$  の振動基底準位付近に励起し、プローブ VUV 光との遅延時間を変化させイオン化信号および光電子イメージを測定した。その結果、 $S_1$  から三重項状態  $T_1$  への電子スピン反転 (項間交差) に相当する時定数 114 ps の時間発展を明瞭に観測した。第二の実験では、ポンプ光 260 nm で  $S_2$  の振動基底準位付近を励起した。 $S_2$  分子はポテンシャル曲面の円錐交差を経由して  $S_1$  へ約 23 fs で内部転換し、続いて約 22 ps で  $S_0$  へ緩和した。本研究は、自由電子レーザーと波長可変フェムト秒レーザーを用いた、初めての時間分解光電子分光であり世界的に注目を集めている。

【連絡先】 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1 理化学研究所鈴木化学反応研究室

電話 048-467-1434, E-mail: ogi(at)riken.jp

## # 228 Solid-State NMR Methods and Applications in Inorganic Materials

### 無機物質の固体 NMR 法とその応用

【オーガナイザー】:

Scott Kroeker (Univ Manitoba, CA) | Jerry Chan | Sophia Hayes | 竹腰清乃理 (京大)

【開催日】: 12月18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 Waianae (Sheraton Waikiki)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

医学で診断に用いられている MRI の基礎となっている核磁気共鳴 (NMR) 法は化学の分野ではこれまで主に有機化合物やタンパクなどの生体物質の構造や運動の測定に用いられてきた。そのような測定には水素や炭素の同位体 (炭素 13) などが用いられてきたが、近年ではアルミニウムやホウ素など無機物質で重要な役割を果たしている元素の NMR 測定を行うことが可能になってきた。このシンポジウムでは近年進歩の著しい固体無機物質試料を対象にした NMR 測定法・技術と応用の研究発表を行う。測定対象で身近な物としてはガラスや携帯電話やノートパソコンのリチウム電池に使われる材料や石油の改質に使われるゼオライトなどがある。

ハイライト 燃料電池材料の欠陥判定に新手法開発

【日時】 12月18日(水) 午前9時30分~10時10分

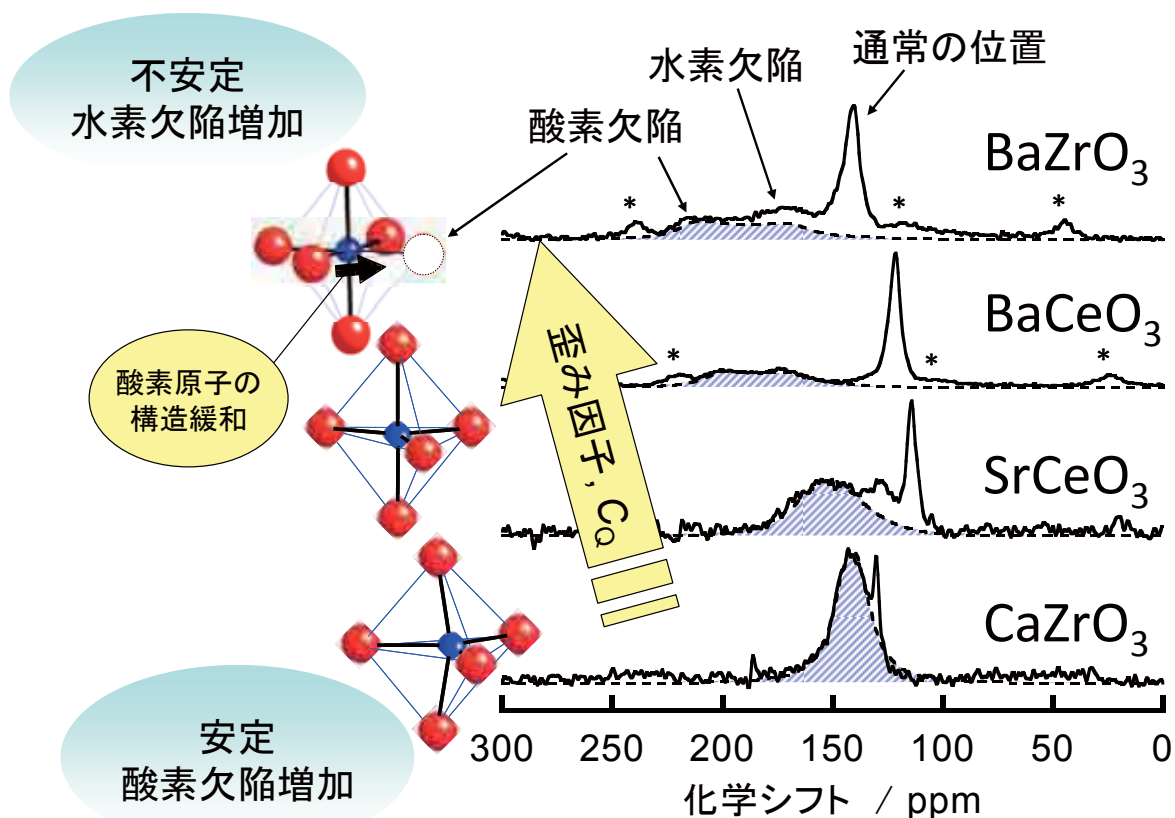
【会場】 Waianae (Sheraton Waikiki)

【講演番号】 ID: 1071 口頭

Solid-state NMR analysis of defects in energy conversion materials

エネルギー変換材料の固体 NMR による欠陥の分析

○前川 英己、及川 格、安東 真理子  
(所属) 東北大学・大学院工学研究科



固体酸化物型燃料電池(SOFC)が低温で作動できると、寿命やエネルギー効率の点でさらに低炭素化に有利であると考えられている。希土類添加ペロブスカイト型酸化物は、低温で高いプロトン移動度があり SOFC の低温作動で注目される。しかし、イオン移動度がまだ十分高くなく、性能向上のメカニズムを解析する手法が限られていた。今回、JST CREST「材料開発に資する高感度固体 NMR 法の開発」、代表：竹腰教授(京都大学)で、固体高分解能 NMR 法の高感度化プロジェクトの成果により、セラミックスの欠陥判定に新手法が開発された。酸化スカンジウムを添加したペロブスカイト材料において、Sc-45 核の固体高分解能 NMR から、酸素欠陥、水素欠陥の分離・定量が可能であることがわかった。また、特に酸素欠陥の歪みの度合いとその安定性に密接な関係が見出された。これにより、セラミックス材料の電気特性評価のための材料設計指針に新しい解析手法が提供されたといえる。

【連絡先】 980-8579

仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-02

東北大学・大学院工学研究科・マテリアル・開発系 前川英己

電話 022-795-3763, E-mail: [maekawa@material.tohoku.ac.jp](mailto:maekawa@material.tohoku.ac.jp)



# 5-254 **Advanced Linear and Non-Linear Vibrational Spectroscopy****最先端の線型および非線型振動分光学**

【オーガナイザー】：岩田耕一（学習院大） | 古川行夫（早稲田大） | S. A. Asher（ピッツバーク大） | David Phillips（香港大）

【開催日】：12月16日（木）午前・午後、17日（金）午前・午後・夜

【会場】：口頭発表 Waianae (Sheraton Waikiki)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

**展 望**

ラマン分光法と赤外分光法（「振動分光法」）は、分子の構造とその動きを調べるときの最も有力な方法の一つとして長い間利用されてきた。一方で、振動分光法は日進月歩の進歩を遂げている「最新の」分光法でもある。今日でも新たな測定原理や測定手法が次々と提案され、生きた細胞やたんぱく質から分子素子、短寿命分子種に至るまであらゆる物質や現象がその測定対象になっている。このシンポジウムは、日々進化を続けている振動分光法に関する最新の研究成果について学び、振動分光法の今後の発展の方向を議論するための最良の機会になるであろう。

**ハイライト ラマン分光でみる極微の世界—酵母細胞の中での分子の振動**

【日時】12月17日（金）午前8時～8時40分 【会場】Waianae (Sheraton Waikiki)

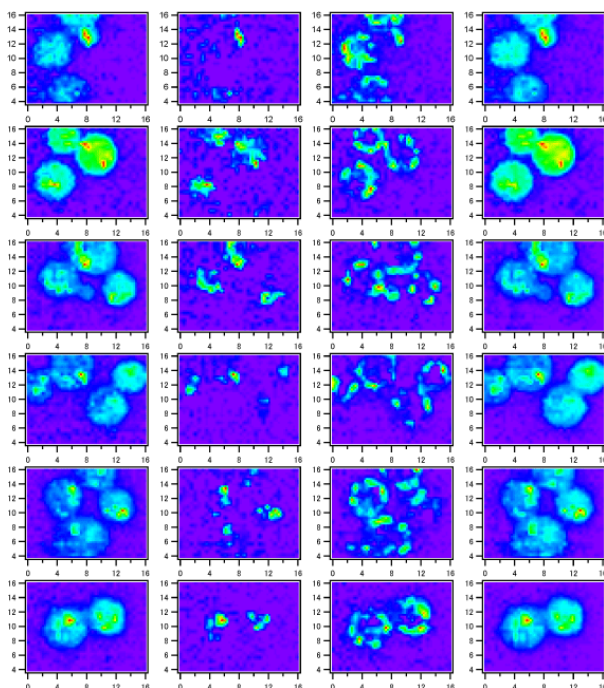
【講演番号】ID 531 口頭

**Raman spectroscopy to see what were unseen**

見えなかったものを見るラマン分光

濱口宏夫（所属）東京大学大学院理学系研究科化学専攻

これまで見るができなかったものを見ようとする知的探求心は自然科学の原点であり、そのための新しい方法を生み出すことは、常に自然科学の最重要課題である。この講演では、未知の分子世界に光をあてるラマン分光学の最先端の研究成果から、1) ハイパーラマン散乱の分子近接場効果によるナノメートル空間分解振動分光、2) 線形および非線形顕微ラマン分光イメージングによる生きた細胞の時空間その場解析、を紹介する。顕微ラマン分光によって初めて見るできるようになった生きた出芽酵母生細胞の分子振動イメージの例を以下に示す。



【連絡先】 E-mail: hhama(at)chem.s.u-tokyo.ac.jp

## ハイライト ラマン分光でみる極微の世界—1 個の分子の振動運動

【日時】12月16日(木) 午前9時10分~9時40分

【会場】Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

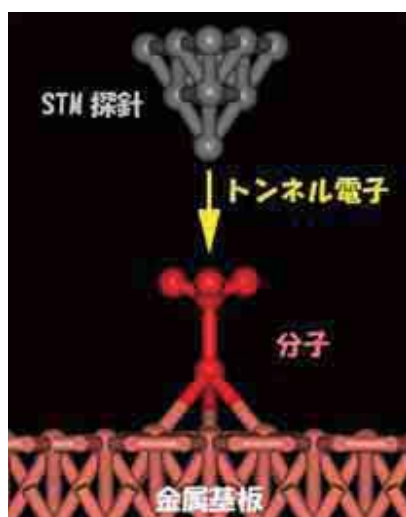
【講演番号】ID 533 口頭

Single-molecule vibrational spectroscopy with STM

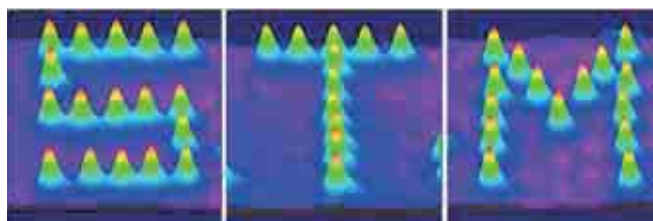
STM を用いた単一分子の化学

○ 金有洙(所属) 理化学研究所 Kim 表面界面科学研究室

分子一つひとつを観察し、まるで化学式を描くように化学反応を引き起こす。しかしながら、分子単位での反応を実際に目を見た人は誰もいない。化学反応の究極の単位である分子レベルで化学反応を実際に見たいという欲望は、ある意味人間の本能的なものであるのかもしれない。しかしそれを実現するためには、「分子を見るための技術」、「化学反応を一つの分子に起こさせる技術」、そして「生成された反応物を分析する手法」が関連して確立することによって、初めて可能になる。本研究では、原子レベルの空間分解能を持つ走査トンネル顕微鏡 (STM) をツールとして用いて、これらの高度な技法をすべて組み合わせることに成功した。STM は、個々の分子を実空間でイメージするだけでなく、金属表面に吸着した1つの分子を空間的に選別し、STM 探針から分子に電子を供給することができる。特に、反応誘起や解析手法に分子を構成する原子同士が伸び縮みする“分子振動”を巧みに利用することで、究極の極微の世界での化学反応と化学分析が可能になった。本講演では、STM を用いることにより、どのように個々の分子を動かしたり、反応させたり、またその分子の化学的特性を明らかにしたのかについて、いくつかの実例を挙げながら詳細に紹介する。



金属表面上の単一分子と  
STM の模式図



銅表面に CH<sub>3</sub>S 分子を並べて描いた文字

【連絡先】 E-mail: ykim(at)riken.jp

## #088 Flavonoids, Synthesis toward Functions

## フラボノイド — 機能性研究を目指しての化学合成

【オーガナイザー】: 吉田久美 (名古屋大学) | Allan Kozikowski, (University of Illinois)

| Biao Yu, (Shanghai Institute of Organic Chemistry)

【開催日】: 12月16日(木) 午後、17日(金) 午前、午後

【会場】: 口頭発表 Regency III (Royal Hawaiian)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

フラボノイドは植物に含まれるポリフェノール成分で、日々我々が食している植物性食品にも含まれる。古くから生薬や民間伝承薬、漢方薬の成分としても利用されており、現在では一万種類以上の様々な構造のフラボノイド化合物が報告されている。特に最近では、茶のカテキン、ブルーベリーの色素アントシアニンなどをはじめとして機能性食品成分、あるいは創薬のリード化合物としても再認識され、構造や合成化学研究、生合成やその調節・蓄積機構などの生物学研究も展開されると共に、遺伝子工学を利用した植物成分の改変への応用まで実現するにいたっている。従来は、天然の植物から抽出して単離精製するしか方法がなかったため、供給量や構造多様性に問題があり、機能性研究についてもその範囲が制限されていた。しかし現在では、化学合成研究の進展も目覚ましく、配糖化フラボノイド類、アントシアニン類、プロシアニジン類などを自在に合成できるようになってきた。本シンポジウムでは、フラボノイド類の合成化学ならびに構造化学研究を基盤にして、今後の様々な機能性研究の発展が期待される生合成、機能性、さらには、遺伝子工学による植物の改変もカバーし、今後のフラボノイド化学の方向を明確にする目的で行う。

## ハイライト カテキンをリードとする抗インフルエンザ薬

【日時】12月16日(木) 午後1時40分~2時 【会場】Regency III (Royal Hawaiian)

【講演番号】ID #71 口頭

Structure and anti-influenza virus activity relationship of catechin derivatives

カテキン誘導体の構造と抗インフルエンザウイルス活性

○開発邦宏 (所属) 大阪大学 産業科学研究所 T. Daidoji, T. Ose, T. Nakaya, N. Kato  
現在、Aノイラミニダーゼ (NA) 阻害剤 (タミフル) は最も一般的に用いられる抗インフルエンザ薬であるが、すでに、季節インフルエンザウイルスや高病原性鳥インフルエンザ (H5N1) ウイルスで耐性が見つかっている。茶葉の成分であるエピガロカテキンガレート (EGCG) は抗ウイルス活性を持つ。そこで、これをリードに、リパーゼを用いてEGCG-脂肪酸モノエステルを合成し、その活性を調べた。脂肪酸のアルキル側鎖長に依存した、インフルエンザウイルスA型/PR8/34/ (H1N1) に対する抑制効果が認められた。EGCG-monopalmitateは、タミフル耐性インフルエンザウイルスにも活性を示した。

【連絡先】kunihirosanken(at)osaka-u. ac. jp

## ハイライト アントシアニンの合成法

【日時】12月16日(木) 午後3時~3時20分

【会場】Regency III (Royal Hawaiian)

【講演番号】ID #75 口頭

Efficient transformation of flavonol 3-glycoside to the corresponding anthocyanin via the flavenol by Clemmensen reduction followed by air oxidation

フラボノール配糖体の金属還元と空気酸化による効率的なアントシアニンへの変換

○近藤忠雄、吉田久美 (名古屋大学・院・情報科学) 尾山公一 (名古屋大学・物国セ)

アントシアニンは花色素として知られるが最近、視力改善や抗ガン、抗糖尿病効果なども知られてきた。これまでは天然の植物からしか供給できず、化学合成が求められていた。多量に植物から取り出すことのできるフラボノールを原料にして、金属還元と空気酸化反応により、容易に収率よく、かつ大量にアントシアニンを合成できる方法が見つかった。

【連絡先】kondot(at)info.human.nagoya-u. ac. jp

## #214 Fungi and Mushrooms: Ecology, Chemistry and Agricultural Relevance

## カビとキノコ : エコロジー, 化学, そして農業との関連

【オーガナイザー】: 河岸洋和 (静岡大) | M. S. C. Pedras (University of Saskatchewan) | J-P. Kim (KRIBB)

【開催日】: 12月17日(金) 午後、18日(土) 午前・

【会場】: 口頭発表 Regency II (Royal Hawaiian)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

キノコを含めた菌類は、医薬、農林業、健康・食品産業などに貢献しうる高いポテンシャルをもつ天然有機化合物の宝庫である。これまでも、多くの菌類由来化合物が人類に貢献してきた。このシンポジウムでは、これらカビやキノコの産生する化合物の多様性、エコロジー、化学、そして農業、医療への展開に関して、多くのトピックスを招待講演、一般講演、ポスターセッションで発表、議論される。以下にその例を挙げる。

- 1) 特異な薬理活性をもつ物質の精製、構造決定、生物活性、活性発現機構 (薬になりうる物質の研究)
- 2) 植物病原菌が代謝する毒素の精製、構造決定、生物活性、活性発現機構 (この解明によって植物の病気を防ぐ)
- 3) 菌に菌が寄生する現象に関わる物質の精製、構造決定、生物活性、活性発現機構 (菌類の成長を制御する農薬等の開発に繋がる)
- 4) 植物の成長を促進する物質の精製、構造決定、生物活性、活性発現機構、そして農業への応用 (この物質を使って作物の増産を図る)
- 5) 毒キノコの毒成分の精製、構造決定、生物活性、活性発現機構 (不可能だったキノコ食中毒の治療法の開発に繋がる)

ハイライト キノコって本当に体にいいの？

【日時】12月18日(土) 午前9時40分～10時20分 【会場】Regency II (Royal Hawaiian)

【講演番号】ID 249 口頭

Characterization of functional mushrooms for aging society:

The anti-androgen effect and preventative effect of osteoporosis by *Ganoderma lucidum*.

