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。

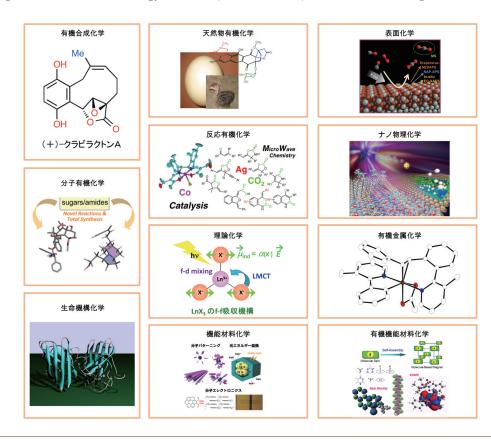
有機化学 無機化学 物理化学 高分子化学 理論化学 構造化学 有機金属化学 合成化学 天然物化学 反応化学 物質化学 材料化学 機能物性化学 表面化学 ナノ物理化学 生命機構化学

「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.



ナノ物理化学/ナノクラスター/ナノ機能材料 Physical Chemistry / Nano-Cluster / Nanoscale Function Materials

中嶋敦

NAKAJIMA, Atsushi

教授

理学博士

化学科 Department of Chemistry



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、 新しいシステム化学を先導することを目指しています。

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

nakajima@chem.keio.ac.jp http://www.chem.keio.ac.jp/~nakajima-lab/index.html

有機化学 / 天然物合成 / 有機合成化学 Organic Chemistry / Natural Product Synthesis / Synthetic Organic Chemistry

千田

CHIDA, Noritaka

教授 Professor

理学博士

応用化学科

Department of Applied Chemistry

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/

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/

錯体触媒 / 不斉合成反応 / 還元反応 complex catalyst / enantioselective synthesis / reducti

山田 徹

YAMADA, Tohru

教授

理学博士

化学科 Department of 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 http://www.chem.keio.ac.jp/~yamada-lab/index.html

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

垣内 史敏 KAKIUCHI, Fumitoshi

教授

(工学)

Department 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/

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

直樹 吉岡

YOSHIOKA, Naoki

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 $\,\pi$ -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/

分子化学専修

The Center for Molecular Chemistry

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

高尾

TAKAO, Ken-ichi

教授

博士 (工学)

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/

生物無機化学 / タンパク質科学 / 神経変性疾患 organic Chemistry / Protein Science / Neurodegenerative Diseases

古川 良明

FURUKAWA, Yoshiaki

教授

(工学)

化学科

partment of Chemistry



細胞内における金属イオンの動態は量的・質的な面から厳密に制御されて おり、その一部を担っているのが金属シャペロンと呼ばれるタンパク質で す。私たちのグループでは、金属シャペロンによるタンパク質への金属イ オン供給メカニズムを明らかにするとともに、その破綻がもたらす神経変 性疾患の発症機序について研究しています。

Intracellular dynamics of metal ions is known to be strictly regulated in their qualities as well as quantities, and proteins called "metallochaperones" are responsible for maintenance of the regulation. A purpose of our research is to decipher a mechanism that enables metalloproteins to receive specific metal ions from metallochaperones. Also, we are investigating a pathomechanism of neurodegenerative diseases that appear to be caused by breakdown of the intracellular metal dynamics.

furukawa@chem.keio.ac.jp https://furukawa-lab.org

理論化学 / 計算化学 / マテリアルズ・インフォマティクス Theoretical Chemistry / Computational Chemistry / Materials Informatics

畑中 美穂 **HATANAKA**, Miho

准教授 ociate Professor 博士 (理学)

化学科

partment of Chemistry



コンピュータを駆使して、様々な化学現象を深く理解すること、より良い 材料を設計することを目指しています。特に、触媒や発光材料に着目し、 シミュレーション手法の開発や応用計算を行っています。また、機械学習 を用い、材料の性質を予測するシステムの開発にも取り組んでいます。

We aim to contribute to a better understanding of the mechanism of various chemical phenomena and the rational design of functional materials. To achieve this goal, we develop simulation and machine learning methodologies and apply them to various materials, such as catalysts and luminescence materials.

hatanaka@chem.keio.ac.jp

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

羽曾部 卓 HASOBE, Taku

教授

博士 (工学)

化学科 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.

