分子化学専修

「分子化学」とは、自然科学の現象を分子の挙動を通して解析し、その理論体系を築き、応用技術に発展させる研究分野です。まさに「自然に学 び自然を超える化学」と言えます。無機化合物から有機化合物まで、さらに低分子化合物から高分子化合物まで、万物は化学物質で構成されてい ます。それらの中で新規かつ有用な機能や性質を持った分子の、発見・発明、理論的・合理的な設計、およびその精密な化学合成が「分子化学」 分野の研究目的です。例えば、実験化学や計算化学に基づく様々な有用化合物の合成と化学反応の開発・理論的解析、複雑な生体高分子と低分子 化合物との相互作用に起因する生物機能の解明、生物現象発現に関与する化合物の抽出・単離・構造決定・合成・機能解明、電子技術の発展のた めに必須な分子デバイス・分子素子・有機無機複合ナノ材料・ナノクラスター材料・集積技術の開発、人類の福祉向上に不可欠な医薬・農薬・機 能性材料の開発などのために、「分子化学」の果たす役割は益々重要なものになっています。「面白い化学」「ものづくりの化学」「役に立つ化学」 をモットーとして、化学を通して社会に貢献することを視野に入れて研究しています。

「分子化学」分野には、以下の研究教育分野が含まれます。

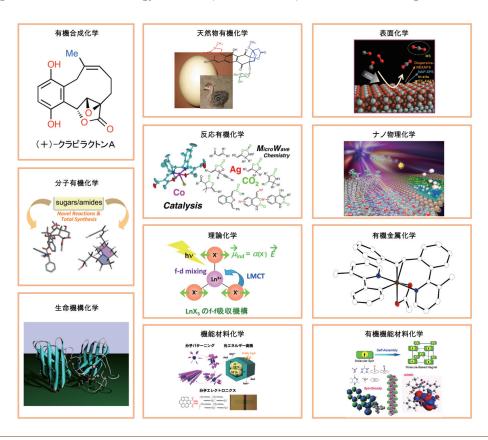
有機化学 無機化学 物理化学 高分子化学 理論化学 構造化学 有機金属化学 合成化学 天然物化学 反応化学 物質化学 材料化学 機 能物性化学 表面化学 ナノ物理化学 生命機構化学

「分子化学」分野では、指導教員のみならず所属教員全員との討論を通じて、幅広い知識、柔軟な思考能力、ユニークで新しい創意工夫力、専 門性豊かで確固たる自信、科学者としての責任感が身につけられるよう、教員と学生との緊密な関係を保ちながら教育研究指導を実施します。

Molecular Chemistry is a unified research field of a wide range of chemical science, including quantum chemistry, organometallic chemistry, material chemistry, surface chemistry, synthetic organic chemistry, natural product chemistry, cluster chemistry, biochemistry, and polymer chemistry.

The core subjects being investigated in the Center are

- (1) design and synthesis of novel, versatile and functional inorganic and organic compounds, organometallics and nanomaterials,
- (2) physicochemical understanding of chemical reactions, and
- (3) clarification of complex biological phenomena. In addition, important Center goals are development of molecular devices essential for progress in electronic technology and development of useful pharmaceuticals and agrochemicals.



分子化学専修

量子化学 / スピン軌道相互作用 / 光分解反応 mistry / spin-orbit interaction / photodissocia

教授

化学科 artment of Chemistry

藪下

山田

教授

化学科

徹

partment of Chemistry



重原子を含む分子の量子化学研究のために、相対論効果を効率良く含むスピン軌道 配置間相互作用法の開発を行ない、さらに光反応における非断熱過程や量子干渉効 果の研究に応用している。共鳴状態の研究のために複素座標法に基づく計算方法を 開発し、特に光イオン化断面積の定量的計算を目指している。また分子振動の高次 倍音吸収強度や、希土類錯体の電気的・磁気的物性を理論的に研究している。

YABUSHITA, Satoshi

We are developing a highly efficient spin-orbit configuration interaction method including relativistic effects for quantum chemical calculations, and applying the method to nonadiabatic processes and quantum interference effects in photochemical reactions. We are also developing the complex coordinate method to evaluate the resonance positions and widths of quasi-bound states and to compute photoionization cross sections. Overtone vibration intensities of molecules and the electric and magnetic properties of lanthanide complexes are also studied.

yabusita@chem.keio.ac.jp http://sepia.chem.keio.ac.jp/

YAMADA, Tohru

錯体触媒 / 不斉合成反応 / 還元反応

complex catalyst / enantioselective synthesis / reduction

有機化学 / 天然物合成 / 有機合成化学

千田 憲孝

中嶋

化学科 Department of Chemistry

教授

molecular modeling by computation.