高齢化社会に対応した機能性キノコの特性解明 ～マンネンタケの前立腺肥大症および骨粗しょう症予防改善効果～

○近藤隆一郎、劉潔、清水邦義 (所属) 九州大学 大学院農学研究院

我が国は、超高齢化社会へ突入し、生活習慣病や高齢性疾患の罹患率が増加しており、国民に健康不安が広がっています。医療費の増大とともに、医療経済の破綻が予想され、安価な機能性食品を用いた代替医療法の開発が重要視されています。機能性食品としての素材は、様々なものが提案・開発されていますが、古来からの服用・食経験の豊富さ、また、その独特な味・香りという観点からも、キノコ類は、他の素材とは一線を画する魅力的な素材です。

地球上には、数千種にも及ぶキノコが自生し、一部のキノコが食品素材(機能性食品)として、また、薬品開発素材として注目されています。キノコが示す薬理効果として、抗腫瘍活性、免疫賦活活性、抗炎症作用、血糖降下作用、血圧降下作用、コレステロール降下作用、痴呆改善作用、肥満抑制効果などが知られています。ただ、これまで必ずしも十分な科学的根拠なしに利用されてきた経緯があり、現在十分な科学的エビデンスに基づいた機能性の検証が求められています。

我々は、加齢により引き起こされる高齢性疾患である、前立腺肥大症及び骨粗しょう症の改善・予防に有効な天然素材をキノコに求め、スクリーニングならびに伝承情報を駆使し、



霊芝 (*Ganoderma lucidum*, マンネンタケ) が有効であることを見いだしました。本講演では、霊芝の予防改善効果を見いだすに至った経緯から、有効成分、作用機構、臨床試験に関する現在までの知見について概説します。

【連絡先】 812-8581 福岡市東区箱崎 6-10-1 九州大学農学研究院 環境農学部門  
電話 092-642-2811, E-mail: ryukondo(at)agr.kyushu-u.ac.jp

ハイライト ジャガイモ疫病を化学で解明する

【日時】 12月17日(金) 午後1時40分～2時20分 【会場】 Regency II (Royal Hawaiian)

【講演番号】 ID 145 口頭

Alpha hormones, the Mating Factors of the Phytopathogen *Phytophthora*

$\alpha$  ホルモン: 植物疫病菌の有性生殖誘導因子

○小鹿 一<sup>1</sup>、Shylaja Devi Molli<sup>1</sup>、戚 建華<sup>1</sup>、金沢春海<sup>1</sup>、毛 海萌<sup>1</sup>、矢島 新<sup>2</sup>、坂神洋次<sup>1</sup>

(所属) <sup>1</sup>名古屋大学 大学院生命農学研究科、<sup>2</sup>東京農業大学 応用生物科学部

疫病菌 (*Phytophthora* 属の糸状菌のこと) はジャガイモやトマトなどの重要農作物に感染して甚大な被害を与える最重要農業病害の1つで、ジャガイモ疫病による損害は年間数千億円にのぼる。疫病菌は無性生殖により急激にまん延するが、2つの交配型 (A1 と A2、一種の性) が出会った時には、有性生殖 (有性器官の形成と融合) に繁殖戦略を切り替える。有性生殖でできた胞子は、耐久性と遺伝的多様性を兼ね備えている。この有性生殖には誘導因子「 $\alpha$  ホルモン」 (A1 交配型が分泌する  $\alpha 1$  と A2 交配型が分泌する  $\alpha 2$ ) が関わっているが、その正体は長年の未解決問題であった。

我々は 2005 年、2 トン近い A1 交配型の培養液から  $\alpha 1$  を取り出し化学構造の解明に初めて成功した。今回は残るもう 1 つの因子  $\alpha 2$  の解明に挑戦し、A2 交配型の培養液から  $\alpha 2$  を精製、その化学構造を解明した。 $\alpha 2$  の構造は  $\alpha 1$  に似ていたが、 $\alpha 2$  は A1 交配型にのみ、 $\alpha 1$  は A2 交配型にのみ有性生殖を誘導できる。さらに今回、両ホルモンがどのように作られるのか (起源)、疫病菌の異なる種で共通に利用されているのか (普遍性) など、総合的解析を行った。 $\alpha$  ホルモンの解明は今後、疫病菌の有性生殖の分子メカニズムの全容解明やその繁殖コントロール技術の開発へのヒントを与えてくれるであろう。



疫病菌の有性胞子 (卵胞子)、直径は約 30 $\mu$ m

【連絡先】 464-8601 名古屋市千種区不老町 名古屋大学大学院生命農学研究科  
電話 052-789-4284, E-mail: Ojika(at)agr.nagoya-u.ac.jp

## #7-41 Frontiers in Peptide Chemistry: Synthesis and Applications

## ペプチド化学のフロンティア：合成と応用

【オーガナイザー】: William D. Lubell, Steven L. Castle, Shiroh Futaki, Craig A. Hutton, Jeffery W. Kelly, Dawei Ma, A. Ian Smith, John C. Vederas

【開催日】: 12月18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 THEATRE (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

天然由来のペプチドの合成や構造活性相関に加え、医薬、触媒、ナノテクノロジーなどの分野への応用の期待から、ペプチドに関連した様々な新しいアプローチが近年紹介されている。本シンポジウムでは、特異構造を持つペプチド天然物の全合成、アミノ酸やペプチドの新規合成法の開発とその応用、非天然骨格を導入したペプチドあるいはその模倣体の構造と機能設計、ペプチドの病態との関連や治療に向けた可能性、新しい機能性素子・機能性材料としての展開など、広くペプチドに関わる最先端の話題をとりあげ、ペプチド科学の新たな可能性を探る。

ハイライト FIT システム-次世代薬剤候補創製法の開発-

【日時】12月18日(土) 午前9時25分~9時55分 【会場】310 THEATRE (Convention Center)

【講演番号】ID 693 口頭

Flexible *in vitro* translation system for development of non-standard peptide inhibitors

特殊ペプチド阻害剤開発のための FIT システム

○村上裕<sup>1</sup>・後藤佑樹<sup>2</sup>・菅裕明<sup>2</sup> (所属)<sup>1</sup>東京大学大学院総合文化研究科・<sup>2</sup>同理学研究科

近年、様々な天然物やその誘導体がライブラリ化され、薬剤候補の創製に用いられている。しかし大規模な化合物ライブラリから生理活性化合物をスクリーニングするには多くの時間と労力が必要であり、迅速で簡便な薬剤候補創製法が求められている。本講演では、フレキシブル無細胞翻訳系(Flexible *in vitro* translation system, FIT system)を用いて特殊ペプチドを翻訳合成し、“増幅可能な化合物ライブラリ”を構築する方法について発表する。FIT システムは、tRNA をアシル化する RNA 触媒を用いることで非蛋白質性アミノ酸を遺伝暗号に入れ込んだ無細胞翻訳系である。我々は、FIT システムと mRNA 提示法を組み合わせ 10 兆種類の特異環状ペプチドを合成し、このライブラリの中から VEGFR2 を阻害する特殊ペプチドを創製した。VEGFR2 は血管新生に関与する蛋白質であり、得られた特殊環状ペプチドは悪性腫瘍を兵糧攻めにする薬剤候補になると期待される。FIT システムは、様々な薬剤標的に対し迅速に特殊ペプチド阻害剤を創製できると考えられ、次世代の薬剤候補創製法として期待される。

【連絡先】hmura(at)rcast.u-tokyo.ac.jp

ハイライト 合成ペプチドの自己集合によりウイルスの殻構造を構築することに成功

【日時】12月18日(土) 午後3時20分~3時50分 【会場】310 THEATRE (Convention Center)

【講演番号】ID 746 口頭

Creation of peptide nanocapsules based on viral self-assembly

ウイルス自己集合にもとづくペプチドナノカプセルの創製

○松浦和則 (所属)九州大学大学院工学研究院応用化学部門

球状の植物ウイルスから遺伝子を除いた殻(キャプシド)構造は、決まった大きさのナノ空間をもつことから、ナノ物質の反応器やキャリアーとして利用する研究が国内外で盛んに行われているが、これまで、ウイルスキャプシド構造をデザインして、化学合成により構築する戦略はなかった。本研究では、直径 33nm の植物ウイルスの一種であるトマトブッシュスタントウイルス(TBSV)の内部骨格であるβ-アニュラス(β-Annulus)構造に着目した。このβ-アニュラスペプチド(24残基)を合成し、25°Cにて水に溶かしたところ、約40nmの中空のウイルスキャプシド構造が形成されることを明らかにした。また、小角X線散乱(SAXS)測定により、中身の詰まった剛体球の集合構造ではなく、中空構造であることが証明された。ウイルスの殻構造を簡単なペプチドで構築できたことから、様々な機能性ウイルスキャプシドを人工的に創成する道が拓けたと言える。今後、このペプチドからなるナノカプセルに適切な化学修飾を施すことにより、ナノ物質合成のための反応器や、医薬品のキャリアー、人工ワクチンを創成するための足場材料としての応用が期待できる。

【連絡先】ma2ra-k(at)mail.cstm.kyushu-u.ac.jp

## #58 Advances in Solid-State NMR of Biological Molecules

## 生体分子の固体 NMR—最前線

【オーガナイザー】：内藤 晶（横浜国大） | Michele Auger (Laval U.) | Ayyalusamy Ramamoorthy (U. of Michigan) | Frances Searovic (U. of Melbourn)

【開催日】：12月15日（水）午前・午後、16日（木）午前・午後、17日（金）午前

【会場】：口頭発表 306B (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

固体NMRは生体分子の構造と機能の相関を研究するのに重要な方法となってきた。固体NMRから得られる精密原子間距離情報と化学シフトの情報を組み合わせて生体分子の立体構造を求める研究が今後発展していくと期待できる。固体NMRでは磁場に配向する試料を用いて分子の配向情報から生体分子の立体構造を決定する試みもなされている。この方法で抗菌ペプチドや抗生物質ペプチドの膜結合構造が決定されている。固体NMRでは技術面での進歩も著しい。最近電子スピンの分極を核スピンの移す Dynamic Nuclear Polarization (DNP)により感度を通常100倍まであげることが可能になりつつある。また、検出器 (Probe) を極低温に下げて熱雑音を下げ、格段に感度を向上する方法が開発されている。このシンポジウムではこれら生体分子の固体NMRに関する最前線について議論する。

## ハイライト NMRの感度向上の最前線

【日時】12月15日（水）午後3時15分～3時45分 【会場】306B (Convention Center)

【講演番号】ID 114 口頭

## Sensitivity enhancement in NMR

## NMRの感度向上

○ 竹腰清乃理（所属）京都大学 大学院理学研究科

NMRの感度を向上する2つ方法を開発した。1つの方法では Cryo-coil マジック角回転 (MAS)プローブを開発し、coilの温度を $\sim 9\text{K}$ まで下げて、室温の試料のMASの回転数を8 KHzに設定することに成功した。この条件で4倍の感度向上を達成することができた。この装置を開発する段階で、低温で作動する Duplexerを開発した。さらに新規のシムcoilの開発を行った。プローブヘッドに巻かれたシムcoilからの、誘導磁場の強さを変えることで、回転軸と静磁場のなす角度を正確にマジック角に調整することが可能になった。もう1つの方法は共分散の統計処理を行って感度を向上する方法である。本発表ではこの共分散を用いて2次元異種核相関NMRスペクトルを解析する例について議論する。

【連絡先】E-mail: takeyan(at)kuchem.kyoto-u.ac.jp

## ハイライト 生体分子構造解析の最前線

【日時】12月16日（木）午前8時40分～9時10分 【会場】306B (Convention Center)

【講演番号】ID 169 口頭

## SSNMR investigation of organic molecules in lipid bilayers: application to amphotericin B and lipid rafts.

2分子膜中の有機分子の固体NMRによる研究：amphotericin Bとlipid raftへの応用。

○ 松森信明<sup>1</sup>、梅川雄一<sup>1</sup>、山口敏幸<sup>1</sup>、前田佳子<sup>1</sup>、大石徹<sup>2</sup>、村田道雄<sup>1</sup>（所属）<sup>1</sup>大阪大学大学院理学研究科、<sup>2</sup>九州大学大学院理学研究科

抗真菌剤であるアンフォテリシン B (AmB)は真菌細胞膜中のエルゴステロール (Erg)とともに生体膜中でイオンチャネル会合体を形成し、抗真菌性活性を示すと考えられているが、AmB-Erg間相互作用を直接観測した研究はない。そこで、<sup>2</sup>H NMRを用いてErgの運動を観測したところ、AmBの添加により運動性が減少したことから、Erg-AmB相互作用が確認できた。また、AmB-Erg間でC-F REDORによるC-F原子間距離を測定した結果、従来想定されていなかったAmBとErgが逆平行で会合している構造の存在も明らかになった。次にスフィンゴミエリン (SM)とコレステロール (Cho)によって形成される脂質ラフトをSSNMRで研究した。REDOR距離測定によるSM/SMおよびSM/Choの分子間相互作用解析および<sup>2</sup>H NMR等を用いたSMの構造解析から、脂質ラフト形成の構造基盤を議論する。

【連絡先】E-mail: matsmori(at)chem.sci.osaka-u.ac.jp

## #119 Gas-Sensor Proteins/Enzymes: Molecular Mechanism of Gas Sensing and Intra-Molecular Signal Transduction

## ガスセンサー蛋白質と酵素：ガス受容と分子内信号伝達の分子機構

【オーガナイザー】：清水透（東北大）| Ruma Banerjee (U. Michigan) | Daniel Peet (U. Adelaid)

【開催日】：12月16日（木）午前・午後

【会場】：口頭発表 305B (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

硫化水素( $H_2S$ )ガス、一酸化酸素( $CO$ )ガス、及び一酸化窒素( $NO$ )ガスは毒ガスとして知られている。しかし、最近の研究によると、これらのガスは生体にとって極めて重要な働きをすることがわかってきた。例えば、血圧調整、血管や筋肉の機能の制御、男性機能の制御、脳の機能の制御などにこれらのガスの存在が重要な働きをすることが明らかになってきた。これらのガスは蛋白質/酵素の表面と相互作用し、又蛋白質/酵素が含む鉄などの金属とも相互作用する。ガスはまず蛋白質/酵素内のこれらのガス受容器と相互作用し、受容器の構造変化が信号となり、その信号が蛋白質/酵素の機能部位に伝達され、DNAとの結合や触媒反応のスイッチが入ったり切られたりする。酸素( $O_2$ )ガスも酵素内の鉄などと相互作用して同様な働きをすることが明らかになってきた。本シンポジウムでは、アメリカ、日本、シンガポール、及びオーストラリアから、これらのガスセンサー蛋白質/酵素の機能の研究で最先端の成果を挙げている世界的に著名な研究者により、ガス受容と分子内信号伝達の分子機構について最新の発表が行われる。

ハイライト 硫化水素の重要な生体反応：新規ガス性神経伝達物質としての硫化水素

【日時】12月16日（木）午後3時10分～3時40分 【会場】305B (Convention Center)

【講演番号】ID 257 口頭

Production, release and functions of hydrogen sulfide

硫化水素の生成、放出、及びその機能

○ 木村英雄 （所属）国立精神・神経医療研究センター

硫化水素は卵の腐敗臭を発する強力な毒ガスである。その毒性については300年前から良く研究されているが、生理活性物質としては考えられていなかった。硫化水素は NMDA 受容体を活性化し、記憶のモデルとして知られている LTP の誘導を促進することを1996年に報告した。さらに、硫化水素がグリア細胞にカルシウムウェーブを誘起する事を見出し、シナプス調節への関与の研究を行っている。また、新しく、硫化水素が神経細胞内のグルタミン酸濃度を上昇させてグルタミン酸毒性から神経細胞を保護することを見出した。この硫化水素を合成する酵素であるシスタチオニン-βシンターゼ(CBS)は脳内のラジアルグリア/アストロサイトならびに活性化アストロサイトに特異的に発現していることを明らかにした。これらの結果は、CBSが脳神経系の分化・発達ならびに機能修復にとって重要な役割を演じていることを示唆すると共に、ラジアルグリア/アストロサイト系譜細胞がホモシステイン代謝異常に関わる神経管形成不全やアルツハイマー病、パーキンソン病といった精神・神経疾患治療の標的細胞となる可能性を示した点で極めて興味深い。

【連絡先】〒187-8502 東京都小平市小川東町4-1-1

国立精神・神経センター 神経研究所 神経薬理研究部部長 木村英雄

電話 042-346-1725, E-mail: kimura(at)ncnp.go.jp



## # 129 Bioorganic Reaction Mechanisms

## 生物有機化学および酵素反応機構

【オーガナイザー】: John P. Richard (University at Buffalo, USA) | 平竹 潤(京大化研) | Jeffrey W. Keillor (Univ. of Montreal, Canada)

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後・夜、 18日(土) 午前・午後

【会場】: 口頭発表: 307AB (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

選択的かつ強力な酵素阻害剤は、医薬シードとして有用な化合物である。とりわけ、抗生物質の効かない多剤耐性菌が問題になっている今日、新たな標的(酵素)に対する新たな化合物(抗生物質)の開発は喫緊の課題である。

本シンポジウムは、主として酵素の反応機構を議論するが、大きく3つのカテゴリーに分けられる。まず1つは、上記のような医薬を指向した酵素阻害剤の開発を念頭に置き、病態の原因となっている酵素の反応機構や立体構造を明らかにし、それにもとづいて阻害剤の分子設計や医薬としての開発を行うもの。パーキンソン病、アルツハイマー病、ハンチントン病などの神経変性疾患、多剤耐性の結核菌、骨粗鬆症の原因酵素などの例が多い。2つめは、酵素の優れた反応加速能力がどこから生まれるのか、酵素の「仕組み」を純粋に化学的な観点から明らかにしようとする極めて基礎的な研究。3つめは、酵素の改変とスクリーニングを通して、酵素の活性がどのようにして生まれてきたか、その進化上のオリジンを探り、既存の酵素から異なる活性をもった酵素を創製する、いわば酵素の起源に迫るような基礎研究である。興味深いトピックスとして、病原菌の多剤耐性 = 特定の酵素 (resistance enzyme) による抗生物質の無能力化について、細菌のゲノムが解読され、それら酵素の構造や機能を系統的に調べることができるようになったことである (Genomic enzymology)。

ハイライト 強固な C-F 結合を酵素はどうやって切断するのか?

