

数物科学専攻	研究分野	分子物理学	Lab. ID MP10
研究室Webサイト	http://www.s.kanazawa-u.ac.jp/phys/bunshi/molphys/index.html		
研究課題の概要			
<p>有機分子を例にとってみればわかるように、分子には少ない種類の原子から構成されていても、多種多様なものが存在します。同じ化学組成式の分子であっても、結合の組み合わせの異なる構造が複数存在し、さらにその中でも三次元構造の違うものがあります。分子の幾何学的構造はその性質を支配し、分子から構成される物質の物理・化学的性質を決定します。例えば、生体物質の場合、キラリティー(対掌性)の違いによって、一方は薬として働き他方は毒物になってしまう場合もあります。さらに分子どうしの集合化によって分子の多様性は大きく拡張してゆき、新たな性質や機能を備えてゆきます。</p> <p>この研究室では特に、有機分子の構造や性質が、単体の場合と水素結合分子錯体を形成した場合にどのように変化していくのかを実験的に明らかにすることで、水溶液中での分子の物理化学的性質や挙動をミクロな視点から解明することを目的としています。水溶液中での個々の分子のミクロな構造や挙動を正確に観察することは現在においても極めて困難です。水素結合分子錯体とは分子同士が水素結合を形成して結合した状態です。水分子と結合したものはミクロ溶媒和クラスターとも呼ばれ、水和・溶媒和状態の最も基本的なモデルです。水素結合は共有結合などの化学結合と比べるとかなり弱く、溶液中のみならず気相中でも衝突によってすぐに切れてしまいます。そのため錯体の寿命は短く、スペクトルの測定は困難となります。我々は、超音速パルスジェットという技術を用いて高真空中に極低温分子流を生成し、並進温度1K程度の準孤立状態を実現して水素結合錯体を安定に存在させ、その純回転スペクトルの詳細・精密な測定を実現させています。この方法は、超音速パルスノズルジェット-フーリエ変換マイクロ波分光法と呼びます。純回転スペクトルとは、分子全体の回転運動に対応するエネルギー準位間の遷移によるスペクトルで、通常マイクロ波領域で観測されます。回転エネルギー準位には分子の幾何学的構造が強く反映されるため、純回転スペクトルの測定からは正確な分子構造の特定が可能です。また極めて高いスペクトル分解能のため、水分子の結合数、結合位置およびその配向状態の異なる錯体のスペクトルを完全に分離測定できます。更に、分子振動や分子内トンネリング運動等の動的挙動に関連した情報も正確に得ることができます。</p> <p>これまでに、N-メチルアセトアミド-水錯体のメチル基内部回転ポテンシャルの研究や、乳酸メチル-水錯体およびグリコール酸メチル-水錯体における水の配位数と配位位置による性質の違い、について研究してきました。N-メチルアセトアミドは、タンパク質の主鎖となるペプチド鎖のモデル分子であり、ペプチド鎖の柔軟性に対する水素結合形成の影響を明らかにすることを目指しています。乳酸メチルとグリコール酸メチルは分子内水素結合を有する分子で、水溶液中での水分子との水素結合と分子内水素結合の競争と協同効果についての理解を目的としています。今後は、新たな測定方法や解析方法の開発を行い、これまでの研究の成果を更に深め、発展させていく計画です。</p>			
博士前期課程/後期課程院生の指導方針、具体的なカリキュラム、研究室での活動等			
<p>全員で、ゼミおよび演習と研究活動報告会を、それぞれ週1回程度行います。ゼミは分子物理学と分子分光学の両方に関連したテキストを使用しますが、かなりの部分は量子力学の学習です。必要に応じて、研究に関連した実験や理論のテーマを選び、教員が全員または個別に授業を行います。実験装置はたいいていの場合一人でも動作・測定が可能です。研究室共用装置です。一つの分子のスペクトルの測定には通常2~3カ月の期間を要するため、自身の研究のために装置を使用できる時間はかなり限られてしまいます。従って、自分の測定期間中は、特に時間を無駄にしない注意し、集中して実験に取り組まなければなりません。また、各自の研究内容や興味に応じて、プログラム言語(Fortran, LabVIEW, MATLAB等)やCADソフトの学習支援、または量子化学計算ソフト(Gaussian)の使用法の指導なども行います。</p> <p>課題研究のテーマは、学生の希望を聞いたうえで、遅くとも前期中には確定します。研究方法は、「スペクトルの測定と解析」、「装置の改良または開発」、「新たなスペクトル解析理論・方法の開発とプログラミング」、「量子化学計算を用いた実験結果の考察と分子の性質のさらなる理解」等があります。理想的には、①新たな装置を開発し、②それまで観測できなかったまったく新しい種類の分子のスペクトルを測定・帰属し、③その解析理論を検討してプログラムを構築して解析を行い、④決定した分子定数から幾何学的構造を特定するとともに分子内運動の様子を明らかにし、⑤量子化学計算を利用して、実験で明らかにした分子の構造や性質がどのような原因によってもたらされているのかを検討し、⑥類似した分子のデータと比較しながら分子の種々の性質や動的挙動の根源的な理解を目指します。</p> <p>分子科学関係の学会や研究会において、在学中少なくとも1度は発表できるよう指導していきます。</p>			
研究室生活の紹介等			
<p>少人数の研究室のため先生と学生の距離が近く、手厚い指導が受けられます。性格的には優しい人が集まってくる事が多く、安心して生活しています。また、他の研究室の学生も気軽に遊びに来てくれます。グループ研究ではあり</p>			