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 Phenomen

陽子 犀川

SAIKAWA, Yoko

准教授 ate Professor (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 https://www.applc.keio.ac.jp/~saikawa/

天然物化学 / 有機合成化学 / 新規合成法開発 Natural Products Chemistry / Organic Synthesis / Development of New Synthetic Metho

佐藤 隆章 SATO, Takaaki

准教授

博士 (理学) 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 http://www.applc.keio.ac.jp/~chida/

有機金属化学 / 有機合成 / 均一系触媒反応 etallic chemistry / organic synthesis / homoger

河内 卓彌 **KOCHI**, Takuya

准教授 sociate Professor

化学科 artment 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

構造有機化学 / 安定有機ラジカル / 超分子化学

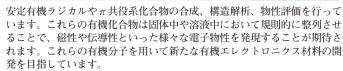
洋平 三浦

MIURA, Youhei

専任講師 ant Professor (理学)

応用化学科

partment of Applied Chemistry



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 Developm

章弘 小椋

OGURA, Akihiro

専任講師

博士 (薬学)

応用化学科

partment 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/

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

artment 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

齊藤 巧泰

SAITO, Kodai

専任講師

(理学)

partment 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

構造生物学 /X 線結晶構造解析 / 単粒子解析 Structural biology / X-ray crystallography / Single particle analysis

阿久津 誠人

専任講師 (有期)

化学科 partment of Chemistry

AKUTSU, Masato 博士 (理学)



構造生物学は、タンパク質の機能をその形から理解していく研究分野です。 X線結晶構造解析法と単粒子解析法を主な研究手法として、様々なタンパ ク質の立体構造解析に取り組んでいます。

The idea of Structural biology is to study the function of the protein from its structure as protein structure and function are related to each other. We study various kinds of protein structures by using x-ray protein crystallography and single particle analysis as the main techniques.

akutsu@chem.keio.ac.jp

分子化学専修

The Center for Molecular Chemistry

表面化学 / 触媒化学 / 放射光科学

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

ナノクラスター / 表面化学 / 二光子光電子分光 Nano-Cluster / Surface Chemistry / Two-Photon Photoemission Spectroscopy

井上 朋也

INOUE, Tomoya

助教(有期)

修士 (理学)

化学科

Department of Chemistry



数個から数百個の原子の集合体であるナノクラスターは特異な機能・物性を有することで知られています。このナノクラスターを新規ナノ機能材料として用いるために、構造や物性を保持させた状態でのナノクラスターの表面担持方法およびその評価法の確立と新規機能の開拓を行っています。Nanoclusters (NCs) consisting of several to several hundred atoms are known for exhibiting unique functions. In order to utilize such NCs as novel nanofunctional materials, I develop the methods of (1) fabricating supported NCs on a substrate while preserving their natures and (2) evaluating electronic properties spectroscopically, both of which reveal new features of NCs on surfaces.

inoue.t@chem.keio.ac.jp

理論化学 / 反応分子動力学 / 計算統計力学 theoretical chemistry / molecular dynamics / computational statistical mechanics

稲垣 泰一

INAGAKI, Taichi

助教(有期)

博士 (理学)

化学科

Department of Chemistry



不均一凝縮系材料の機能に関わる電子状態や反応ダイナミクスを分子レベルで理解することを基礎とし、新材料の合理的設計・構築につながる研究を行っています。具体的には、物理化学的理論や量子化学計算、分子シミュレーションを駆使して、蓄熱材料やナノ粒子触媒などの固液及び固気化学反応の解析に取り組んでいます。

We aim for rational design of new condensed-phase materials on the basis of the understanding of electronic structures and reaction dynamics linked to their functions. In particular, we analyze the molecular mechanisms of heterogeneous solid-phase chemical reactions observed in thermal storage materials and nanoparticle catalysts by using physicochemical theory, quantum chemistry calculations, and molecular simulations.

inagaki@chem.keio.ac.jp

天然物化学 / 構造決定 / 化学生態学 Natural Products Chemistry / Structure Determination / Chemical Easter

森 信之介

MORI, Shinnosuke

助教(有期)

博士 (農学)

応用化学科

Department of Applied Chemistry



天然に存在する有機化合物は、生物の生存戦略にもとづき、多様な生命現象と密接にかかわっています。こうした現象を支える化合物の化学構造や機能の解明を目指しています。特に、生態系における生物間の相互作用に寄与する化合物に着目し、その単離・構造決定と生物学的評価に取り組んでいます。

Natural products are closely related to a variety of biological phenomena based on the survival strategies of living organisms. We aim to elucidate the chemical structure and function of the compounds underlying these phenomena. Particularly focusing on chemicals that contribute to inter/intraspecific interactions in ecological systems, we are working on their isolation, structure determination, and biological evaluation.