【日時】 12月17日(金) 午後7時~9時00分

【会場】 Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

【講演番号】 ID 568 ポスター

Theoretical study on enzymatic C-F bond activation by fluoroacetate dehalogenase

フルオロ酢酸デハロゲナーゼによる C-F 結合の酵素的活性化に関する理論的研究

○ T. Nakayama<sup>1</sup>; T. Kamachi<sup>1</sup>; O. Shitamichi<sup>1</sup>; K. Jitsumori<sup>2</sup>; T. Kurihara<sup>2</sup>; N. Esaki<sup>2</sup>; K. Yoshizawa<sup>1</sup> (所属) 1. IMCE,九州大学 2. ICR, 京都大学.

本発表は、天然物で毒性の強い、モノフルオロ酢酸を、HF とヒドロキシ酢酸に加水分解するフルオロ酢酸デハロゲナーゼに関する理論的研究である。一般に C-F 結合は非常に強固で、天然物の中では、もっとも強い結合の一つと言われている。しかし、フルオロ酢酸デハロゲナーゼは、いとも簡単に C-F 結合を切断する。これまでの研究で、活性中心にある 104 番目のアスパラギン酸が求核剤となって、C-F 結合の炭素を攻撃し、フッ素原子が F<sup>-</sup>イオンとなって脱離するとともに、アスパラギン酸とのエステル中間体を経て反応を進行させていると考えられている。本酵素の X 線結晶構造解析により立体構造が明らかにされたが、活性中心まわりの残基は、他のハロアルカンデハロゲナーゼ (C-Cl, C-Br 結合を切断する) と同じく、立体構造を見るかぎり、本酵素が強固な C-F 結合を切断する論理的根拠は明らかではない。そこで、発表者らは、量子および分子力場計算により強固な C-F 結合が切断される謎に迫った。その結果、活性中心にある His149, Trp150, および Tyr212 の 3 つの残基による水素結合により、F<sup>-</sup>イオンの脱離が著しく促進されていることが判明し、これが、強固な C-F 結合を切断する本酵素の仕組みであることを明らかにした。

【連絡先】 [hiratake\(at\)scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:hiratake(at)scl.kyoto-u.ac.jp) 電話 0774-38-3231 平竹 潤

## #07-208 New Frontiers of Functional Nucleic Acids: Chemistry, Biology and Applications

### 機能性核酸のニューフロンティア：化学、生物学と応用

【オーガナイザー】：Zhen Huang (Georgia State University) | Scott K. Silverman (University of Illinois) | Yi Lu (University of Illinois) | Yingfu Li (McMaster University) | 菅 裕明 (東京大学) | 杉本直己 (甲南大学)

【開催日】：12月18日(土) 終日、19日(日) 終日

【会場】：口頭発表 308B (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

近年、核酸科学の分野において、新しい構造や機能をもつ核酸が発見されたり、合成されたりしている。本シンポジウムでは、特に新規機能性核酸に注目し、最新の研究成果を発表し合うとともに、今後の研究の展望について意見交換する。

代表的なトピックスは、(1) 医療応用に向けたオリゴヌクレオチドの開発と医薬の標的としての核酸、(2) 新規リボザイムやデオキシリボザイムのインビトロ選択、(3) 天然リボザイムや人ロリボザイム、デオキシリボザイムの構造とメカニズム、(4) 核酸のバイオセンシングや診断、ナノ構造形成のような化学的かつ生物学的応用、(5) 核酸のダイナミクス、電荷移動、損傷と修復、(6) 非コードRNAの構造と機能、(7) 核酸とタンパク質相互作用の化学と生物学などである。

ハイライト 光化学で遺伝子発現をコントロールする

【日時】12月18日(土) 午後8時20分～8時30分 【会場】308B (Convention Center)

【講演番号】ID 833 口頭

Light-activated gene expression from site-specific caged plasmid DNA with a biotinylated photolabile protection in living cells

ビオチン化による光感応性を施した部位特異的ケージ化プラスミドの生細胞中での光活性化遺伝子発現

山口哲史・S. Nakajima・Y. Chen・長棟輝行(所属)東京大学 大学院工学研究科

古田寿昭(所属)東邦大学 理学部生物分子科学科

細胞中での遺伝子の発現を光で制御することが最近注目を集めている。特に、ケージ化プラスミドDNAを光で制御できれば、mRNAへの転写やshRNA及び他の機能性RNAの発現制御に適用できる。しかしながら、従来のケージ化プラスミドの光活性化は、転写を完全に抑制するためには、プラスミドDNAにケージ化部異を多量に導入しなければならず、転写制御を少量の線量(光量)ではできなかった。本研究では、プロモーター領域内に単一のビオチン化光感応性基を部位特異的に導入した新規ケージ化プラスミドの設計、合成及び光誘導性活性化について発表する。

【連絡先】 E-mail: nagamune(at)bioeng.t.u-tokyo.ac.jp

## # 07-213 Protein alteration by mutagenesis and chemical modification: Applications in biochemistry, drug discovery, diagnostics, and nutrition

突然変異と化学修飾によるタンパク質の改変：生化学，薬の探索，診断，そして栄養学への応用

【オーガナイザー】：Ronald Kluger (University of Toronto) | 植野 洋志 (奈良女子大学)  
| Frank Jordan | Thomas Muir  
【開催日】：12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後、17日(金) 午前  
【会場】：口頭発表 302AB (Convention Center)  
ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

タンパク質は生体のさまざまな機能を支えている。天然のタンパク質はもちろん、遺伝的に、また、化学的に改変したタンパク質からはより深く、新規な情報が得られる。これらの情報は、生命をより理解させることができ、新しい薬の開発、病気を診断する技術につながったり、体を支える栄養としての役割も理解できる。本セッションでは、タンパク質について広い観点から新しい技術の導入などにより明らかにされた事象について議論する。

ハイライト 香辛料による味覚改変がもたらす減塩食品

【日時】12月15日(水) 午前7時30分～8時10分 【会場】302AB (Convention Center)  
【講演番号】ID 151 口頭

Vitamin B<sub>6</sub>-dependent enzyme, glutamate decarboxylase: A possible role in leucocyte and new development in taste

ビタミンB<sub>6</sub>依存性酵素，グルタミン酸デカルボキシラーゼ：白血球における役割と味覚での新展開

○植野 洋志，松川 聡子，中村 友美，柳川 右千夫，小幡 邦彦，渡辺 正仁，大槻 勝紀 (所属) 奈良女子大学 生活環境学部

味物質は味蕾細胞の味孔部分に局在する味覚受容体に結合して、その情報が細胞内を經由し、味神経、そして脳に到達し、過去の味の記憶と照らし合わせることで認識される。植野らは遺伝子改変マウスを用いて塩味を感じる味蕾細胞内にγ-アミノ酪酸 (GABA) という神経伝達物質が合成されることを見出し、GABA が塩の成分であるクロライドイオンの膜透過に関与し、塩味に影響を与えることを報告する。また、食べ物の成分には、塩味を増強するものがあり、GABA の合成にも影響することから、塩味改変物質となり、いわゆる「塩分を減らしてもおいしい」食材の開発につながる事が期待できる。

【連絡先】630-8506 奈良市北魚屋西町 奈良女子大学生生活環境学部  
電話 0742-20-3493, E-mail: hueno(at)cc.nara-wu.ac.jp

## #235 Recent Advances in Research on Leukotrienes and Prostaglandins in Inflammatory and Respiratory Diseases

(炎症や呼吸器疾患におけるロイコトリエン類、並びにプロスタグランジン類に関する最新の研究の進展について)

【オーガナイザー】: Robert N. Young (Simon Fraser Univ.) | Peppi Prasit (Amira Pharmaceuticals) | 上野裕明 (田辺三菱製薬)

【開催日】: 12月17(金) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 308B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

生体内の炎症反応の代表的な原因物質として、生体の長鎖脂肪酸であるアラキドン酸の代謝産物であるロイコトリエンとプロスタグランジンが知られている。これらの物質によって引き起こされる疾患としては喘息等の呼吸器疾患や、様々な炎症性の疾患があり、これまでにこれらの疾患の治療薬を目指して、ロイコトリエンやプロスタグランジンの産生過程の研究や、これらの作用を阻害するような物質を創製する研究がなされてきた。

特にロイコトリエンの生合成酵素である5-リポキシゲナーゼの阻害剤や、受容体レベルでロイコトリエンの作用を抑制する薬剤が開発上市され、喘息の治療薬として臨床現場で供されているが、更に効果、並びに安全性の高い薬剤の開発が望まれている。一方、プロスタグランジンの合成酵素であるシクロオキシゲナーゼの阻害剤の開発は副作用の発現等、未だ問題が多く、これらの問題を克服した薬剤の登場が望まれている。

このような背景の中で、今回のシンポジウムではアラキドン酸の代謝系に関する最新の研究や、ロイコトリエンやプロスタグランジンに関する生物学的な最新の知見や、薬剤開発に関わる最新の研究について講演頂く予定である。

ハイライト プロスタグランジンの有する抗炎症作用について

【日時】12月17日(金) 午後1時5分~1時50分 【会場】Convention Center

【講演番号】ID 484 口頭

Prostaglandin, inflammation, and respiratory diseases

プロスタグランジン、炎症、そして呼吸疾患

○ 成宮 周 (所属) 京都大学 医学研究科

アラキドン酸の生体内代謝産物であるプロスタグランジン類 (PGs) は、その構造により P 幾つかのタイプに分類され、PGD、PGE、PGF、PGI、そしてトロンボキサン (TX) が知られている。これらのプロスタグランジン類はその生理作用を発現する際には、各々の受容体 (DP、EP、FP、IP、TP) と結合して様々な生理作用を示すことが知られているが、未だその詳細は未解明な点が多い。

演者らは、特に炎症反応におけるプロスタグランジン類の役割を明らかにする共に、新しい医薬品の開発つなげる知見を得る事を目的に研究を進めてきた。具体的には、遺伝子改変動物 (ノックアウトマウス) を用いて、これらプロスタグランジン類の受容体を発現していない実験動物を作成して、種々のプロスタグランジン類の生理作用を検討した。その中で、特に受容体 DP、EP3 を介するプロスタグランジン PGD<sub>2</sub>、PGE<sub>2</sub> の生理作用について解析した結果、これらプロスタグランジン類の炎症作用発現に関する新たな知見を得ることができ、その成果についてご講演頂く。

【連絡先】 E-mail: snaru(at)mfour.med.kyoto-u.ac.jp



## #07-244 Frontiers in Ubiquitin Research: Structures, Mechanisms, Biology and Drug Development

### ユビキチン研究の最前線

【オーガナイザー】：加藤晃一（岡崎統合バイオ）他2名

【開催日】：12月18日（土）午後、19日（日）午前・午後、20日（月）午前

【会場】：口頭発表：305B (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

ユビキチンは、DNA修復、転写制御、免疫応答、細胞周期制御、アポトーシスなどの多様な生体反応の制御に関与するタンパク質修飾分子である。このため、ユビキチン修飾系はがんをはじめとする様々な疾患に対する薬物のターゲットとして熱い注目をあつめている。また、ユビキチンとよく似た修飾タンパク質が細胞内におけるタンパク質分解などにおいて重要な役割を演じていることが次々と明らかになってきている。本シンポジウムでは、ユビキチン・バイオロジーとその関連領域において世界の第一線で活躍している研究者が一堂に集結して、構造生物学・細胞生物学・ケミカルバイオロジー・分子生物学などの立場から、基礎と応用の両面から最先端の研究成果に基づいて議論を展開する。特に、ユビキチンおよびユビキチン様タンパク質による細胞内タンパク質の修飾と分子認識のメカニズムをタンパク質の3次元構造の観点から理解して、それらを標的とするドラッグディスカバリーの可能性を探ることをシンポジウムのハイライトとする。

ハイライト 病原細菌が腸管感染を拡大する戦術

【日時】12月19日（日）午前10時30分～11時 【会場】305B (Convention Center)

【講演番号】ID 864 口頭

#### Regulation of host homeostasis by bacterial ubiquitin ligases

病原細菌の粘膜感染において宿主免疫反応抑制機構

○ 金玖秀<sup>1</sup>、芦田浩<sup>2</sup>、笹川千尋<sup>1,2</sup>（所属）<sup>1</sup>東京大学・医科学研究所・感染症国際研究センター、<sup>2</sup>東京大学・医科学研究所・細菌感染分野

赤痢菌をはじめとする腸管病原細菌の多くは、飲料水や食物を介して、我々の口から体内に侵入し、腸管の粘膜を構成する上皮細胞を足場として感染する。これに対して、我々は感染を受けた上皮細胞を除去したり、免疫応答を誘導したりすることにより、病原細菌の腸管への定着や感染の拡大を抑える生体防御システムを備えている。しかし、多くの病原細菌は感染を拡大させるために、我々の生体防御システムを回避する巧妙な戦略を持っている。

今回、我々は赤痢菌の感染戦略を解明するために、赤痢菌の IpaH ファミリーユビキチンリガーゼ蛋白質を解析した。その結果、IpaH ファミリー蛋白質が宿主細胞の中に分泌されると、宿主の免疫応答や細胞増殖に関わる蛋白質を分解することにより、宿主の生体防御システムを無効化し、赤痢菌の感染成立に重要な役割を果たすことを発見した。IpaH ファミリー蛋白質は赤痢菌のみならず、サルモネラ属菌やエルシニア属菌などの病原細菌にも存在する。従って、IpaH ファミリーに関する我々の発見は広範な病原細菌の感染戦略を理解する上で重要であり、また、この成果は新たな抗菌剤の開発に向けての基盤になる。

【連絡先】笹川 千尋 教授

〒108-8639 東京都港区白金台4-6-1

東京大学・医科学研究所、感染・免疫部門、細菌感染分野

電話 03-5449-5252, E-mail: sasakawa(at)ims.u-tokyo.ac.jp

## # 8-48 Sources, Transport, Fate, and Behaviour of Global Contaminants

## 地球規模の有害化学物質汚染について

オーガナイザー】:

John Martin (アルバータ大学) | 山下信義 (産総研) | Paul Lam (香港城市大学)

【開催日】: 12月19, 20日(日,月) 終日

【会場】: 口頭発表 319A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II &amp; III (Convention Center)

## 展 望

現在の化学研究は基礎研究成果だけではなく、地球規模での化学物質の挙動・レアアース等国際経済活動に与える影響が大きく、ストックホルム条約(POPs条約)やバーゼル条約、REACH指令、オゾン層破壊物質に関する京都議定書等、国際的化学品規制動向にも対応する社会貢献を強く求められている。2009年に新規8物質がPOPs条約に追加され、これに対応するために産業界・政府はもとより、UNEPレベルで活動が活発化しており、地球規模の有害化学物質の挙動・現状把握と将来予測が最重要研究課題の一つとなっている。

本セッションではオーガナイザーの呼びかけにより、化学物質動態数理モデルの専門家であるMackay博士、カナダ環境化学専門家として著名なMuir博士、POPs条約有効性評価のために世界規模のモニタリングを行っているHarnar博士など、地球規模有害化学物質問題を網羅する世界トップレベルの専門家が一堂に会し、最新の研究成果について議論を戦わせる機会を得ることができた。本セッションの演題は新規有害化学物質のリスト化、POPs条約など国際化学品規制の動向、地球規模の動態・将来予測、環境内構造変換による未知の化学物質の生成と環境負荷等、今後の地球規模有害化学物質問題の方向性を明確にし、一般社会を啓蒙する波及効果が非常に大きく、全ての化学者が理解しておくべき内容である。

ハイライト 「島計画」によるPFOS関連物質の地球規模輸送の解明

【日時】12月20日(月) 午前7時30分~8時 【会場】319A (Convention Center)

【講演番号】665 口頭

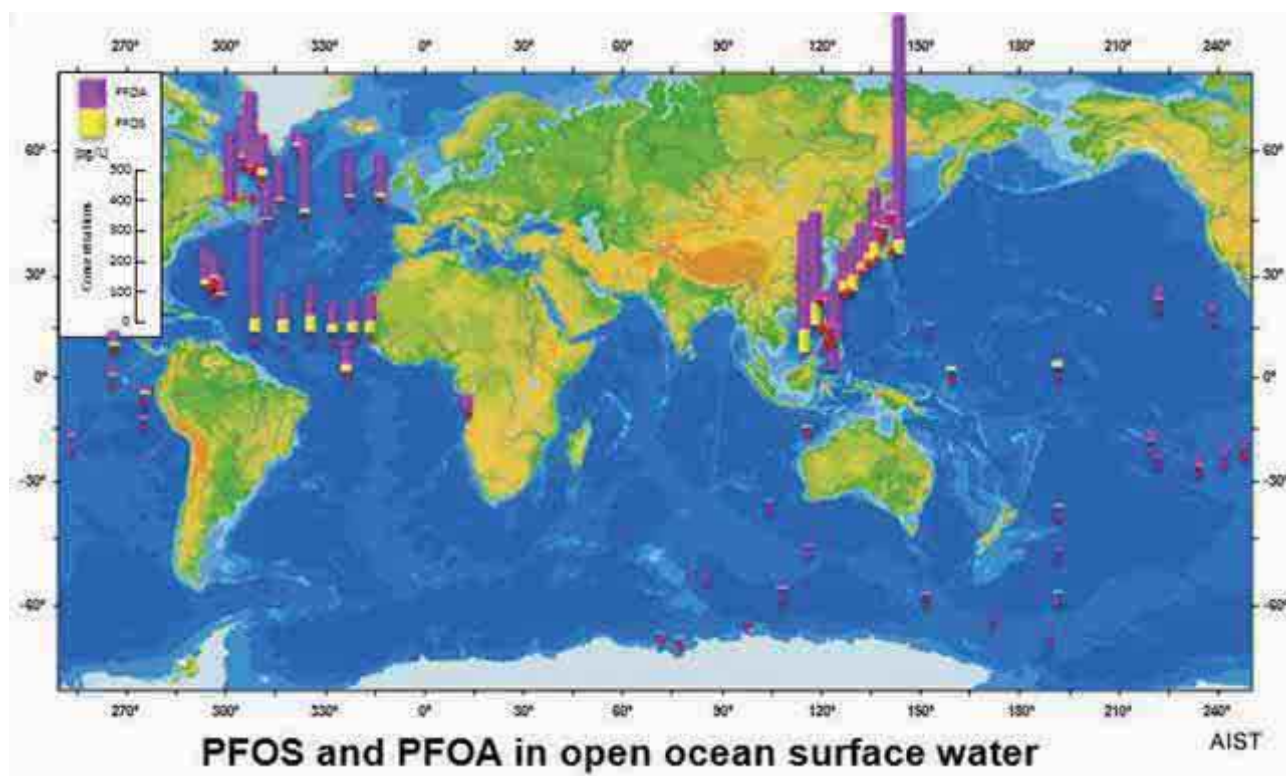
“Islands project” for understanding the global transportation potential of PFOS and related chemicals in oceans