有機合成化学を基盤とし、分子レベルでの有機化学の理解をめざして研究 を行っている。研究分野は以下の通り。1) 有用な有機反応の開発 2) 生物活性を有する天然有機化合物の全合成研究 3) 新規キラルビルディ ングブロックの創製 4) コンピューテーションによる分子モデリンク This laboratory is focused on understanding organic chemistry at the molecular level, with research areas including synthetic organic chemistry covering (1) development of useful organic reactions, (2) total synthesis of

natural products, (3) preparation of novel chiral building blocks, and (4)

chida@applc.keio.ac.jp http://www.applc.keio.ac.jp/~chida/

Organic Chemistry/Natural Product Synthesis/Synthetic Organic Chemistry

ナノ物理化学 / ナノクラスター / ナノ機能材料

理学博士

新しいシステム化学を先導することを目指しています。

NAKAJIMA, Atsushi

光応答、触媒反応性、磁性といった物質機能の最小単位は、原子数にして

数 10 から千個程度のナノメーターの大きさの集合体(ナノクラスター) です。わたしたちは、原子・分子からなる複合ナノクラスターの新奇な構

造と光物性、反応性、磁性を探索し、ナノ機能材料科学の基盤を構築し、

This laboratory is focused on nano-meter scale aggregations of "clusters" consisting of 10-1000 atoms that are well recognized as minimum units for

optical, catalytic, and magnetic functions. Research is aimed at developing

new next-generation nanoscale cluster materials exhibiting novel

nakajima@chem.keio.ac.jp http://sepia.chem.keio.ac.jp/Nakalab/

optoelectronic and catayltic properties, opening up "Systems Chemistry".

Physical Chemistry / Nano-Cluster / Nanoscale Function Material

CHIDA, Noritaka 教授 理学博士

応用化学科 partment of Applied Chemistry



遷移金属錯体触媒を用いる有機合成新手法の開発研究を行っています。コ バルト錯体による触媒的不斉還元反応、銀触媒による二酸化炭素の捕捉活 性化を伴う複素環化合物の新規合成法の開発、不斉合成反応に対するマイ クロ波の適用など、高性能高機能触媒を理論解析的な手法を併用し合理的 に創成することを目指しています。

This laboratory focuses on the transition-metal complex catalysis for synthetic organic reactions, e.g.; cobalt-catalyzed enantioselective borohydride reduction, silver-catalyzed carbon dioxide fixation for heterocycles synthesis, and MW assisted enantioselective catalysis. Also is studied a rational design of metal complex catalysts that capture and activate small gaseous molecules for synthetic resources.

yamada@chem.keio.ac.jp

有機金属化学 / 有機合成 / 均一系触媒反応 nistry / organic synthesis / homogeneous catalysis

垣内 史敏 KAKIUCHI, Fumitoshi

教授 博士 (工学)

化学科 partment of Chemistry



有機金属触媒を用いた合成反応の開発、新概念に基づいた錯体の合成を行 っている。主に、(1) 触媒的不活性炭素結合切断を経る反応の開発と有 機電子材料合成への展開、(2)新概念に基づく新触媒反応の開発と反応 機構の解明、(3) 有機電解反応と遷移金属触媒を融合させた新規合成手 法の開発、を行っている。

Our research broadly covers organometallic chemistry and synthetic organic chemistry. Our research group is interested in design and discovery of useful synthetic protocols involving new concepts and unique elementary steps, in application of catalytic functionalization of unreactive carbon bonds to organic electro materials, in understanding reaction mechanisms of transition metal-catalyzed reactions, and in synthesis of transition metal complexes having conceptually new ligands.

kakiuchi@chem.keio.ac.jp http://www.orgmet.chem.keio.ac.jp/

表面化学/触媒化学/放射光科学 Surface Chemistry / Catalysis Chemistry / Synchrotron-Radiation Science

近藤 KONDOH, Hiroshi

教授 博士 (理学)

化学科 partment of Chemistry



物質の表面はバルクとは異なる多くの興味深い現象を誘起することが知ら れています。私たちは、放射光を用いて、表面での化学反応を調べる新し い手法の開発に取り組んでいます。これを用いて、表面での分子プロセス が鍵となる環境触媒やエネルギー変換触媒などの機構解明を行っています。 It is well known that the surface of matter induces a number of interesting phenomena that are not seen for the bulk. We have been developing synchrotron-radiation-based new techniques to study chemical reactions at surfaces. We have been applying these techniques to mechanistic studies on environmental catalysts and energy-conversion catalysts, where molecular processes at the surfaces play key roles.