ませんが、それぞれのテーマが強く関連しあっているため、先生とだけでなく学生同士でも研究内容について話し合い、考えを深め合うことができます。実験は通常日中に行うので、基本的に夜間の拘束時間はなく、無理せず規則正しい生活を送ることができます。学生室は、近くにありますが実験室と完全に独立しており、快適に過ごせます。(M2)
危険度の高い実験を行うことは通常ありませんが、他安全上の理由から、実験は基本的に複数の人間で安全確認可能な日中のみ行うようにしています。学会前などの特別な時期を除いて、学生のみなさんの週末は完全フリーとしています。(教員)

教員からのメッセージ

おそらく自由時間のかなり多い研究室ですが、自己責任は伴いますので、勉強やデータ処理などは空いた時間を見つけて自主的に進めていって下さい。研究室や実験室にいるときだけが研究を行う時間ではないということ、自覚しておいてください。

課題研究の他にも、一般向けのオープンキャンパス「ふれてサイエンス」による広報活動や、学外の科学実験教室等の地域支援活動に積極的に参加したいと思っており、そのために、課題研究とは関係ない物理現象の調査や勉強、そして実験装置やプレゼンテーション資料の作成にかなりの時間をかけて本気で取り組むこともあります。それらの活動を通して、より深い知性と教養を有し、科学や物理の「面白さ」と「大切さ」を一般の人にわかりやすく説明できる能力を育てていきたいと思っています。

最近(過去3年間+必要に応じて)の修士論文題目

修了年月	タイトル
2021.3	非共有結合相互作用がマイクロ水和クラスターの安定性に及ぼす影響の研究
2020.3	水素結合錯体におけるコンフォメーション異性化の研究
2020.3	N-メチルホルムアミド及びホルムアミドの水素結合錯体のフーリエ変換マイクロ波分光
2019.3	量子化学計算を用いたペプチド分子のメチル基内部回転ポテンシャルと水和によるその変化に関する研究
2019.3	1-アミノ-2-メチル-2-プロパノール水錯体のフーリエ変換マイクロ波分光
2019.3	超音速ジェット・フーリエ変換マイクロ波分光法のための新しい十字スリットノズルの開発
2017.3	N-メチルアセトアミド水錯体における水分子同位体置換のメチル基内部回転ポテンシャル障壁への影響
2016.3	水錯体形成によるN-メチルアセトアミドのメチル基内部回転ポテンシャル障壁変化のコンフォメーション依存性に関する研究
2015.3	ペプチド分子におけるメチル基内部回転ポテンシャル障壁の決定要因の考察
2015.3	超音速ジェット・フーリエ変換マイクロ波分光法のためのスリットノズルの開発
2015.3	N-メチルアセトアミド水錯体における錯体振動モードのメチル基内部回転ポテンシャル障壁への影響について
2014.3	N-メチルアセトアミド水錯体におけるメチル基内部回転ポテンシャル障壁の重水素置換依存性
2013.3	フーリエ変換マイクロ波分光法によるグリコール酸メチル水錯体の分子内大振幅振動に関する研究
2013.3	N-メチルアセトアミド重水素置換分子種のメチル基内部回転ポテンシャルの研究

最近(過去3年間+必要に応じて)の博士論文題目

修了年月	タイトル

研究室連絡先メールアドレス | 藤竹正晴 <fujitake *at* staff.kanazawa-u.ac.jp>