「島計画」によるPFOS関連物質の地球規模輸送の解明

○山下信義 (産業技術総合研究所), Karen Kwok (香港城市大学), 谷保佐知 (産総研), 堀井勇一 (埼玉県環境国際研究センター), Kurunthachalam Kannan (ワズワースセンター), Gert Petrick (ライプニッツ研究所), Paul Lam (香港城市大学), 蒲生俊敬, (東京大学大気海洋研究所)

2009年にPOPs条約に追加されたペルフルオロオクタンスルホン酸(PFOS)とその関連物質は環境汚染物質として多くの研究がなされているが、地球規模化学トレーサーとしての有用性に着目した研究は数少ない。発表者等は2003年に初めて外洋海中の残留を報告し、2005年と2008年には熱塩対流による地球規模海水大循環メカニズムにより、北半球においてPFOS類の深層海水への供給が行われていることを発見した。これにより、大気経由輸送メカニズムしか知られていなかった従来のPOPs遠距離輸送概念に一石を投じ、海流による地球規模長距離輸送メカニズムの重要性に世界中の研究者の目を向けることに成功した。関連する論文も含め4年間でCitation index 130を超え、2010年には二件のHighly Cited Author Awardを受賞するなど、この分野では世界を牽引する研究成果をあげている。本演題ではこれまでに得られたPFOS関連物質の地球規模動態モデルを総括するとともに、新たなアプローチとして「島計画」の概要を説明する。従来の環境汚染化学は発生源である陸域・沿岸域での研究がほとんどであるが、PFOS関連物質は多様な発生源を持つため、陸域・沿岸域での挙動モデルは複雑であり、信頼性が低い。一方、発生源から遠く離れた「島々」は固有の発生源をほとんど持たず、遠距離輸送により高濃度発生源から化学物質が輸送されているためその地球規模の動態を理解する上で比較的シンプルなモデルが期待できる。現在まで、ハワイ、モーリシャス、アフリカ・日本近海、スバルバル諸島などで得られている成

果をもとに、PFOS 関連物質の地球規模動態モデルのための「島計画」を概説する。



【連絡先】 日本化学会 E-mail: nob.yamashita(at)aist.go.jp

ハイライト 21 世紀の国際的化学品規制を理解するための基準作り

【日時】 12 月 19 日 (日) 午前 7 時 50 分～8 時 30 分

【会場】 319A (Convention Center)

【講演番号】 ID 570 口頭

Identifying new persistent and bioaccumulative organics among chemicals in commerce:  
An update

市販製品中に含まれる新たな残留性有害化学品の特定

○Derek Muir (Environment Canada) P. Howard (Syracuse Research Corporation)

現在までに生産された人工化学品のうちその残留性(P: persistent)と生物濃縮性(B: bioaccumulative)が評価されているのはごく一部の製品に過ぎず、POPs 条約で規制されている化学品はその 0.001%にも満たない。年間 1 トン以上使用されている、約 30000 種の有機化合物について分子軌道計算・QSAR によりその潜在的な有害性を明らかにする試みがなされている。米国化学品管理法(TSCA)とカナダ国内製品リストより抽出した(2006 年までに登録された)22000 種類の化学品とそれらの分解産物・二次生成物について P/B 評価を行ったところ、610 種類の新規化学品が P/B 有害性を有していた。またその 62%はハロゲン化合物であり、8%はシロキサン(siloxane)類であった。化学構造としてはハロゲン置換基・環構造・ペルフルオロ構造・環状シロキサンが多く、高い Kow(オクタノール/水分配係数)を有していた。現在この結果を元に米国・カナダの化学品管理法の見直しがなされており、本公演では製品の分解産物・二次生成物・不純物質などの P/B 評価も含め、TSCA 下の最新の潜在的有害化学品リストを公開する。

【連絡先】 日本化学会 E-mail: nob.yamashita(at)aist.go.jp



## #08-131 Chemistry of Post Combustion Carbon Dioxide Capture

## 排ガスからの二酸化炭素回収の化学

【オーガナイザー】: Moetaz Attalla (CSIRO) | 藤岡祐一 (地球環境産業技術研究機構) | Paul Gemperline (CSIRO)

【開催日】: 12月16日(木) 午前・午後・夕方、17日(金) 午前・夕方、18日(金) 午前

【会場】: 口頭発表 317B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

温室効果ガスの大規模な削減、特に CO<sub>2</sub> は、多くの国において重要な問題と認識されている。豊富に存在する石炭と天然ガスは発電用に燃料として適しているが、しかし、それらが大きな CO<sub>2</sub> 発生源でもある。CCS (CO<sub>2</sub> capture and storage) は、まさにその問題を解決する技術である。本セッションは、燃焼排ガスからの CO<sub>2</sub> を回収に関する化学技術を取り上げる。従来のアミンを用いた CO<sub>2</sub> 回収プロセスの改良と将来のための新規なシステムについて、その両方に関する化学に焦点を当てる。

第一のセッションテーマは、CO<sub>2</sub> 回収システムに使用するアミン、アンモニア、バイカーボネートを用いた吸収液の進展についてである。新規なアミン吸収液、回収プロセスに関する反応機構、速度論、熱力学、および吸収液の劣化に関する課題と、CO<sub>2</sub> 回収システムの環境影響に焦点をあてる。

第二のセッションテーマは、触媒、吸着剤、イオン液体、MOF、膜などのこれから発展するであろう革新的な CO<sub>2</sub> 回収技術である。

## ハイライト マイクロスケール実験の最前線

【日時】12月16日(木) 午前8時~8時45分 【会場】317B (Convention Center)

【講演番号】ID#79 口頭

CO<sub>2</sub> absorption characteristics of 2-isopropylaminoethanol (IPAE) aqueous solution  
2-イソプロピルアミノエタノール (IPAE) 水溶液の CO<sub>2</sub> 吸収特性

○後藤和也、F.A. Chowdhury、小玉聡、岡部、藤岡祐一 (所属) (財) 地球環境産業技術研究機構

(概要) 従来の吸収液である MEA を代替する新しい CO<sub>2</sub> 吸収液として IPAE を見出した。その特性を調べ、報告する。IPAE を CO<sub>2</sub> 吸収液の主剤とした吸収液は、CO<sub>2</sub> 回収エネルギーが MEA より 2 割程度の削減が見込める。

【連絡先】(財) 地球環境産業技術研究機構 E-mail: fujioka(at)rite.or.jp



## #08-247 Sonochemistry &amp; Sonoprocessing

## ソノケミストリーおよびソノプロセッシング

【オーガナイザー】: Kenneth S. Suslick (Illinois U) | Franz Grieser | 木村隆英 (滋賀医大) | Feng Ruo

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 319B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

ソノケミストリー(超音波化学)は、電磁波とは異なる縦波の超音波のエネルギーを化学反応に適用する化学である。液体中では超音波が起こすキャビテーションという物理現象によって、5000 K・1000 気圧にも及ぶ超高温高压の反応場が、サブナノ秒という非常に短寿命で作り出される。また、高速ジェット流などにより物質移動が加速される。このような現象に起因する化学作用は、化学の多様な領域から注目され、無機化合物・有機金属化合物・有機化合物の合成や、均一系および不均一系触媒反応、高分子化学、医学や薬学分野において数々の応用がなされてきた。本シンポジウムでは、より効率的なグリーン化学テクノロジーの展開におけるソノケミストリーとソノプロセッシングの最新報告が焦点となる。

## ハイライト 非レアメタル透明導電膜

【日時】12月16日(木) 午前7時30分~8時

【会場】319B (Convention Center)

【講演番号】ID 87 口頭

Electrochemical polymerization of water-insoluble monomers in aqueous electrolytes using acoustic emulsification

超音波乳化法による水電解液中における疎水性モノマーの電解重合

○跡部真人 (所属) 横浜国立大学 大学院環境情報研究科

無色透明な導電膜は液晶の画面やタッチパネル、太陽電池などに利用されており、今後もその需要は拡大していくことが予想されているが、現在主流のITO(酸化インジウムスズ)などレアメタルを用いる導電膜に替わる導電膜の開発が求められている。本講演では、水に溶けにくい原料モノマーを超音波乳化法により数十 nm の液滴に分散させ、電解重合させることに成功したと報告される。この方法により、レアメタルを用いない、高い透明性と高い導電性を兼備した重合膜を調整することができる。

【連絡先】E-mail: atobe(at)ynu.ac.jp

## ハイライト 音感受性スマートポリマー

【日時】12月16日(木) 午前8時30分~9時

【会場】319B (Convention Center)

【講演番号】ID 89 口頭

Stimulus respond to polymer interaction by ultrasound

超音波刺激に応答するポリマー相互作用

○小林高臣 (所属) 長岡技術科学大学

温度や光や pH や電気などの環境のわずかな変化に応答して大きく変化する高分子材料をスマートポリマーといい、様々な領域で注目されている。本講演では、ある種のポリマーが超音波に応答することが初めて見出されたと報告される。生体系への応用など様々な場面への応用が期待される。

【連絡先】E-mail: takaomi(at)nagaokaut.ac.jp

## 8-250 Innovative Green Chemistry with Microwave Energy マイクロ波エネルギーによる革新的なグリーンケミストリー

【オーガナイザー】: 松村竹子(ミネルバライトラボ)|堀越智(東京理科大)|柳田祥三(大阪大学)|Rajender Varma (U. S. Environmental Protection Agency)|Nguyn Tran (Microwave Power Components, Au.) 【開催日】: 12月15日(水)午前・午後, 16日(木)午前 【会場】: 口頭発表 Room 317B (Convention Center) ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

どこの家庭でも使われている電子レンジはマイクロ波(電磁波)が食物中の水分を加熱して、すばやく調理することができます。マイクロ波化学はマイクロ波が化学物質に作用して化学反応が急速に進むことに特徴があります。今年のノーベル賞受賞の鈴木カップリング反応もマイクロ波化学で得意な反応できわめて短時間で反応が完了します。1980年代より始まったマイクロ波化学は、有機合成、無機合成、触媒化学など化学の広い分野で研究され、環境にやさしいグリーンケミストリーとして受け入れられる領域に成長しました。このセッションは1995年より続いており、その間に急激な発展を遂げました。今回のシンポジウムは環境化学分野で“マイクロ波エネルギーによる革新的グリーンケミストリー”として開催いたします。マイクロ波化学反応の研究に加え、ナノテクノロジー、新機能材料、リサイクリング、環境、エネルギー、マイクロ波化学装置、シミュレーションなどの多岐にわたる分野が取り上げられます。柳田祥三教授(大阪大)、二川佳央教授(国士舘大)、佐藤元泰教授(核融合研)をはじめ世界的な研究者による招待講演を始め、各分野の研究者が集い講演やディスカッションを行うことで、革新的マイクロ波グリーンケミストリーを総合的に討論します。

ハイライト マイクロ波有機化学の原理を解明!

【日時】12月15日(水)午前8時35~9時15分 【会場】Room 317B (Convention Center)  
【講演番号】ID#18 口頭発表

Microwave energy-driven organic chemistry and frontier molecular orbital calculations

マイクロ波エネルギー誘起有機化学とフロンティア軌道計算

○柳田祥三<sup>1</sup>, 内田典孝<sup>1</sup> (所属) 大阪大学先端科学イノベーションセンター

マイクロ波エネルギーによって進行する有機化学反応の多くは、マイクロ波熱触媒によって反応時間が飛躍的に短縮されます。この理由として、照射されたマイクロ波エネルギーは溶液内や固体物質上における反応物質が分子レベルで加熱されるため、反応の速度定数  $k$  を支配する頻度因子  $A$  が著しく大きくなり、その結果反応を著しく促進するためです。マイクロ波照射による短時間反応や選択的反応のメカニズムを、計算化学シミュレーションを用いて検証し、マイクロ波熱触媒反応の原理に迫る講演です。

ハイライト マイクロ波反応をリアルタイムにモニターできる装置の開発

【日時】12月15日(水)午後3時55~4時10分 【会場】Room 317B (Convention Center)  
【講演番号】ID#60 口頭発表

Development of precise and energy saving microwave reactors with solid state microwave source and their application to high speed synthesis of valuable compounds

半導体マイクロ波源を用いる精密・省エネマイクロ波反応装置の開発と高速合成への適用

○松村竹子<sup>1</sup>, 西岡将輝<sup>2</sup>, 他<sup>3</sup>, (所属) 1.ミネルバライトラボ, 2.産総研, 3.他

半導体マイクロ波源を用いた、精密マイクロ波反応装置は電気・電波技術者と化学者が共同して開発した最新の精密マイクロ波装置です。マイクロ波反応の精密スクリーニングを可能にし、反応のリアルタイム分光モニタリングによってマイクロ波高速合成過程が追跡で着ます。この装置を用いた有機EL発光色素やナノ粒子の高速合成が紹介されます。

【連絡先】堀越智(東京理科大) Email: [horikosi\(at\)rs.noda.tus.ac.jp](mailto:horikosi(at)rs.noda.tus.ac.jp),  
松村竹子(ミネルバライトラボ) Email: [mll\(at\)gamma.ocn.ne.jp](mailto:mll(at)gamma.ocn.ne.jp)

## #262 Challenges of Heterogeneous Catalysts for Environmental-Benign Materials Conversions

## 環境調和型物質変換における不均一系触媒の挑戦

【オーガナイザー】: 海老谷 幸喜 (北陸先端科学技術大学院大学) | Jong-Ho Kim (Chonnam National University) | Yong Wang (Pacific Northwest National Laboratory)

【開催日】: 12月17日(金) 午後、18日(土) 午前・午後、19日(日) 午前

【会場】: 口頭発表 317B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

Green Chemistry, Sustainable Chemistry が叫ばれる中、環境に調和した物質変換の重要性は益々高まっている。このシンポジウムでは、特に反応物と混ざり合わない固体不均一系触媒に焦点を絞り、環境調和型物質変換への挑戦について最前線の研究成果を、口頭発表とポスターセッションにて発信する事を目的としている。口頭発表は、招待講演3件を含め50件、ポスターセッションでは43件の発表がある。参加国は、アメリカ、英国、韓国、コロンビア、インドネシア、ハンガリーと多岐にわたっている。本シンポジウムにおける議論を通して、当該研究分野がさらに発展すると期待される。

## ハイライト 新規固体酸触媒の開発

【日時】 12月18日(土) 午前10時50分～11時30分

【会場】 317B (Convention Center)

【講演番号】 ID 400 依頼講演 (口頭)

Layered- and mesoporous transition metal oxides as novel solid acid catalysts

層状およびメソ孔を有する遷移金属酸化物の新規固体酸触媒としての応用

○ Domen, Kazunari

The University of Tokyo, Tokyo, Japan

2次元あるいは2次元の構造を持つナノ物質は、層間、ポア、表面を利用した不均一系触媒として利点がある。プロトン化した層状  $\text{HNbMoO}_6$  は、新規固体酸触媒として機能し、フリーデル・クラフツアルキル化反応、アセタール化反応、エステル化反応、水和反応および加水分解反応に対して、従来のゼオライトやイオン交換樹脂よりも高い触媒活性を持つ事を見出した。また、本触媒は、バイオリファイナリーの重要な反応のひとつである、糖類の加水分解反応に対しても触媒活性を示す。

著者らは、近年 高表面積をもつ Nb-W 酸化物が極めて高い酸触媒機能を示す事も見出している。メソ孔中の酸点が反応物と接触しやすいため、極めて速い反応を進行させていると考察している。

【連絡先】 E-mail: domen(at)chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

## ハイライト 環境浄化とエネルギーに関連する固体触媒

【日時】 12月19日(日) 午前9時40分～10時

【会場】 317B (Convention Center)

【講演番号】 ID 564 口頭

Intrinsic catalytic role of mesoporous silica in the preferential oxidation of carbon monoxide in excess hydrogen

過剰水素存在下での一酸化炭素の選択的酸化反応におけるメソ孔を有するシリカの触媒としての役割

○ A. Fukuoka<sup>1</sup>; S. Huang<sup>1</sup>; K. Hara<sup>1</sup>; Y. Okubo<sup>2</sup>; M. Yanagi<sup>2</sup>; H. Nambu<sup>2</sup>

1. Catalysis Research Center, Hokkaido University, Sapporo, Japan.

2. Taiyo Kagaku Co., Ltd., Yokkaichi, Japan.

過剰水素の存在下での CO の選択的酸化反応は、触媒毒となる CO を除去する有効な方法である。著者らは、メソ孔を有する結晶性シリカ MCM-41 を白金の担体として用い、極めて効率的に CO を酸化できる事を見出し、表面のシラノール基の重要性を提案している。

【連絡先】 E-mail: fukuoka(at)cat.hokudai.ac.jp

## #77 Titanium Dioxide: Synthesis and Applications for Energy, Environment, and Devices

### 酸化チタン：合成とそのエネルギー、環境、デバイスへの応用

【オーガナイザー】: Matthew A Tarr (U. New Orleans) , Rose Amal (U. New South Wales), Wonyong Choi (Pohang U.), 横野照尚 (九工大)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 304B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

鳥インフルエンザ、スーパー耐性菌アシネトバクターによる院内感染などが社会問題となっており、化学薬品等の人的な影響がない室内環境浄化法の開発が望まれている。このシンポジウムでは、室内光などの室内光のエネルギーを利用して高い殺菌、抗カビ性能を発揮する室内環境の浄化用の次世代型高性能酸化チタンナノ粒子の開発に焦点をあてた最先端の発表を行う。さらに、ナノテクノロジーを利用して開発された種々の酸化チタンナノ粒子を利用した太陽電池等の最新のデバイス開発に関する発表も行われる。

### ハイライト マイクロスケール実験の最前線

【日時】 12月19日(日) 午後7時～9時 【会場】 304B (Convention Center)

【講演番号】 ID1482 ポスター

Photocatalytic activity of Fe-loaded N- and P-co-doped titania under visible-light irradiation

Feを担持したN,P共ドーブ酸化チタンの可視光下での触媒活性

○T. Komori<sup>1</sup>; S. Hosokawa<sup>1</sup>; S. Kim<sup>1</sup>; K. Wada<sup>1</sup>; S. Iwamoto<sup>2</sup>; M. Inoue<sup>1</sup> (所属) 1. Energy and Hydrocarbon Chemistry, Graduate School of Engineering, Kyoto University, Kyoto, Japan.