kondoh@chem.keio.ac.jp http://www.chem.keio.ac.jp/kondoh/index/jp/

有機機能材料化学 / 分子磁性 / 分子結晶 Organic Functional Materials Chemistry / Molecule-Based Magnetism / Molecular Crysta

吉岡 直樹 YOSHIOKA, Naoki

工学博士 教授

応用化学科 partment of Applied Chemistry



π電子系有機固体の磁気特性を中心とした電子物性を分子機能材料への応 用を念頭において探求している。安定有機ラジカル、遷移金属錯体、共役 高分子などを研究対象として、分子系におけるスピン整列のメカニズムを 明らかにしながら分子工学的なアプローチで分子磁性体を構築するための 集積技術の確立を目指している。

This laboratory focuses on developing molecular-based functional materials and devices exhibiting cooperative magnetic phenomena using knowledge of electronic properties of organic solids based on π -electron systems. Mechanism for spin alignment in molecular systems, such as stable organic radicals, metal complexes, and π -conjugated polymers, is experimentally elucidated and assembling techniques suitable for bulk electronic functions using molecular engineering approach are also developed.

yoshioka@applc.keio.ac.jp http://www.applc.keio.ac.jp/~yoshioka/

分子集合体 / 光エネルギー変換 / 超分子エレクトロニクス pramolecular Assembly / Solar Energy Conversion / Photoelectrochemistry

HASOBE, Taku 羽曾部卓

准教授 博士 (工学) ate Professor

Department of Chemistry



合成化学および超分子化学的手法を駆使し、主にエレクトロニクスやエネ ルギー変換系への応用を目指した機能性分子集合体の創製を行っている。 具体的には、i) 機能性π電子材料およびその集合体の合成、ii) 時間分解分 光法を用いた励起ダイナミクス評価、iii) 電子デバイス・触媒システムの 作製と特性評価 の3つである。

Based on synthetic and supramolecular chemistry, we focus on construction of novel supramolecular systems using π -conjugated molecules. The specific topics are as follows, i) synthesis of supramolecular assemblies composed of π -conjugated molecules, ii) ultrafast spectroscopy for photodynamic analysis, iii) construction and evaluation of electronic devices and solar energy conversion systems.

hasobe@chem.keio.ac.jp http://www.chem.keio.ac.jp/~hasobe/

天然物化学 / 構造決定 / 生物現象解明 Natural Products Chemistry / Structure Determination / Elucidation of Biological Phenome

犀川 SAIKAWA, Yoko

准教授 博士 (理学)

応用化学科 partment of Applied Chemistry



生物現象に関わる鍵物質に注目し、それら天然物の単離、構造決定を行っ ている。また、天然物の全合成を独創的な手法にて達成することも当研究 室の目標であり、研究室独自の手法を用いた複雑な天然物の合成研究に取 り組んでいる。

This laboratory focuses on key compounds responsible for biological phenomena and we are working on isolation and structure determination of those characteristic natural products. Also total synthesis of natural products featuring a unique strategy is our goal. Synthetic studies of complicated natural compounds using a ingenious route are now investigated.

saikawa@applc.keio.ac.jp http://www.applc.keio.ac.jp/~saikawa/

有機合成化学 / 天然物の全合成 Synthetic Organic Chemistry / Total Synthesis of Natural Product

高尾 賢一 TAKAO, Ken-ichi

博士 (工学) 教授

応用化学科 artment of Applied Chemistry



人類は長い歴史の中で、重要な生物活性を示す物質や、新規な骨格を有す る化合物を天然から見い出してきた。私達のグループは、このようなユニ ークで興味深い天然有機化合物およびその関連化合物を標的分子とした全 合成研究を、新しい立体選択的な有機合成反応の開発とともに行っている。 Numerous organic compounds possessing important bioactivities and novel structures have been found in nature. This laboratory focuses on the total synthesis of such interesting natural products and their related compounds, and the development of stereoselective synthetic organic reactions.

takao@applc.keio.ac.jp http://www.applc.keio.ac.jp/~takao/lab/

タンパク質化学 / 生物物理化学 / 生体反応機構 Protein chemistry / Biophysical chemistry / Mechanism of biochemical reactions

古川 良明 FURUKAWA, Yoshiaki

准教授 (工学)

