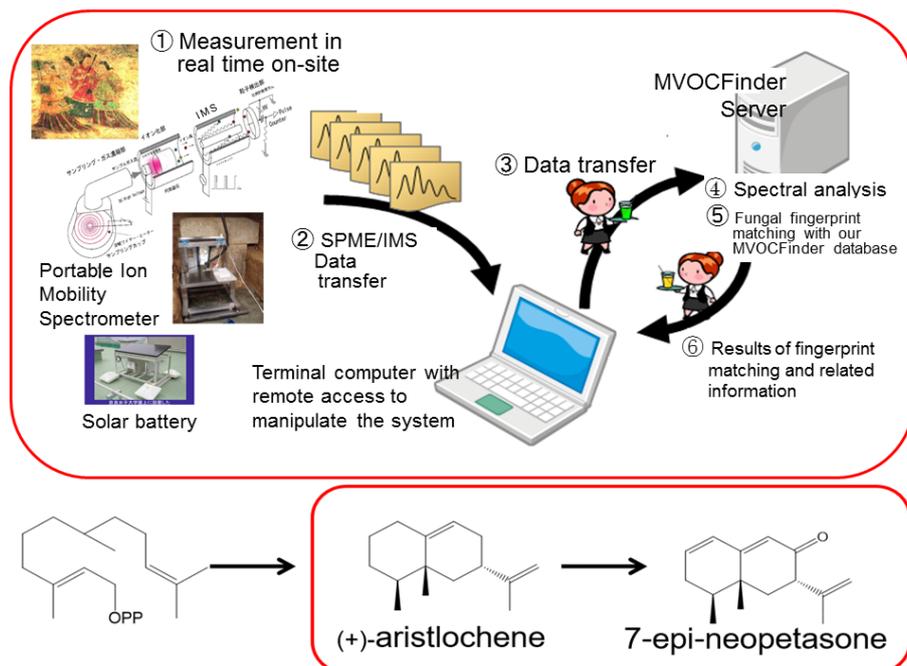


単分子及びイオン-分子反応の反応動力学と文化財環境微生物検出への応用

化学コース 竹内 孝江



文化財保存のための微生物由来ニオイ物質の分析システムの研究。マススペクトルのフラグメンテーション反応を応用して、古墳由来の微生物が生成する多様な揮発性代謝物質の分子構造を特定し、そのパターン認識と多変量解析によりカビ種を特定するソフトウェアを構築した。土壌由来真菌では aristlochene などのセスキテルペン類が孢子形成時にのみ生合成することを見出した。

気相イオンの単分子反応、イオンと分子の二分子反応およびイオンと固体表面の反応のメカニズムを質量分析と量子化学理論により研究しています。リン酸化ペプチドや糖ペプチド等の生体活性物質や有機ケイ素分子等の機能性物質の反応を、分子レベルで解明することにより、イオン反応を予測する理論の構築を行っています。新しい機能をもつ化合物を設計し、溶液中では単離できないような化合物を気相イオン反応によって生成させます。これらはエネルギー・環境問題などで議論される反応過程や、産業での新しい反応の利用などに有益です。さらに、イオンモビリティスペクトロメトリーによって微生物が出す揮発性有機化合物 (MVOC) を検出し、カビ種を特定する新しい方法を研究しています。これは文化財保存への利用が期待されます。

キーワード：反応動力学、量子化学、化学質量分析学、文化財保存、化学生態学