2. Chemistry and Chemical Biology, Graduate School of Engineering, Gunma University, Gunma, Japan.

P, N共ドーブ酸化チタンを合成した。得られたP, N共ドーブ酸化チタンは、可視光領域に強い吸収を示した。光触媒活性をアセトアルデヒドの分解反応で評価したところ、可視光下でP, N共ドーブ酸化チタンは高い触媒活性を示した。さらに、鉄を担持することでその触媒性能が焼く10倍向上することが明らかになった。一方、PやNを単独でドーブした酸化チタンでは、鉄担持による効果は、非常に小さかった。

【連絡先】 E-mail: tohno(at)che.kyutech.ac.jp

### ハイライト 我国の化学実験設備について

【日時】 12月19日(日) 午後7時～9時 【会場】 304B (Convention Center)

【講演番号】 ID1488 ポスター

Electronic structures of anatase TiO<sub>2</sub>

アナタース型酸化チタンの電子構造

○M. Emori<sup>1</sup>; M. Sugita<sup>1</sup>; H. Sakama<sup>1</sup>; K. Ozawa<sup>2</sup> (所属) 1. physics, Sophia university, Tokyo, Japan. 2. chemistry and materials science, Tokyo institute of technology, Tokyo, Japan.

パルスレーザーデポジション (PLD)により、LaAlO<sub>3</sub>(100)を基盤上にアナタース型TiO<sub>2</sub>をエピタキシャル成長させた。この単結晶薄膜を用いて、angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES)解析により、正確で緻密な荷電子帯構造の結晶面角度依存性や、分布の状況を明らかにした。

【連絡先】 E-mail: tohno(at)che.kyutech.ac.jp



## #104 Synchrotron Radiation: Emerging Techniques and Applications

## 放射光 — 未来技術と応用

【オーガナイザー】:

Tsun-Kong Sham (Univ. Western Ontario) | Lin X. Chen | 朝倉清高 (北大、触媒研)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 313C (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

巨大加速器であるシンクロトロンにより光速に近い速度に加速された電子から放出される放射光は、赤外線から X 線に至る広い波長領域を持つ理想的な光源である。この放射光が実用化された 1970 年代半ば早くも 40 年たった。昨年のノーベル化学賞受賞者ヨナム氏のリポソーム構造解明に代表されるように、今では、最先端物質科学、環境科学、生命科学になくはならない光源として活躍している。また、計測技術や加速器の進展に伴い、X 線自由電子レーザーやエネルギーリカバリーライナックといった新しい光源の開発が進み、放射光自身大きな変容を遂げようとしている。本シンポジウムでは、放射光の光源としての新しい展開、放射光の新技术、そして物質、環境化学への展開に焦点をあて、最先端で活躍される先生方に講演をいただく。表面の動的な化学反応の直接追跡や大気汚染、土壌汚染を直接観測して、環境汚染の原因を探る研究など社会に密接に関わる成果が出てきており、ますます重要になる放射光の一端をひろく理解してもらえと思う。また、このシンポジウムを通じて、最先端化学における daily tool となった放射光の今後のあるべき姿について、考え、討論を深め、新しい応用の可能性を議論したい。さらに、進化し続ける放射光化学の将来についても討論する。

ハイライト 放射光化学の最前線

【日時】 12月20(月) 午前7時30分~8時00分

【会場】 313C (Convention Center)

【講演番号】 ID 1684 口頭

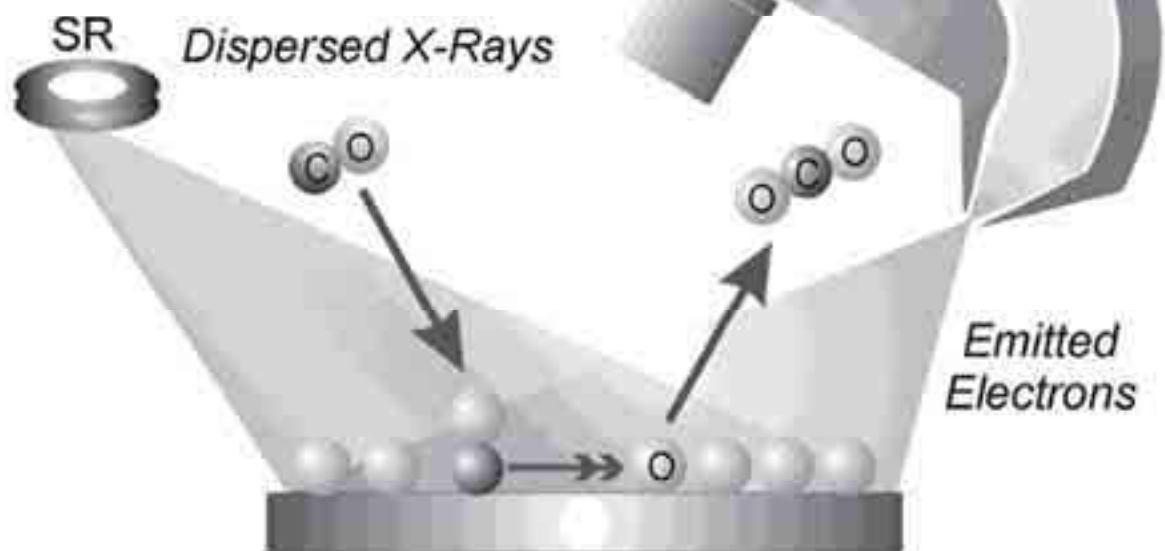
**In-situ monitoring of surface chemical reaction with synchrotron-based core-level spectroscopies: Dispersive-NEXAFS and ambient-pressure XPS**

放射光内殻分光を用いた表面化学反応の in-situ 追跡: 分散型 NEXAFS 法と大気圧 XPS 法

○近藤寛 (所属) 慶應義塾大学 理工学部

固体の表面で進む化学反応は環境・エネルギー・化学工業など私たちの身の回りの様々な分野で「触媒反応」として重要な役割を果たしているが、その基本的なメカニズムについてはまだ真に理解されているものは多くはない。私たちは、強力な X 線が得られる放射光を利用して、反応が進行する表面の化学種を直接観測することによって反応メカニズムを調べる手法の開発を行ってきた。特に最近では、アンジュレーター放射光と呼ばれる高輝度光と高速データ取得システムによって、数十ミリ秒毎に表面反応を追跡することが可能になった。この手法によって、排気ガス浄化触媒の反応に関わる表面化学種のふるまいをリアルタイムで追跡し、これまでに無い新しい反応メカニズムを見出している。さらに、触媒の実作動環境に近い準大気圧条件下で、実際に触媒反応を進行させて観測する手法の開発を進めており、これによって、思いがけない表面反応の姿が見え始めている。この講演で、触媒の真の姿が以下に理解され始めているかを紹介していただく。サステナブル社会実現のためのキーワードである触媒の反応機構解が今後と期待される。

Position-Sensitive  
Electron-Energy Analyzer



## #9-141 Emerging perovskite and spinel compounds for materials science and applications

### ペロブスカイト研究最前線 – 新技術シーズ創出への課題と展望

【オーガナイザー】：山浦 一成（物材機構） | John Mitchell | Xiaolin Wang

【開催日】：12月16日（水）午前・午後・イブニング

【会場】：口頭発表：304A (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

環境・エネルギー問題の解決へ向けた新技術開発は喫緊の課題であり、特に新材料開発の飛躍的進展が求められている。このシンポジウムでは次世代環境・エネルギー技術を先導する新物質や新現象に着目し、物質開発研究の最前線で活躍している先生方にご講演を依頼した。具体的には、ペロブスカイト型化合物とその関連物質に焦点を絞り、非従来型超伝導、巨大磁気抵抗、特異な量子磁性、誘電性、マルチフェロイック性、ハーフメタル性などを基礎とする新技術シーズの創出へ向けた課題を明確にする。

ハイライト 強誘電性を示す風変わりな磁性体の高圧合成

【日時】12月16日（木）午前7時30分～8時 【会場】304A (Convention Center)

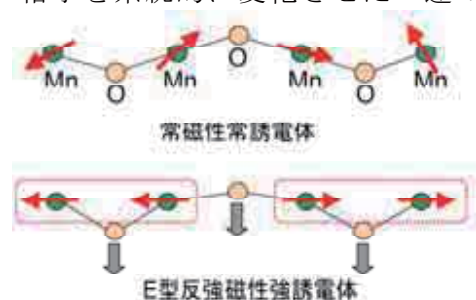
【講演番号】ID172 口頭

Multiferroic perovskite manganites synthesized under high pressure

マルチフェロイックペロブスカイト型マンガン酸化物の高圧合成

○石渡晋太郎、（所属）東京大学 大学院工学系研究科 量子相エレクトロニクス研究センター

マルチフェロイック物質とは、磁場と電場の両方に対する応答性をもつため、電場制御が可能な超低消費電力磁気メモリ素子などへの応用が期待されている。このような物質は希にしか存在せず、また磁性と誘電性の相関が弱いため研究は遅れていたが、最近ペロブスカイト型マンガン酸化物  $\text{TbMnO}_3$  が、空間反転対称性を破る特異な磁気秩序、即ちサイクロイド型らせん磁気構造をもつことで、強誘電性が誘発されることが明らかとなり、同様な物質群を中心としてマルチフェロイック物質の研究に拍車がかかった。ただし、その分極の大きさは  $\text{BaTiO}_3$  のような典型的な強誘電体と比較すると数百分の一以下である。そこで新たに注目されたのが、ペロブスカイト型マンガン酸化物の中でも  $\text{Mn-O-Mn}$  の角度がより小さい系で見られる、右下図に示した E 型反強磁性由来の強誘電相である。最近接相互作用が強磁性的であるため、 $\rightarrow \rightarrow$  は近づき、 $\leftarrow \rightarrow$  は遠ざかる。これにより全ての酸素イオンは一方向に移動し、E 型相では最大でサイクロイド相の 100 倍程度の分極が生じることが理論的に指摘されていたが、合成に高圧力を必要とするため研究例は少なく、分極発生メカニズムは確立されていなかった。本研究では高圧合成法を用いて、格子を系統的に変化させた一連の  $\text{RMnO}_3$  を作製し、サイクロイド相から E 型相へ変化した際に、分極が 10 倍程度増大することを明らかにした。さらに E 型相を示す  $\text{YMnO}_3$  の高圧下单結晶育成に初めて成功し、放射光 X 線回折実験より、原子半径の 100 分の 1 以下の強誘電的原子変位を観測することに世界に先駆けて成功した。反強磁性転移由来の格子変形を直接確認したのは本研究が初めてであり、上述したメカニズムが実際に働いていることも明らかになった。



【連絡先】 [ishiwata\(at\)ap.t.u-tokyo.ac.jp](mailto:ishiwata(at)ap.t.u-tokyo.ac.jp)

## #168 Supramolecular Nanoassemblies and Extended Frameworks

## 超分子有機および有機・無機ナノ集積体の化学

【オーガナイザー】伊與田正彦（首都大） | Nobuo Kimizuka | Seiji Shinkai  
| Omar M. Yaghi | Kimoon Kim

【開催日】：12月17日（金）午後、18日（土）午前・午後、19日（日）午前

【会場】：口頭発表 325A (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

本シンポジウムは、有機分子ならびに有機・無機ハイブリッド化合物の超分子ナノ集積体を作り出す多様な機能に焦点を当て、最先端の研究を行っている複数の研究者が集まってその最近のトピックスを発表・議論する。具体的には、(1) 新規機能材料の超分子化学の最近の展開、(2) 有機分子ならびに有機・無機ハイブリッド化合物が作るナノ集積体の機能、(3) MOF (Metal Organic Framework) の新機能とその展開、(4) ナノおよびメソ複合材料の科学に焦点を当てて、日本および世界の著名な研究者がその成果を紹介する。

## ハイライト 1

【日時】12月17日（金）午後12時30分～13時

【会場】325A (Convention Center)

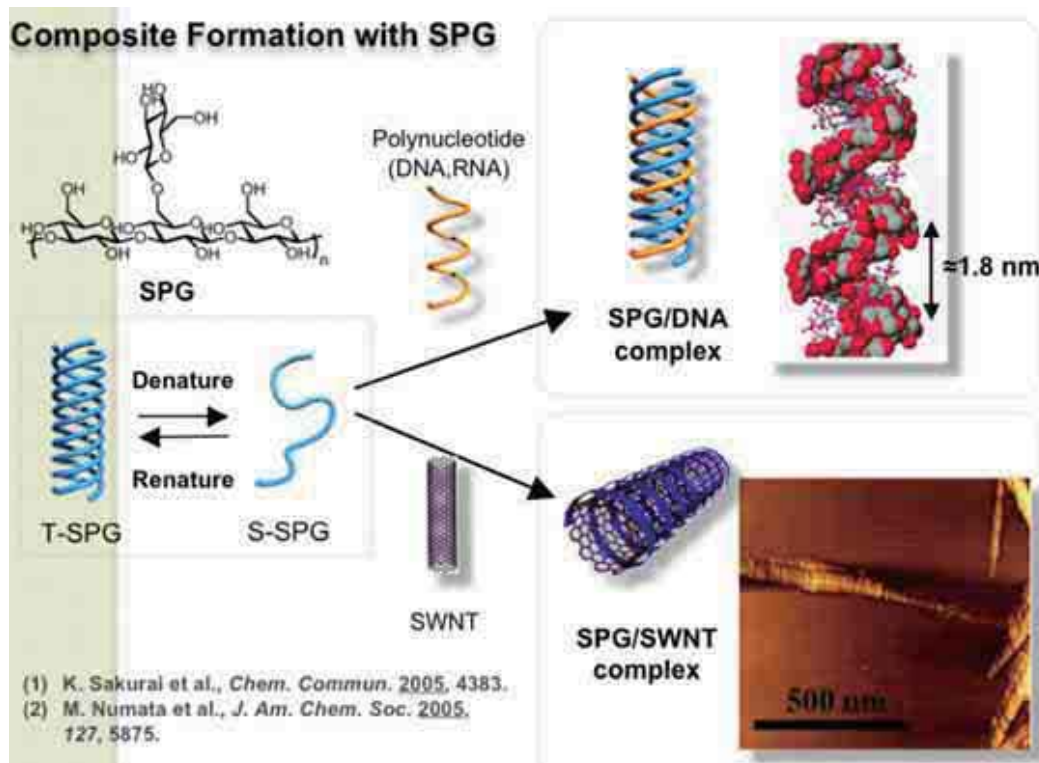
【講演番号】ID646 Oral

【講演題目】Dynamic Polymer-Polymer Recognition Systems Inspired by Novel Helix-Forming Polysaccharides

安全な遺伝子キャリアー、分子コンテナの実現—グルカン・ポリサッカライドとDNA、RNA、カーボンナノチューブとの複合体の新規物性

○新海征治（所属）崇城大 ISIT

$\beta$ -グルカン・ポリサッカライドは通常三重ヘリックスを作るが、DNA, RNA, カーボンナノチューブを共存させると、これらを含んだ複合ヘリックスや包接体を作る。このようにして作ったDNA, RNA 複合ヘリックスは安全な遺伝子キャリアーとして利用でき、また、カーボンナノチューブの包接体はアクチン・ミオシン分子モーターと組み合わせることによって、分子コンテナとして利用できることがわかった。





上記の機能性ポリマーと巨大分子を使う分子サイズの複合体合成技術は、ボトムアップ手法の新規展開を可能にする有用な方法である。

【連絡先】 新海征治、福岡市産学連携交流センター  
電話 092-802-6990, E-mail: shinkai\_center(at)mail.cstm.kyushu-u.ac.jp

## ハイライト 2

【日時】 12月18日(土) 午前10時30分～11時

【会場】 325A (Convention Center)

【講演番号】 ID992 Oral

【講演題目】 Controlled self-assembly in coordination polymers

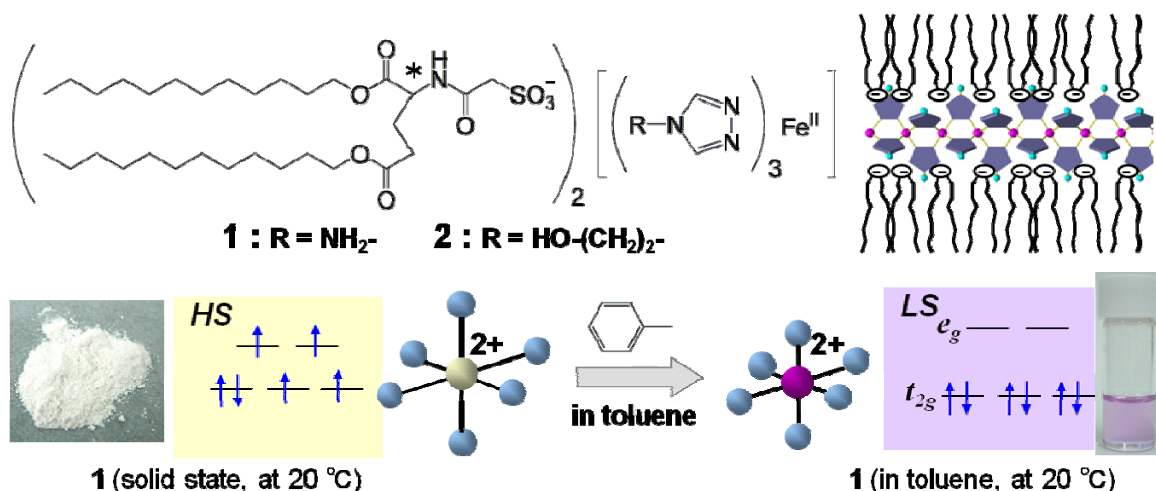
### 画期的な情報記録素子の開発—ナノワイヤー錯体のスピン転移現象における顕著な量子サイズ効果