化学科 partment of Chemistry



タンパク質は適切な立体構造をとることで生理機能を発揮します。しかし、 遺伝子変異や環境変化に伴い、タンパク質分子が異常に会合して不溶性の 凝集体を形成することがあります。私たちは、タンパク質凝集の反応メカ ニズムを分子レベルで明らかにし、凝集が引き起こす各種ヒト疾患の病理 解明に貢献します。

Our lives are maintained by an organized operation of functional protein molecules. For that purpose, a protein needs to be appropriately folded and acquire a three-dimensional structure. Mutations and/or environmental changes, however, cause protein misfolding and trigger abnormal interactions of protein molecules to form insoluble aggregates. In our group, we are investigating molecular mechanisms of protein aggregation, by which we will contribute to reveal pathogenesis of human diseases caused by protein aggregation.

furukawa@chem.keio.ac.jp http://www.chem.keio.ac.jp/~furukawa/index.html

天然物化学 / 有機合成化学 / 新規合成法開発

佐藤 隆章 SATO, Takaaki 博士 (理学)

准教授 sociate Professor

応用化学科 partment of Applied Chemistry



創薬化学を中心に、より有用で機能的な有機分子を求め、合成する化合物 の複雑化が急速に進行しています。我々は、科学的な独創性と、社会的に 需要の高まった複雑な化合物に適用できる実用性を同時に満たす合成手法 を開発しています。また、それを用いて重要な生理活性を有する天然物の 全合成を精力的に行っています。

Modern applications of organic chemistry to industry and medicine, especially drug discovery, have resulted in the need for compounds of ever increasing complexity. To meet these requirements, our research centers on the development of innovative and practical synthetic methods. We are also actively pursuing the total synthesis of important biologically active natural products using these methodologies.

takaakis@applc.keio.ac.jp

分子化学専修

The Center for Molecular Chemistry

有機金属化学 / 有機合成 / 均一系触媒反応 organometallic chemistry / organic synthesis / homogeneous catalysis

河内 卓彌 KOCHI, Takuya

准教授 Ph.D.

Associate Professor Ph. 化学科

1**L子科** Department of Chemistry



有機金属触媒反応に関する研究を行っています。特に錯体のもつ配位子の 特徴に注目し、配位子によって作り出される配位座の環境を制御すること で、新反応の開発を試みています。小分子からポリマーまで様々な化合物 の合成法における知識を相互利用することで、有用な有機化合物から新規 な高分子までの合成を進めています。

Our research mainly focuses on organometallic catalysis, particularly controlling the reactivity of each coordination site by ligand environment through both sterics and electronics to develop new reactions. Syntheses of useful organic compounds and novel polymers are carried out by mutual application of knowledge gained in syntheses of various organic compounds from small molecules to polymers.

kochi@chem.keio.ac.jp

有機合成 / 超分子集合体 / 光エネルギー変換

酒井 隼人 SAKAI, Hayato

専任講師 博士 (理学)

化学科 Department of Chemistry



合成化学及び超分子化学的手法を全面的に駆使し、主に光電変換などのエレクトロニクス応用やエネルギー変換を目指した機能性分子集合体の創製を行っている。具体的には、i) 色素分子及びナノカーボン材料を基盤とする超分子集合体の合成、ii) 時間分解分光法を用いた光・電子物性評価、iii) デバイス及び触媒システム作製と特性評価の3つである。

Based on synthetic and supramolecular chemistry, we focus on construction of novel molecular architectures for electronics. The specific topics are as follows. i) synthesis of supramolecular assemblies composed of dye molecules and nanoscale carbon materials, ii) ultrafast spectroscopy for photodynamic analysis, iii) construction and evaluation of electronic and energy conversion systems.

sakai@chem.keio.ac.jp

不斉合成反応 / 遷移金属触媒 Asymmetric synthesis / Transition metal catalyst

齊藤 巧泰 SAITO, Kodai

助教 Research Associate 博士 (理学)

化学科 Department of Chemistry



遷移金属触媒を活用した有機合成反応について研究しています。その中でも、光学活性化合物の触媒的不斉合成法の開発、不活性小分子の活性化を経る合成反応の開発を主な目的としています。これらの研究目標に、理論化学的手法に基づいた触媒設計を駆使し、合理的に取り組んでいます。

I have been studying the synthetic organic chemistry using transition metal catalysts. In particular, I focus on an asymmetric synthesis of optically active compounds and a development of reactions based on an activation of inert small molecules. These purposes have been rationally achieved by the combined use of experimental and theoretical study.

kosaito@chem.keio.ac.jp

ナノクラスター合成 / ナノ触媒 / クラスター科学 Synthesis of Nanocluster / Nano-catalyst / Cluster Science