○君塚信夫(所属) 九大院工 JST CREST

固体中で一次元構造を形成する一次元  $\text{Fe}^{\text{II}}$  トリアゾール錯体を溶液中にナノワイヤーとして分散させる超分子被覆技術を開発し、ナノワイヤー錯体のスピン転移現象において顕著な量子サイズ効果(ナノ界面効果)が現れることを初めて見いだした。この現象は室温以上の温度で起こるので、情報記録素子に応用すれば画期的な素子を作ることが可能となる。

$\text{Fe}^{\text{II}}$  トリアゾール錯体(固体)は温度や圧力に依存して、スピン状態が変化するスピン転移(低スピン(LS) ⇌ 高スピン(HS))を示すことが知られている。この変化は、磁性ならびに色調の変化を伴うことから、情報記録素子への応用が期待されている。ところが、このスピン転移現象は通常マイナス温度で起こるため、室温以上でスピン転移をおこさせるための方法論が探索されていた。今回開発された、脂質被覆型の  $\text{Fe}^{\text{II}}$  トリアゾール錯体 **1,2** は、室温、固体状態で高スピン状態を与えるものの、トルエンなどの有機溶媒に分散しナノワイヤー錯体を形成させると、低スピン状態に変化した。即ち溶液系ナノワイヤー錯体においては、固体状態に比べ、低スピン状態が約  $100^\circ\text{C}$  も安定化されるという新しい現象が見いだされた。

これは、脂質分子により被覆されたナノワイヤー錯体が、置かれた環境(溶媒の極性)に応じてスピン状態を変化させる性質を有することを意味し、金属錯体において“ナノ界面効果”を観測した初めての例である。固体とナノサイズ錯体で物性が大きく変化するという本研究成果は、金属錯体を基盤とする機能性ナノ材料の開発にとって大きなインパクトをあたえるものである。



【連絡先】 君塚信夫、九州大学大学院工学研究院応用化学部門 分子システム科学センター  
電話 092-802-2832, E-mail: n-kimi(at)mail.cstm.kyushu-u.ac.jp

## #202 Liquid Crystals in Materials Chemistry

## 材料化学における液晶

【オーガナイザー】: S. Holger Eichhorn (Univ. Windsor) | Vance Williams | 清水 洋(産総研) | C. Allan Guymon

【開催日】: 12月16日(木) 午前・午後、17日(金) 午前・午後、18日(土) 午前

【会場】: 口頭発表 313A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

フラットパネルディスプレイを実現した液晶は、近年の急速なナノテクノロジー技術の発展に伴い、本来の液晶の多様な形態の発見やそれに伴う多様な機能の発掘研究の次代へと推移している。事実、ディスプレイに用いられてきた低分子液晶のみならず高強度繊維を生み出した高分子液晶やその関連する異方性ソフトマテリアルは有機エレクトロニクス、触媒、光学や医療といった多様な分野において応用のターゲットとなっている。本シンポジウムでは化学者と化学工学を専門とする高度に境界領域化された研究者を集め、新たな液晶材料の分子設計や合成といった基盤的材料学から液晶を基にした新たなデバイスの開発等の将来の応用に向けた研究という広範な研究展開の中から顕著に発展の見られるトピックスについて最先端の成果を議論する。そのために以下の4つのサブセッションを構成した。(1) 有機エレクトロニクスにおける液晶、(2) 液晶性ナノ材料及び液晶中のナノ材料、(3) ナノ科学及びバイオテクノロジーにおける液晶に基づいた高分子、(4) 新しい液晶と応用—分子設計と機能の拡張。

.....  
**ハイライト** 新たな液晶材料: プリンテッドエレクトロニクス時代への有機半導体高性能化への鍵

【日時】 12月16日(木) 午前7時~7時40分 【会場】 313A (Convention Center)

【講演番号】 ID #419 口頭 (招待講演)

Liquid Crystallinity in organic semiconductors

有機半導体における液晶性

○半那純一 (所属) 東工大像情報研

.....  
 概要: 液晶という一群の有機化合物が液晶ディスプレイを生み出し、我が国が本格的なフラットパネルディスプレイ (FPD) の時代に先駆的役割を果たしてきたことは記憶に新しい。液晶は本来、結晶固体が融解しても直接液体相とはならず、その分子の形の特徴から分子が弱い相互作用で寄り合いながらもある方向に並んだ (配向した) 結晶的な分子の並びと液体的な流動性を兼ね備えた状態を示す言葉である。このような弱い分子間相互作用のために分子は互いに動くことが可能で、力が加わればそれに応じた形状の変化が生じる液体的な性質や電場を加えると分子がその方位に一齐に向きを変える (配向変化) 等ダイナミックな性質も示す。従って液晶は (1) 自発的な配向性、(2) 配向方位の良好な制御性、(3) 液晶性化合物特有の化学構造に由来する有機溶媒への高い可溶性、(4) アモルファスシリコンに匹敵する高速の電荷移動速度 (半導体として重要な性質) という特徴を有する。現在、液晶や EL といった FPD のフレキシブル化や軽量・フレキシブルな有機薄膜太陽電池開発等の展開の中でインク化した有機半導体を用いた印刷でデバイスを生産する近未来技術、プリンテッドエレクトロニクスに対応可能な材料として液晶は興味深い研究対象となっている。本講演では、液晶の持つ液晶性由来の特徴的な性質と半導体として重要な各種物性の相関について世界の研究開発の現状を述べ、講演者らの研究において最近見いだされた液晶性由来の興味深い新たな半導体物性が発表される。

.....  
 【連絡先】 半那純一 東京工業大学像情報工学研究所

E-mail: hanna(at)isl.titech.ac.jp

ハイライト 分子集合体の螺旋構造：液晶のダイナミックな性質を使って螺旋構造形成の謎に迫る

【日時】12月18日(土) 午前8時50分～9時30分

【会場】313A (Convention Center)

【講演番号】ID #959 招待講演

Chirality enhancement by achiral molecules

アキラルな分子によるキラル増幅

○ 竹添秀男、(所属) 東工大院工

.....

概要：自然界では DNA 中の螺旋構造に代表されるように、分子が少しずつ回転しながら集合し、その結果それをたどると螺旋を形成しているものが多く存在している。その起源は特定の分子間相互作用に求められるものが多いが、一方、その化学構造が互いに重なるような対称要素を持たず、ちょうど鏡に移った2つの像としての対称性を示すキラル中心という構造を導入すると同じような螺旋構造が形成されることが知られている。キラル中心による螺旋構造の形成はその起源がよく判っていない。液晶では、分子集合体の柔らかさによってそれを構成する分子の並び方(配向)は小さな相互作用の影響を敏感に受け、その結果極めて大きな配向の変化や状態の変化を引き起こす。従って、一般的には螺旋構造の無い液晶状態にキラル中心を持つ化合物を微量加えるとその影響を受け、液晶分子の配向に螺旋構造が発生する。演者らは、すでに螺旋構造が形成されている液晶状態にキラル中心を持たない別の化合物を加える事により螺旋構造が増幅されるという特異的な現象を見いだした。本講演ではそのメカニズムについて考察を加えキラルと螺旋構造形成の間にある相関の解明に展望を与える。

.....

【連絡先】竹添秀男 東京工業大学大学院工学研究科有機材料工学専攻

E-mail: takezoe.h.aa(at)m.titech.ac.jp

## #226 Biological and Bio-Inspired Materials Synthesis and Assembly

## 生体材料および生体機能模倣材料の合成とアセンブリング

【オーガナイザー】：T Yong-Jin Hang (LBNL) | Jim De Yoreo (LBNL) | Tadashi Matsunaga (Tokyo Univ Agr & Technol) | Ichiro Yamashita (Panasonic, NIST) | Ruikang Tang (Zhejiang Univ)

【開催日】：12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後、17日(金) 午前・午後

【会場】：口頭発表 325A (Convention Center)

ポスター会場：Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

生体は、自己組織化プロセスによって、人工の材料には見られない精緻な構造を持つ有機や無機の材料を創出する。また、これらが高度に組み上げられることで優れた機能を発現し、新しい材料やデバイスを構築するにあたっての様々な指針を与えてくれる。このような生体材料の持つ優れた機能の利用や、生体の仕組みを利用した材料合成の手法論は、医学、薬学、光学、電気、材料などの幅広い研究分野に取り入れられるようになった。さらに、単なる生体模倣材料の域に留まらず、これを超える機能を有する新材料の研究開発が盛んに進められている。本シンポジウムでは、生体材料と生体機能模倣材料の合成・アセンブリングを主要テーマとして、当該分野に関わる世界の最先端の成果を紹介するとともにこれからの研究展開について議論を行う。

ハイライト 分子で制御する有機・無機複合材料

【日時】12月15日(水) 午前8時30分～9時

【会場】325A (Convention Center) 【講演番号】ID43 口頭

Development of Inorganic/Organic Hybrids through Macromolecular Templates

超分子テンプレートを用いた無機/有機複合材料の創製

○西村達也、加藤隆史(所属) 東京大学 大学院工学系研究科

真珠の美しい光沢や貝殻の高い機械的強度などは、有機物と無機物からなる規則的な構造に由来している。演者らは、バイオミネラリゼーションの自己組織化にならった分子制御プロセスを用いて、常温常圧の温和な条件下において、精緻な構造を有する薄膜材料を作製することに成功した。真珠層に類似した炭酸カルシウム/有機高分子複合体に加え、自然界には見られない規則的な周期構造を有するパターン化薄膜や新しい透明アモルファスハイブリッド材料の開発に成功している。さらに、有機分子を巧みに制御することにより、結晶多形の選択や結晶方位の制御された薄膜合成法などを開発した。これからの材料合成においては、高機能化に加えて省エネルギー・高い環境調和性などが要求されており、自然の仕組みに着目した演者らの合成法は、次世代材料の開発に向けた重要なアプローチであると言える。

【連絡先】E-mail: tatsuya(at)chembio.t.u-tokyo.ac.jp

ハイライト ナノセラミックスの階層構造

【日時】12月16日(木) 午後1時～1時30分

【会場】325A (Convention Center) 【講演番号】ID257 口頭

Bio-Inspired Synthesis of Hierarchical Crystals

階層構造を持つ結晶のバイオインスパイアード合成

○今井宏明、緒明佑哉(所属) 慶應義塾大学 理工学部

バイオミネラルの優れた機能は、ナノ～マクロスケールで構築される階層的な構造に由来する。しかしながら、これを人工的に再現することは容易ではない。演者らは、バイオミネラルのマクロな構造体の解析から、これを構成するナノ結晶が互いに連結し、結晶方位を揃えた組織的な構造体(メソクリスタル)であることを世界ではじめて見出した。また、このような複雑な構造を有するメソクリスタルを様々な有機分子を利用した溶液系の反応において再現することに成功し、ナノレベルから階層的に形態の制御された無機結晶-有機分子複合体の合成を可能にした。さらに、メソクリスタルの持つ高結晶性・連続性・多孔質性などの特徴を利用することで、電極や触媒材料としての応用の可能性を示している。機能性無機結晶相と有機相がナノレベルで複合化された材料として、今後幅広い応用展開が期待される。

【連絡先】E-mail: hiroaki(at)appltc.keio.ac.jp



ハイライト 基板上 S-layer (タンパク質 2 次元結晶) の再構成

【日時】 12 月 16 日 (木) 午前 8 時 10~8 時 30 分

【会場】 325A Convention Center

【講演番号】 ID 199 口頭

Self-catalyzed growth of 2D crystalline S-layers on supported lipid-bilayers: The importance of the amorphous-to-crystalline transition

○ S. Chung<sup>1, 2</sup>; S. Shin<sup>1, 3</sup>; S. Whitelam<sup>1, 3</sup>; C. Bertozzi<sup>1, 4</sup>; J. DeYoreo<sup>1, 3</sup>

1. Molecular Foundry, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, United States.

2. Physical Biosciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, United States.

3. Materials Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, United States.

4. Department of Chemistry, University of California, Berkeley, Berkeley, CA, United States.

バクテリアの外表面にある S-layer と呼ばれるたんぱく質 2 次元結晶はナノテクノロジー応用の観点から注目されているが、これまでは基板上に自発的に 2 次元結晶化することが難しかった。この発表では資質 2 重膜上の S-layer のモノマーが 2 次元結晶化することを示すと同時に、2 次元結晶成長のメカニズムについて、モノマーのアモルファス状態から結晶へ相変化する初期のクラスター形成が重要であることを示している。これにより S-layer の基板上でのより良い再構成が可能となり応用へつながる。

ハイライト DNA 折り紙とトップダウン加工の融合によるナノ構造作製

【日時】 12 月 17 日 (金) 午前 8 時 20 分~8 時 40 分

【会場】 325A Convention Center

【講演番号】 ID 475 口頭

Top-down meets bottom-up: Guided deposition of DNA origami on silicon

○ M. Lieberman<sup>1</sup>; K. Sarveswaran<sup>1</sup>; K. Kim<sup>1</sup>

1. Chemistry and Biochemistry, University of Notre Dame, Notre Dame, IN, United States.

DNA 折り紙を決められたシリコン基板上の位置に固定することは、DNA 折り紙によるナノ構造作製の重要な課題である。この発表ではトップダウンテクノロジーにより DNA 折り紙が吸着する縞状構造の自己組織化膜 (SAM) 作製を行い、シリコン基板上で選択的に DNA 折り紙を固定することに成功した。この方法は将来、トップダウン手法で作られた位置に、ナノ構造が作りこまれた DNA 折り紙を配置できることを示したもので注目される。

【連絡先】

ハイライト タンパク質超分子による水溶液中ナノデバイス作成

【日時】 12 月 16 日 (木) 午後 12 時 30 分~1 時 00 分

【会場】 325A Convention Center

【講演番号】 ID 256 口頭

Wet nanotechnology: Making functional nanostructures by proteins

○ I. Yamashita<sup>1, 2</sup>

1. Materials Science, NAIST, Ikoma, Nara, Japan.

2. ATRL, Panasonic, Seika kyoto, Japan.

この発表では、タンパク質超分子のバイオミネラリゼーションと自己組織化を利用して、ナノデバイスのキーコンポーネントを、精密に、大量に、経済的に作製する技術を提唱している。すでに、同手法で球殻状タンパク質によるナノ粒子合成、自己集合能を用いて作製したその配列を電荷保持ノードとして用いるメモリ、ナノエッチングとの組み合わせによる量子効果素子などの作製に成功しており、今後の展開が注目される。

【連絡先】 E-mail:ichiro(at)ms.nasit.jp

#172

**Clean Fuels from Coal, Natural Gas and Biomass****石炭、天然ガス、バイオマスからのクリーン燃料**

【オーガナイザー】: Charles Peden (米国エネルギー省 PNL) | Yizhuo Han(中国科学院) | 椿範立 (富山大) | Heon Jung | Yong Wang | Charles Mims | Tao Zhang | Dongke Zhang

【開催日】: 12月17日(金)夜、18日(土)午前・午後・夜、19日(日)午前・午後・夜、20日(月)午前

【会場】: 口頭発表 314 (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

**展 望**

新興国の著しい経済発展と共に、世界的にエネルギーの不足は深刻化しつつある。二酸化炭素の排出、窒素酸化物、硫黄酸化物の排出などの環境問題の解決にも向けて、石油代替エネルギーとして、資源量豊富な石炭、天然ガス、バイオマスの高度利用によるクリーンな燃料と化学品の生産が注目されている。本シンポでは各国の産官学の著名な講師による招待講演と共に、数多い口頭発表およびポスター発表が用意されている。原油価格の高騰に伴い、石炭、天然ガス、バイオマスの転換プロセスの経済性がより良くなり、新しいビジネスになりうる新規研究開発も盛んに行われている。

**ハイライト** 天然ガスの高度利用工業プロセスについて

【日時】12月18日(土)午前10時10分～10時50分 【会場】314 (Convention Center)

【講演番号】ID 338 口頭

**Challenge of Japan to Develop GTL Technology**

日本の天然ガス化学液化技術開発

○末廣能史 (所属) 独立行政法人石油天然ガス・金属鉱物資源機構

石油と比べると、天然ガスの埋蔵量が多く、二酸化炭素の排出量が少ない。在来型の天然ガス以外、メタンハイドレート、コールベッドメタン、付随ガスなども天然ガスと同じである。石油天然ガス・金属鉱物資源機構と複数の日本企業は1998年から①天然ガスと炭酸ガスから合成ガスへの転換触媒とプロセス②合成ガスから軽油へのFT合成触媒と技術③高分子炭化水素の加工技術を開発してきた。これらの最先端成果について紹介する。今後の世界範囲での展開についても予測する。

【連絡先】suehiro-yoshifumi(at)jogmec.go.jp

**ハイライト** バイオマスの転換

【日時】12月19日(日)午前10時30分～11時10分

【会場】314 (Convention Center)

【講演番号】ID 407 口頭

**Biomass Conversion into Fuels and Chemicals by Supported Metal Catalysts**

担持金属触媒を用いるバイオマスの転換

○福岡 淳 (所属) 北海道大学触媒化学研究センター

アルミナ担持白金あるいはルテニウム触媒を用いて、世界で初めてセルロースからソビトールなどのアルコールへの転換に成功した。この反応において、グルコースは中間生成物であったので、更にセルロースの水和反応について、多孔質な炭素材料を新規合成し、この多孔質な炭素材料に担持されたルテニウム触媒は高い活性を示すことを見出した。

【連絡先】fukuoka(at)cat.hokudai.ac.jp

## #10-176 Thermochemical and Metal-Catalyzed Transformations of Biomass to Petrochemical Feedstocks, Polymer Precursors and Fuels

### 石油を代替するバイオマスの熱化学・触媒変換

【オーガナイザー】: Marcel Schlaf (University of Guelph) | 富重圭一 (東北大) | Robert C. Brown (Iowa State University)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前・午後

【会場】: 口頭発表 316A (Convention Center)

ポスター会場: Convention Center

### 展 望

再生可能資源の中で唯一の有機化合物であるバイオマスは、燃料や化学品へと変換して用いることが期待されており、石油資源の代替や地球温暖化抑制に貢献できる可能性を持っている。現在、より複雑な構造をもった化合物を作る際の原料となる基礎的な化学品や、繊維・プラスチックなどの高分子材料を合成する際の原料となる前駆体物質は、石油等の化石資源を原料として製造されている。一方で、これらをバイオマス資源に含まれるリグノセルロースや炭水化物等を原料とするためには、化石資源を原料としてきた方法とは異なる、新しい合成法の開発が待たれている。このシンポジウムは、熱化学反応や分子触媒または固体触媒反応、及びそれらを組み合わせたプロセスの研究開発に関する最新のトピックスを紹介し、議論を深めることを目的とする。

### ハイライト 植物油からの化学品製造

【日時】 12月15日(水) 午後13時~13時30分 【会場】 316A (Convention Center)

【講演番号】 ID 29 口頭

Chemical modification of vegetable oils to produce novel alcohols, isocyanates and polyurethanes

新しいアルコール、イソシアネート、ポリウレタンの合成のための植物油の化学修飾

○Suresh S. Narine (所属) Trent University, Physics & Astronomy and Chemistry, Canada

植物油は、化学的には高級脂肪酸トリグリセリドであり、石鹸などの界面活性剤製造のための原料として用いられてきたのと同時に、最近、メタノールを用いたエステル交換反応を用いてバイオディーゼル燃料としての用途も増加してきている。最近はさらに植物油を原料として樹脂を合成することで石油代替を目指すことも検討されている。本研究では、植物油から誘導したポリオールを石油から誘導したジイソシアネートを用いてプラスチックのシートやゴムを合成する方法や、植物油から合成したジイソシアネートとバイオマス由来のポリオールを用いてポリウレタンを合成する方法を紹介する。これらと同時に、合成した物質について経済的な見込みや石油代替効果等について検証した結果も報告する。

【連絡先】 Trent Univ, Dept Phys & Astron, Trent Univ Biomat Res Program, Peterborough, ON K9J 7B8 Canada

E-mail: sureshnarine(at)trentu.ca

## # 180 The Chemistry, Structure, and Properties of Fuel Cell Membranes

## 燃料電池用電解質膜の化学、構造、性質

【オーガナイザー】: Michael Hickner (Penn State U., USA) | Michael Eikerling (Simon Fraser U., Canada) | Qing Wang (Penn State U., USA) | 宮武健治 (山梨大) | Stephen Paddison (U. Tennessee, USA)

【開催日】: 12月19日(日) 午前・午後、20日(月) 午前

【会場】: 口頭発表 315 (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

クリーンでエネルギー効率の高い燃料電池は、火力発電に替わる発電手段として、また電気自動車・携帯機器・家庭用の電源として、早期の実用化が期待されている。すでに定置用燃料電池は実用化され普及に向けた活動が活発であるが、電気自動車を含めた広範な普及のためには更なる技術革新が必要である。特に、その心臓部分である電解質膜の開発研究には産業界から大きな期待がかけられている。本シンポジウムでは、燃料電池用の電解質膜について焦点を当て、合成、理論とシミュレーション、構造と物性解析、新概念、など幅広く最新の話題を集めた。燃料電池の高性能化、高耐久化、低コスト化を可能とする次世代電解質膜技術について展望する予定である。

## ハイライト 燃料電池膜におけるマイクロ構造と物質輸送

【日時】 12月19日(日) 午前7時30分～8時00分

【会場】 315 (Convention Center)

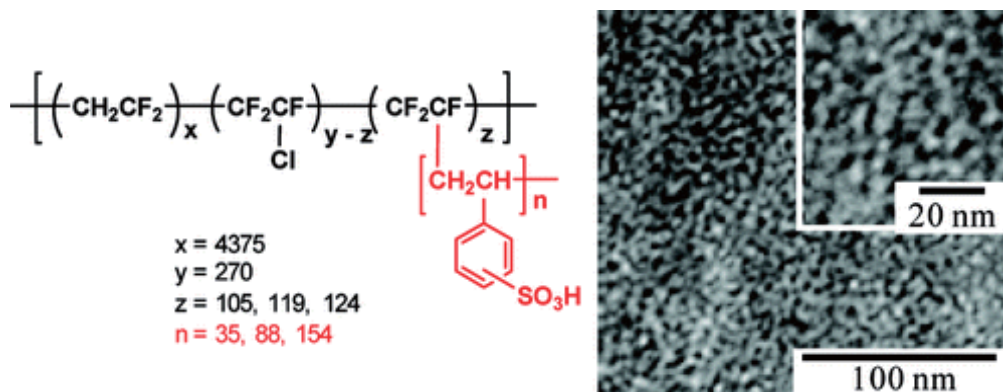
【講演番号】 ID 409 口頭

## Transport and microstructure in solid polymer electrolytes

固体高分子電解質膜における物質輸送とマイクロ構造

○S. Holdcroft, E. M. Tsang, A. Yang, Z. Shi, Simon Fraser Univ., Burnaby, BC, Canada

固体高分子電解質膜における分子構造と物性の関係を解析し、プロトン伝導特性を掌る因子を明らかにすることが本研究の目的である。著者らは、モデル高分子としてフッ化ビニリデン、塩化トリフルオロエチレン、スルホン酸化スチレンの三元共重合系を選択し、それらの組成と鎖長を厳密に制御したブロック共重合体やグラフト共重合体を合成した。スルホン酸化率（またはイオン交換容量 IEC）が同じ場合には、短いイオン性グラフト鎖を有する共重合体が比較的大きな親水性ドメインを形成し、連結性のよいイオンチャンネルを持つ相分離構造を示すことが明らかとなった。その結果、耐水性が高く含水した際の形状安定性にも優れ、高いプロトン導電率を示す高い IEC 値 (2.50meq/g) の電解質膜を創製できた。



【連絡先】 400-8510 山梨県甲府市武田 4 山梨大学 クリーンエネルギー研究センター  
 宮武 健治  
 電話 055-220-8707, E-mail: miyatake(at)yamanashi.ac.jp



## # 11-28 Green Chemistry and Micro/Small Scale Chemistry in the Curriculum 学校教育におけるグリーンケミストリーとマイクロ/スモールスケール実験

【オーガナイザー】: 荻野 和子 (東北大) | Mary Kirchhoff (ACS) | Supawan Tantayanon (Chulalongkorn Univ)

【開催日】: 12月15日(水) 午前(口頭)・午後(口頭)、16日(木) 午前(口頭), 夕方(ポスター)

【会場】: 口頭発表 Tapa III (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

本シンポジウムのテーマは、「環境にやさしい化学」の学校教育への導入である。エネルギー・資源を節減、環境との共生という観点から、化学プロセスや生産物を見直そうというグリーンケミストリー (GC) は、化学および化学産業が持続的社會に貢献するために不可欠であり、その推進には、教育が重要である。そのためには、GC の理念を初中等教育から大学にいたる学校教育に導入することが必要である。学校における「環境にやさしい化学」のもう一つの取り組みが、化学実験のスケールを小さくするマイクロスケール実験 (以下 MC と略記) である。MC は、環境への負荷の軽減に加えて、エネルギー・資源の節減、安全性が増すという大きな利点があり、現在多くの国で取り入れられている。

本シンポジウムでは、環太平洋諸国及びイスラエル、クウェート、ドイツから GC, MC の代表的な研究者、教員により多数の発表 (本シンポジウムの発表件数は 32 件, うち招待講演 12、一般講演 9、ポスター発表 11) が予定されている。これらの発表と討議、経験と情報の共有は、各国の GC 教育の広がり浸透、MC の普及に大きく寄与するものである。

12月15日の発表は主として GC 教育、12月16日午前の発表は MC についてである。

### ハイライト 世界各国の GC 教育とマイクロスケール実験の最前線

海外の GC 教育についてアメリカ化学会化学教育責任者の M. Kirchhoff 博士、オーストラリア、モナシュ大学グリーンケミストリーセンターの斎藤敬博士の招待講演が、MC については、タイ化学会会長 S. Tantayanon 教授、クウェート化学会会長 A.A. Alnajjar 博士等の招待講演がある。我が国については以下の発表がある。

【日時】 12月15日 (水) 午後 1:30~2:00 【会場】 Tapa III (Hilton)

【講演番号】 ID 15 口頭

#### Introduction of the concept of green chemistry into education

グリーンケミストリーの概念の教育への導入

○荻野和子 (所属) 東北大学

我が国では 2000 年にグリーンサステイナブルケミストリーネットワーク (GSCN) に産学官の連携で設立された。以来 GSCN では、GC 教育に取り組んできた。一方、日本化学会には 2001 年にマイクロスケール化学実験ワーキンググループが設けられ、MC の開発と普及に取り組むとともに MC の導入の際に、グリーンケミストリーの理念を生徒・学生に教えるように提唱してきた。我々の開発した MC は環境にやさしいばかりではなく、楽しく、また、短時間で実施できるのが特色で、理科離れの防止にも有効である。現在では、小学校一大学である程度 MC が広がり、「グリーンケミストリー」もよく知られた言葉となっている。

【連絡先】 電話 022-233-6388, E-mail oginok(at)m.tohoku.ac.jp

### ハイライト イオン液体を題材とする教材の開発

【日時】 12月15日 (水) 午前 10:30~11:00 【会場】 Tapa III (Hilton)

【講演番号】 ID 13 口頭

#### Development of environmentally benign teaching material using ionic liquid

イオン液体を用いた環境にやさしい教材の開発

○高木由美子 (所属) 香川大教育

イオン液体はイオンだけで構成され、常温でも液体である。不揮発性・難燃性で、安全性が高く、GC では有機溶剤の代替溶剤として注目され、また機能性材料としても幅広い用途が期待されている。不思議な性質をもつ物質で、開発した教材は、生徒・学生の興味・関心を惹くことに成功した。

【連絡先】 電話 087-832-1461, E-mail: ytakagi(at)ed.kagawa-u.ac.jp

## # 11-185 Women at the Forefront of the Time: Challenge toward Next Decade

## 女性科学者の活動の最前線 — 次の10年への挑戦

【オーガナイザー】: Elizabeth Ann Nalley (Cameron Univ.) | 相馬芳枝 (神戸大) | So-Yeop Han (Ewha Womans Univ.)

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後、18日(土) 午前・夕方

【会場】: 口頭発表 Tapa II (Hilton)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

文科省は平成18年から女性研究者の活躍促進に対して大型予算を付けるようになり、女性研究者支援の夜明けが訪れた。今まで、育児中の女性研究者は研究と育児との両立に悩んできたが、平成18年にスタートした「女性研究者支援モデル育成」事業では、研究と育児との両立を可能にするために職場の環境改善をめざしている。今までに55の大学・研究機関が職場内の保育所設置、育児中の女性研究者への研究補助者の配置等、様々なシステム改革をしてきた。また、平成21年からは、女性研究者の採用増を目指す「女性研究者養成システム改革加速」事業がスタートし、現在、12の大学が女性教員の採用増をめざして頑張っている。女性枠による採用をしている大学には、優秀な女性研究者が沢山応募している。

ハイライト 北海道大学における女性研究者のためのプロジェクト

【日時】12月17日(金) 午前9時40～10時05分 【会場】Tapa II (Hilton)

【講演番号】ID 78 口頭

Project for female scientists at Hokkaido University

北海道大学における女性研究者のためのプロジェクト

○ 加藤昌子、有賀早苗 (所属) 北海道大学 大学院理学研究科

北海道大学では、2006年に女性研究者支援プロジェクトを開始し、「2020年までに女性研究者の割合を20%にする」という目標 (Triple Twenties) をたてた。意識改革のためにシンポジウムを開き、病後時保育を始め、女子学生を増やすために女子高校生対象のオープンキャンパスを行った。2009年からは、女性教員を増やすプロジェクトを始め、2009年には5人の女性教員が採用された。

【連絡先】〒060-0810 札幌市北区北10条西8丁目 北海道大学大学院理学研究院  
電話 011-706-3817, E-mail: mkato(at)sci.hokudai.ac.jp

ハイライト 日本化学会の男女共同参画

【日時】12月18日(土) 午後7時～9時

【会場】Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

【講演番号】ID 120 ポスター

Activities of the gender equality committee of the Chemical Society of Japan

日本化学会の男女共同参画に関する活動

○ 相馬芳枝 (神戸大学)、佐々木政子 (東海大学)

日本化学会の男女共同参画推進委員会は、2002年に発足した。日本化学会の一般会員の女性比率は約10%であるが、学生会員の女性比率は約20%と上昇しつつある。今まで年度の度、男女共同参画シンポジウムを開催し、2010年3月には第10回記念シンポジウムを開催した。学会期間中の保育室は2001年から開いている。女性理事は26名中1名であるが、増えることが期待される。

【連絡先】相馬芳枝 (神戸大学) E-mail: y-souma(at)kce.biglobe.ne.jp  
〒657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1 神戸大学 男女共同参画室

## # 12-003 Advances in the Chemistry of Targeted Radionuclide Therapy

## アイソトープを用いた標的治療のための化学の進展

【オーガナイザー】: D. S. Wilbur (Washington Univ) | M. Adams (Triumpf) | 荒野 泰 (千葉大) | J. M. Jeong | S. V. Smith

【開催日】: 12月17日(金) 午前・午後、18日(土) 午前

【会場】: 口頭発表 316B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

細胞殺傷性の高い $\beta$ 線を放出するイットリウム-90 ( $^{90}\text{Y}$ ) で標識された抗 CD20 抗体は、これまで治療が困難とされたがん患者に対して高い奏効率を示し、世界中で多くの患者の命を救ってきた。この臨床結果が契機となり、 $\alpha$ 線や $\beta$ 線を放出するアイソトープを選択的にがんを集積させて、その治療を行う Targeted Radionuclide Therapy (TRT) は、化学療法や抗体治療では効果の観られないがんに対する有効性の高い治療薬として新たな注目を集めている。本シンポジウムでは、① TRT 薬剤に対する臨床医からの提言に続き、 $^{90}\text{Y}$  標識抗 CD20 抗体に続くがん治療薬剤の開発に必要とされる② TRT に適した新たな放射性核種の製造、③ がん治療効果を向上する標識薬剤の新たな分子設計、④ TRT に適した放射性核種による抗体等の標識に有用な新たなキレート試薬、⑤ 新たな標識薬剤の実験動物における治療効果、等に関する最新の研究成果が発表される。

ハイライト 高比放射能  $^{177}\text{Lu}$  で抗体を簡便に標識してがんの治療に応用する

【日時】 12月17日(金) 午後2時15分~2時40分 【会場】 316B (Convention Center)

【講演番号】 ID 268 口頭

Novel method to prepare Lu-177 labeled antibodies for cancer therapy

がん治療を目的とした Lu-177 標識抗体作製の新たな方法

○花岡 宏史、遠藤 啓吾 (所属) 群馬大学 大学院医学系研究科

Lu-177 は、がんのアイソトープ治療に適した半減期と放射線を放出する金属放射性核種である。本研究では、抗体標識に適した高比放射能 Lu-177 を  $^{176}\text{Yb}(n, \gamma)^{177}\text{Yb}$  で作製した後、半減期の短い  $^{177}\text{Yb}$  (半減期: 1.9 h) の壊変で生成する  $^{177}\text{Lu}$  を使用することで高比放射能の  $^{177}\text{Lu}$  の製造を可能とした。また、抗体との結合反応についても、従来は、抗体にキレート試薬を結合した後、 $^{177}\text{Lu}$  との索形成反応により作製していたが、本研究では、 $6-\pi$  azaelectrocyclization を利用して、 $^{177}\text{Lu}$  とキレート試薬との錯体を合成した後、抗体と  $^{177}\text{Lu}$  錯体を結合する方法を開発した。

なお、高比放射能  $^{177}\text{Lu}$  の製造に関する詳細については、共同研究者らが、12月18日午前10時~12時の間、Halls II and III (Convention Center)においてポスター発表を行う予定である (ID: 341)。

【連絡先】 371-8511 群馬大学大学院医学系研究科

E-mail: hhanaoka(at)med.gunma-u.ac.jp

**(12月18-20日、コンベンションセンター:316C) シンポジウム番号[12-071]**

**がん組織を光増感剤投与とレーザーで蛍光診断と照射治療する  
光線力学診断(PD)・治療(PDT)法の光化学と臨床治療シンポジウム**

オーガナイズ総括責任者:福井大学・医学部・腫瘍病理学:三好憲雄 ([nmiyoshi@u-fukui.ac.jp](mailto:nmiyoshi@u-fukui.ac.jp))

Janet Morgan(USA), Roy Pottier(Canada), Qian Peng(China)

**12月18日(土) PM7-9[ID371] 光線力学治療(PDT)と診断(PD)の歴史と展望[ハイライト-1]:**

主催者の三好憲雄(福井大学・医学部)が"In hope of getting over the present state of clinical PDT", 「臨床での PDT の現状を乗り越えて望む」の演題で、PDT と PD の歴史を振り返りながら PDT と PD の作用機序と臨床応用の現状、特に医療用レーザーの技術革新の期待と展望を紹介する。来るべき高齢化社会のがん死亡率の増大に伴う医療保険の負担軽減やリスクの少ない高齢の癌患者さんに対する、新しく理想的がん治療法として今後益々流布して行く事を期待した講演内容です。

**12月19日(日)AM7-11 [ID 490] PDTとPDのベースとなる光化学的研究 [ハイライト-2]:**

吉田孝人(浜松医科大学)が"PDD-PDT monitoring system of tumors based on real-time fluorescence spectrophotometry and MALDI-TOF-MS analysis", 「腫瘍の PDD と PDT におけるリアルタイムの蛍光モニタリングシステムと顕微質量分析装置による分析」の演題で、演題名の通りにリアルタイムで、照射中の情報を蛍光や質量分析装置で治療効果までをモニター出来るのは世界的に見ても大変斬新的な分析法であり、今後臨床応用にも期待が持てる講演内容である。