角山 寛規 TSUNOYAMA, Hironori

化学科 Department of Chemistry

バルクとは異なった新しい物性発現が期待されるナノクラスターの合成法開発および機能の探索を行っています。特に数十個の原子が集合した1ナノメートル程度のナノクラスターに注目し、触媒などへの展開や物性の起源の解明を進めています。

Our research focuses are development of fine synthesis strategy for nanoclusters and exploration of their novel properties, which are not appeared in the bulk form. Our target size of nanoclusters is from several to several tens atoms, because of their obviously different, size-specific properties than larger analogues. We study catalytic, optical, electronic properties of them and investigate an origin of their novel properties.

htsuno@chem.keio.ac.jp

構造有機化学 / 安定有機ラジカル / π共役化合物

三浦 洋平 MIURA, Youhei 專任講師 博士(理学)

Assistant Professor Ph.D 応用化学科

Department of Applied Chemistry

安定有機ラジカルやπ共役系化合物の合成、構造解析、物性評価を行っています。これらの有機化合物は固体中や溶液中において規則的に整列させることで、磁性や伝導性といった様々な電子物性を発現することが期待されます。これらの有機分子を用いて新たな有機エレクトロニクス材料の開発を目指しています。

We are investigating about the preparation and property evaluation of stable organic radicals and π -conjugated molecules. They have possibility for showing electronic property such as magnetic and/or conducting property by forming well-defined structure in solid or solution. We aim to develop new organic electronic materials by using them.

y-miura@applc.keio.ac.jp http://www.applc.keio.ac.jp/~yoshioka/index.html

有機合成化学 / 全合成 / 天然物 / 反応開発 Synthetic Organic Chemistry / Total Synthesis / Natural Products / Reaction Developmer

小椋 章弘 OGURA, Akihiro

助教 Research Associate 博士(薬学) Ph.D.

応用化学科 Department of Applied Chemistry

現代の有機化学の知識をもってしても、天然物や医薬品など三次元骨格を有する有機分子の構築は困難である。このような化合物を最小限の原料やエネルギーで合成するための方法論が、持続可能な社会の実現に不可欠である。私達のグループでは、天然物の全合成や反応開発研究を通して、次世代の有機合成化学の提案を目指す。

Despite great advances in modern organic chemistry, construction of threedimensional molecules such as natural products and medicines is still a difficult task. In order to achieve sustainable society, novel methodologies to synthesize such compounds from minimum substrate and energy are in need. Our group is proposing solutions to the organic chemistry of next generation, through natural product synthesis and reaction development.

ogura@applc.keio.ac.jp http://www.applc.keio.ac.jp/~takao/lab/



天然物有機化学 / 生物有機化学 / 植物ホルモン Natural products chemistry / Bioorganic chemistry / Plant hormone

宮崎翔

MIYAZAKI, Sho

助教 (有期)

博士(農学) Ph.D.

応用化学科 Department of Applied Chemistry



天然に存在する有機化合物は極めて多様性に富み、かつ多様な生物活性を 示すことが知られている。我々の研究グループでは分子の構造と性質を基 軸にして生物現象を明らかにすることを目的とし、天然有機化合物の単離・ 構造決定、さらに新しい反応の開発と標的天然有機化合物合成への応用に 取り組んでいる。

Inspired by a variety of natural products with unique bioactivities, the main focus of our research is elucidating the biological phenomena by a key natural product existing in the target organisms. We are carrying out research on isolation, structure determination and chemical synthesis of these natural compounds.

miyazaki@applc.keio.ac.jp

表面化学 / 触媒化学 / 放射光科学 hemistry / Catalysis Chemistry / Synchrotron-Radiatio

豊島・遼

TOYOSHIMA, Ryo

助教 (有期)

博士(理学) Ph.D.

化学科 Department of Chemistry



環境浄化やエネルギー変換などに重要な不均一触媒に関する研究を行って います。触媒の性能は触媒表面の化学状態や構造によって大きく変化しま す。私たちは、放射光を始めとする表面分析技術を駆使して、触媒の作用 メカニズム解明と性能向上を目指しています。

We are investigating for heterogeneous catalysts that are important for environmental purification, energy conversion and so on. The catalyst performances are greatly varied depending on the chemical state and structure of the catalyst surface. Based on surface sensitive analysis techniques such as synchrotron-radiation, we focus on understanding of catalytic mechanisms of chemical reactions and improve catalyst performances.

toyoshima@chem.keio.ac.jp