**12月19日(日)PM12-16 [ID 510] PDTとPDTの臨床研究 [ハイライト-3]:**

加藤治文(東京医科大学名誉教授・現新座志木中央総合病院名誉院長)が"The present status and future of PDT in lung cancer", 「肺癌における PDT の現状と将来」の演題で、世界で最初の肺癌治療経験を基に、世界に誇れる多くの症例数から、この PDT の治療法が如何に安価で安全ながん治療法であるのかを実例を示しながら、新しい PDT の現状と将来像についての講演内容である。

**12月20日(月)AM7-11 [ID 548] 5-アミノレブリン酸(5-ALA)ワークショップ [ハイライト-4]:**

田中 徹(SBI ALApromo Co.)が"Development of production method and usage of 5-aminolevulinic acid (5-ALA)", 「5-ALA の製造法とその利用法の開発」の演題で、悪性脳腫瘍の世界に誇れる蛍光診断切除術として治験(第II相期)で使用するヘムの前駆体 5-ALA の日本独自の製造に長年携わってきた本人から、その製造開発の工程や今後の 5-ALA 利用法についての展望について、実例を挙げながら幅広い活用方法の紹介についての講演内容である。

「展望」上記4つの半日セッションを代表する講演をそれぞれ1演題ずつハイライト講演として選択した。今後の急速な高齢化社会にマッチした、この光線治療(1903年のN.R. Finsenのノーベル賞受賞)とほぼ同時にスタートした放射線領域(1901年のレントゲンの発見)の技術革新に比べて、極めて安全で安価な医療保険に貢献できる理想的ながん診断・治療法である事は疑いもない事実である事を、上記のハイライト講演から納得して頂きたい。



## #12-110 Understanding the Chemistry of Phytochemical Antioxidants and their Role in Human Health and Wellness

### フィトケミカル抗酸化物質の化学とヒトの健康・快適性におけるそれらの役割の理解

【オーガナイザー】: Rong Tsao (Agriculture & Agri-Food Canada) | Liangli (Lucy) Yu | Fereidoon Shahidi | 寺尾純二 (徳島大)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前 午後 夕方

【会場】: 口頭発表 321A (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

フィトケミカル(植物が生産する低分子の化学物質)である抗酸化物質はヒトの健康維持と慢性疾患の予防に重要な役割を担うと考えられている。しかし、抗酸化物質の化学とそれらのヒトの健康における役割には不明な点が多く残されている。例えばヒトの抗酸化防御機構におけるそれぞれの抗酸化物質の寄与およびそれらの相互作用は全くわかっていない。近年、抗酸化物質が示す逆作用(酸化促進作用)や拮抗作用にも目が向けられはじめたが推論の段階に過ぎない。最近の多くの論文は矛盾した結果を報告しており、抗酸化物質の概念に混乱が生じている。結果の不一致は実験モデルの相違や抗酸化物質それ自体の多様な化学構造に由来するため、最適なモデル実験系の構築と抗酸化物質の相互作用の理解が求められる。本シンポジウムは2005年 Pacifichem "Chemistry and Biochemistry of Phytochemical Antioxidants" に続くものであるが、ニュートリゲノミクス(栄養分子遺伝情報学)等の新しい分野を含めることにより、抗酸化物質の相乗作用や拮抗作用およびヒトの健康・快適性における抗酸化物質の役割の解明に迫ろうとするものである。

#### ハイライト 大豆イソフラボンの新しい標的分子

【日時】12月16日(木) 午後2時15分~2時42分 【会場】321A (Convention Center)

【講演番号】ID 104 口頭

#### Genistein suppresses lipopolysaccharide-induced downregulation of programmed cell death 4 in RAW 264.7 macrophages

ゲニステインはリポ多糖による Pcd4 の発現低下をマクロファージにおいて抑制する

○村上 明、保田倫子、Nancy H. Colburn\*、入江一浩

(所属) 京都大学大学院農学研究科、\*米国国立癌研究所

炎症は、がんや動脈硬化など多く生活習慣病の発生機構に関与している。従って、炎症反応に寄与する新規生体分子を発見することは、それらの予防や治療戦略において重要である。

本研究では、種々の炎症モデルにおいて Pcd4 というタンパク質の発現が増加していることを発見した。また、Pcd4 の発現を低下させると代表的な炎症性タンパク質である TNF- $\alpha$  の発現が400倍近くも上昇したことから、Pcd4 が TNF- $\alpha$  の抑制分子であることを初めて見出した<sup>1)</sup>。

さらに、食品因子総計18種について、Pcd4 の発現低下抑制作用を評価したところ、唯一活性を示したのが大豆イソフラボンの1種であるゲニステインであった<sup>2)</sup>。

以上から、多くの生理機能が報告されているゲニステインの作用機構に Pcd4 が関与し、また、炎症を制御する上で Pcd4 が新しい標的分子となる可能性が示唆された。

#### 【発表論文】

1) Yasuda M, et al., Mol Carcinog, 2010;49:837-48

2) Yasuda M, et al., Biosci Biotechnol Biochem, 2010;74:1095-7

【連絡先】村上 明

E-mail: cancer(at)kais.kyoto-u.ac.jp

ハイライト フラボノイドによって廃用性筋萎縮を予防する

【日時】12月16日(木)午後1時48分～午後2時15分

【会場】321A (Convention Center)

【講演番号】ID: 103 口頭

Disuse muscle atrophy is prevented by flavonoids

廃用性筋萎縮に対するフラボノイドの予防効果について

○ 向井 理恵、河村 知志、藤倉 温、林 萌未、根本 尚生、二川 健、山本 浩範、武田 英二、寺尾 純二  
(所属)徳島大学ヘルスバイオサイエンス研究部

骨格筋はエネルギー代謝や運動に重要な役割を果たす組織であり、筋量の維持は生活の質を維持する上で重要である。骨格筋の萎縮は運動不足や加齢によって引き起こされ、萎縮が起こった骨格筋では各種酸化ストレスマーカーの上昇が認められる。

本研究では、筋萎縮モデル動物の骨格筋へ抗酸化性フラボノイドであるケルセチンを直接投与した場合、脂質の酸化ストレスマーカーである TBARS の上昇を抑えるとともに、骨格筋量の維持に貢献する結果を得た。同時に、ケルセチンは骨格筋タンパク質の分解に寄与するユビキチンリガーゼ(Atrogin-1、MuRF1)の発現量を低下させることを見出した。これらの結果から、抗酸化フラボノイドがユビキチンリガーゼの発現を抑制し、筋萎縮を予防する可能性が示された。さらに食生活を通じた筋萎縮予防を目指し、フラボノイドを経口摂取した場合の効果について、酸化ストレスとの関連を含めて研究している。

発表論文

Rie Mukai et al, *J Nat. Prod.* 2010, 73, 1708-1710

【連絡先】向井 理恵 E-mail: rmukai(at)nutr.med.tokushima-u.ac.jp

## #153 Nucleic Acid Based Therapeutics

## 核酸創薬

【オーガナイザー】:

Muthiah Manoharan (Alnylam Pharmaceuticals, USA) | Masad J. Damha |  
松田 彰(北大)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午前、午後、夜(ポスター)

【会場】: 口頭発表 316C (Convention Center) (15 午前午後, 16 午前)、304B (16 午後)  
ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

## 展 望

容易に創薬が可能な低分子創薬の標的が枯渇しつつある。それに対して、異なった標的を狙えることから高分子創薬が注目を集めている。核酸創薬はその一翼を担っているが、種々の困難点にも遭遇している。本セッションでは、従来からのアンチセンス法のみならず、RNA 干渉 (siRNA, miRNA)、デコイ、アンチジーン DNA・RNA、アプタマーなどの新規方法論、開発や細胞・組織内送達法や新しい標的などについて討論される。

ハイライト プリオンタンパク質に結合する RNA アプタマー

【日時】12月15日(水) 午前10時05分~10時25分 【会場】316C (Convention Center)  
【講演番号】22 口頭

Structure and interaction of an RNA aptamer with potential therapeutic use

プリオンタンパク質 (に対する RNA アプタマーの構造・相互作用と治療への応用

○片平正人 (所属) 京都大学エネルギー理工学研究所

牛プリオンタンパク質 (bPrP) に対する RNA アプタマーを取得した。bPrP のβイソ型にアプタマーの r(GGAGGAGGAGGA)(R12) が強く結合する。この構造の詳細と治療への応用の可能性について述べる。

ハイライト siRNA の最先端

【日時】12月15日(水) 午前10時55分~11時25分 【会場】316C (Convention Center)  
【講演番号】24 口頭

Development of RNAi therapy

RNA 干渉治療薬の開発

○ J. Maraganore (所属) Alnylam Pharmaceuticals

RNA 干渉法を用いる核酸創薬を行っている米国バイオベンチャーが、肝がん (VEGF siRNA や Eg5, Kif11 siRNAs) などを標的とする治療薬の最近の開発状況を説明する。

ハイライト 核酸医薬の組織・細胞内送達法の最先端

【日時】12月16日(木) 午前7時30分~10時20分 【会場】316C (Convention Center)  
【講演番号】74-80 口頭

核酸医薬をどのようにして標的組織に送達するかが、核酸創薬の成功の鍵を握っていると言っても過言ではない。本セッションでは、合成超分子、合成高分子、アテロコラーゲン、多糖とポリペプチドのブロックコポリマー、カイロミクロンを利用する核酸医薬送達法の詳細が述べられる。

## #284 Assembling New Biomedical Materials for Tissue Regeneration

### 組織再生に向けたバイオマテリアルの新展開

【オーガナイザー】: J Ramshaw, T Shimizu, S Zhang

【開催日】: 12月18日(土)午前、18日(土)午後

【会場】: 口頭発表 320 THEATRE (convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

近年再生医療の進歩はめざましく、骨、軟骨、血管、膀胱、角膜疾患に対する臨床応用が始まっている。再生医療においては単に不全・欠損部に細胞を注入するだけでなく、生体吸収性のバイオマテリアルを支持体として用い、そこに細胞を播種培養することで組織を再生し移植する治療法(ティッシュエンジニアリング)が広く開発されている。また生体吸収性の支持体を用いずに細胞をシート状に回収、細胞シートを積層化することで組織を再生する日本発世界初の再生医療も始まっている。今後の再生医療分野のさらなる発展には新規のバイオマテリアル開発が必須であり、本セッションでは再生医療に関わるバイオマテリアル研究を中心とした発表が行われる。

ハイライト 細胞シートを利用した新たな再生医療を実現するための材料開発

【日時】12月18日(土)午前10時15分~10時40分 【会場】320 THEATRE (Convention Center)

【講演番号】ID328 口頭

Thermoresponsive polymer brushes for optimizing cell sheet harvest: precise control of chain length and graft density

温度応答性高分子ブラシを利用した細胞シート作製の最適化: ブラシ鎖長とグラフト密度の精密制御

○高橋宏信、中山正道、岡野光夫 (東京女子医科大学 先端生命医科学研究所)

当研究所では、新たな組織・臓器の再構築を可能にする新しい再生医療の可能性を追求しており、シート状に組織化された細胞“細胞シート”を再生医療に応用するという新たな技術を提唱してきた。この技術に必須な細胞培養基材が、温度に反応して性質が変化する高分子でコーティングされた温度応答性培養皿である。温度応答性高分子 poly(N-isopropylacrylamide) (PIPAAm) は通常の培養温度下では細胞が接着できる表面であるのに対し、32℃以下にすることで細胞非接着性の表面へと変化する。この特性を利用することで、温度変化によって細胞シートを回収することが可能となる。現在では各種の方法で PIPAAm をコーティングした細胞培養皿が開発されており、細胞シートの臨床応用に向けて展開している。本講演では、新たな機能性を追求した次世代の温度応答性培養基材の開発について報告する。

これまでの温度応答性培養基材とは異なる高分子ブラシ構造を有する PIPAAm のコーティング手法を採用し、高分子の鎖長と密度を制御することによって温度応答性をコントロールすることに成功した。さらに、高分子の末端を修飾することにより、新たな機能性を付与することが可能となる。細胞シートをより幅広く再生医療へと応用するにあたり、様々な細胞種を利用して細胞シートを作る必要がある。治療部位ごとに出てくる様々なニーズに応えるべく、機能化した新規な温度応答性培養基材の開発が今後も望まれている。

【連絡先】162-8666 東京都新宿区河田町 8-1 TWIns

電話 03-5367-9945 (6224), E-mail: [htakahashi\(at\)abmes.twmu.ac.jp](mailto:htakahashi@abmes.twmu.ac.jp)



## #13-137 Targeting Chemical and Biological Warfare Agents 生物・化学テロ対策技術

【オーガナイザー】: Ashok Mulcahndani (UC Riverside) | A. Bassi (University of Western Ontario) | 末 信一郎 (福井大)

【開催日】: 12月15日(水) 午前・午後、16日(木) 午後

【会場】: 口頭発表 303B (Convention Center)

ポスター会場: Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

### 展 望

現在の国際社会では、常にテロなどの破壊行動にさらされているといっても過言ではない。安心・安全な社会の構築は国民の幸福であり、科学技術がテロや犯罪の防止に大きく関わることが望まれている。このシンポジウムでは、生物・化学テロを未然に防ぐための毒物や爆発物を事前に高感度に検知する(センシング)技術を中心に、生物・化学テロを受けた際に速やかな現場での除染などの対処方法などについて議論される。

ハイライト 生物・化学テロに対する効果的な除染および検知技術

【日時】12月15日(水) 午後4時~4時20分 【会場】303B (Convention Center)

【講演番号】ID #28 口頭

Comprehensive on-site decontamination technologies for chemical and biological warfare agents based on molecular recognition adsorption and photocatalytic degradation

生物化学剤の現場除染に分子認識と光触媒を活用した総合技術を提案

○瀬戸康雄(所属) 科学警察研究所法科学第三部、鶴沢浩隆(所属) 産業技術総合研究所バイオニクス研究センター、川原一芳(所属) 関東学院大学工学部、竹内浩士(所属) 産業技術総合研究所環境管理技術研究部門、西田芳弘(所属) 千葉大学園芸学部、古野正浩(所属) ジーエルサイエンス、西光晴(所属) アクティスカンパニー研究開発部、他 20名

東京地下鉄サリン事件や合衆国東海岸郵便物炭疽菌事件のような生物化学テロに際しては、散布現場、被害者の速やかな除染が重要である。これまでは、大量の水で洗い流す、次亜塩素酸などの除染剤が用いられていたが、除染水の処理、除染剤の高毒性、非効率性など問題点が多く、有効な現場処理とは言えない。そこで我々は、日本独自の科学技術を活用して新規な除染システムを開発し、実剤を用いて有効性を検証した。リシンなどの生物毒素やウイルスに対しては、糖鎖誘導体やフェージディスプレイ人工タンパク質などの分子認識素子とモノリス吸着体やポリマーを活用した生物毒素の特異的吸着法を開発し、除染水からの選択的な除去方法として提案する。サリンなどの神経ガスに対しては、細菌由来の有機リン分解酵素を用いたバイオリクター法を開発した。化学剤全般と細菌に対しては、光触媒を用いた分解法を開発し、汚染大気および除染水の分解、殺菌方法として提案する。

【連絡先】277-0882 千葉県柏市柏の葉6丁目3番地1 科学警察研究所

電話番号: 04-7135-8001

ハイライト 有機リン系毒物の微生物による検出システム

【日時】12月16日(木) 午後3時20分~3時40分

【会場】Kamehameha Halls II and III (Convention Center)

【講演番号】ID #26 口頭

Yeast co-displaying enhanced green fluorescent protein and organophosphorus hydrolase in combination with a cell chip for detection of organophosphorus compounds

有機リン分解酵素と蛍光タンパク質を表層提示した酵母を用いた有機リン系毒物の検出システム

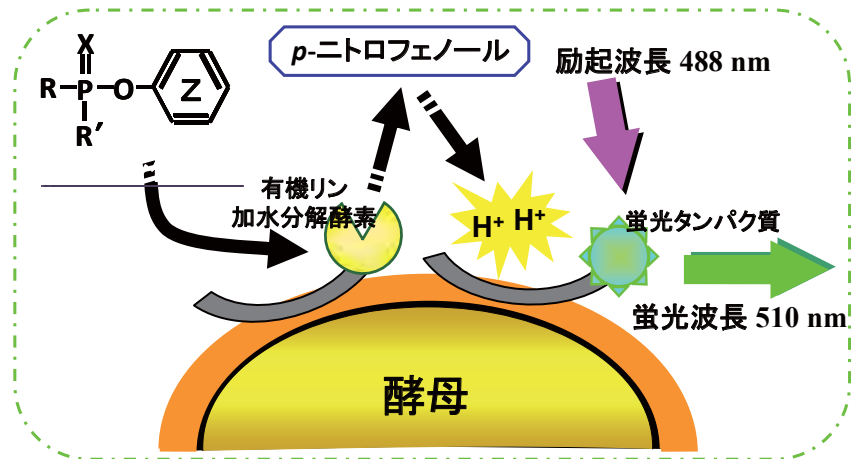
○末 信一郎、土屋圭司、牧島央和、福田剛士(所属) 福井大学、黒田浩一、植田充美(所属) 京都大学、Ashok Mulcahndani(所属) UCRiverside

近年、有機リン化合物による環境汚染や残留農薬による輸入食品の汚染が大きな問題となっている。また有機リン化合物は化学テロの強力な手段のひとつである。演者らは有機リン蛍

光センシングシステムの構築を目指して有機リン加水分解酵素（OPH）と蛍光タンパク質（EGFP）を酵母細胞表層上へ共発現させたアーミング酵母を用いて、酵母細胞表層上のEGFPの消光による有機リン検出システムを構築した。さらに細胞1個を収納できるスペースにこの酵母を閉じ込め、有機リンとの反応による蛍光の消失によって有機リンを検出することに成功した。

### 有機リン加水分解酵素と蛍光タンパク質の細胞表層提示酵母

有機リン加水分解酵素であるOPHと蛍光タンパク質であるEGFPを細胞表層上に提示した酵母（アーミング酵母）による有機リン化合物のバイオセンシングを行ってきた



【連絡先】 910-8507 福井市文京 3-9-1 福井大学大学院工学研究科  
E-mail: suyeb10(at)u-fukui.ac.jp