

Chemistry

化学専攻

分子構造化学講座
分子反応化学講座

Molecular Structure Chemistry
Molecular Reaction Chemistry

化学専攻は、基礎化学の全分野を網羅するように11の研究グループを擁しています。これらのグループは教育・研究の活性化と円滑化を図るために、分子構造化学大講座と分子反応化学大講座に大別され、それぞれ化学物質を構造と反応の側面から捉え、互いに連携を保ちつつ独自の研究活動を行っています。それぞれの大講座には、対象とする物質あるいは研究手法によって物理化学・無機化学・有機化学の系列があり、それぞれ最新の物理的・化学的手法によって活発な研究が行われています。これらの研究には、本学の情報メディア教育研究センター、自然科学研究支援開発センター、技術センターとの連携で行われているものも少なくありません。つまり、物理学・物性学と密接に関連する分野から、生物学や地学に接する分野にまで多岐にわたって基礎科学の研究を推進し、かつ高度な研究者および技術者を養成し社会の要請に応えることに努めています。

The graduate program provided by the Department of Chemistry, Graduate School of Science, consists of two research branches, molecular structure chemistry and molecular reaction chemistry. (The former has six research groups and the latter has five.) These are schematically shown below. A wide area of fundamental chemistry is covered, ranging from studies related to physics or material science to biology or earth science. Collaborative research is held with the Information Media Center, Natural Science Center for Basic Research and Development, and Workshop for Advanced Techniques.

化学専攻
アドミッション・ポリシー（求める学生像）

大学院で高度な化学の専門的知識や技法を学ぶために必要な基礎学力を有し、絶えず自己啓発努力を重ね、積極的に新しい分野を開拓していく意欲に富む学生を、学部教育を受けた分野にとらわれず広く受け入れます。

Admission Policy of
Department of Chemistry

We shall not limit prospective students' faculty background and shall accept students who have basic academic ability required to learn highly technical knowledge in the field of chemistry at the graduate school level, and who have enthusiasm to continuously strive to improve themselves and develop new research areas.

[化学専攻ホームページ] <http://home.hiroshima-u.ac.jp/chemsci/>
[Homepage] http://home.hiroshima-u.ac.jp/chemsci/index_e.html

分子構造化学講座 Molecular Structure Chemistry

構造物理化学 Structural Physical Chemistry

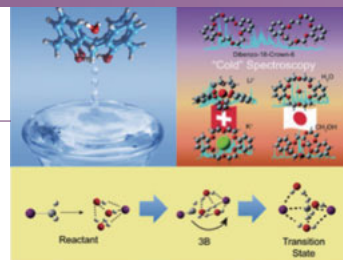
スタッフ●江幡 孝之(教授)、井口 佳哉(准教授)、福原 幸一(助教)、仲 一成(助教)

Staff/EBATA Takayuki (Professor), INOKUCHI Yoshiya (Associate Professor), FUKUHARA Koichi (Assistant Professor), NAKA Kazunari (Assistant Professor)

種々の機能を発現する分子(アミノ酸、包接化合物、自己組織化分子、超分子)や、分子間力で凝集する分子間錯体について、超音速分子線・レーザー分光を用いて構造決定や化学反応ダイナミクスを研究している。実験と理論化学をバランスよく組み合わせ、ホスト-ゲスト間の分子認識機構や反応の特異性を明らかにする。

Structures of molecular clusters and supramolecules are studied by a combination of laser spectroscopy and supersonic beam as well as electro-spray cold ion-trap techniques. Various laser based nonlinear laser spectroscopy are applied for the molecules in the gas phase. With an aid of quantum chemical calculations, specific interaction between host and guest species, leading to molecular recognition will be revealed.

Key Words レーザー分光、分子クラスター、機能性分子、分子認識
Laser spectroscopy, Molecular cluster, Functional molecules, Molecular recognition



(左上)超音速分子レーザー分光と量子化学計算で見出した、水1分子を包接したカリックス[4]アレンの構造。世界で一番小さい「水分子を入れたカップ」。(右上)18C6クラウンエーテルがさまざまなゲスト種を内包するときの分子変形の様子。(下)S_N2反応の溶媒効果を分子クラスターのレーザー分光と理論化学計算で説明。

(top left) "World smallest cup of water" formed in a supersonic molecular beam. (top right) Conformer change of 18C6 crown ether to include various guest species, revealed by an international collaboration. (bottom) Investigation of S_N2 reaction in molecular level by using molecular clusters.

固体物性化学 Solid Material Chemistry

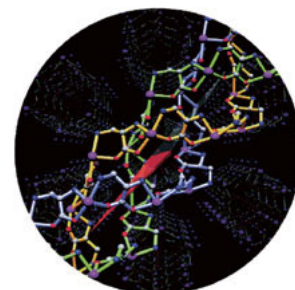
スタッフ●井上 克也(教授)、西原 禎文(准教授)、Maryunina Kseniya Yu. (助教)

Staff/INOUE Katsuya (Professor), NISHIHARA Sadafumi (Associate Professor), Maryunina Kseniya Yu. (Assistant Professor)

分子をどのようにデザインしたらいいか、あるいはどのような構造を構築したらいいかという分子設計から新たな分子を創製し、磁化率、ESR、X線回折、誘電率などの測定を行い、物質の構造との相関で新たな物性発現に関して実験的、理論的な研究開発を行っている。

Research activities are centered on the relation between static and dynamic structures such as bonding, crystal structure, phase transition and molecular motion and electric and magnetic properties in condensed matter, and the synthesis of new compounds having new structures and new functions. The research methods are SQUID, MCD, DTA, X-ray diffraction, NMR, and Mössbauer spectroscopy.

Key Words 分子磁性、マルチフェロイクス、強誘電性金属錯体液晶、キラル磁性
Magnetic resonance, Molecule-based magnets, Chiral magnets, Molecule based multiferroics, Ionic conductivity, Mixed-valence



キラル磁性体の結晶構造
Crystal structure of chiral magnet

錯体化学 Coordination Chemistry

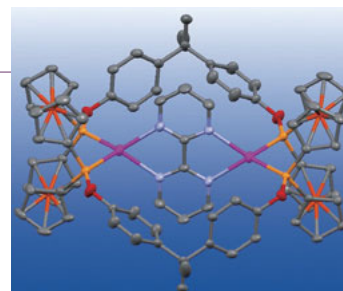
スタッフ●水田 勉(教授)、久米 晶子(准教授)、久保 和幸(助教)

Staff/MIZUTA Tsutomu (Professor), KUME Shoko (Associate Professor), KUBO Kazuyuki (Assistant Professor)

有用な電子物性や触媒活性を金属錯体に発揮させるために、多核構造を与える配位子やマクロサイクル配位子の開発を行っている。また、有機遷移金属化学を炭素以外の典型元素に拡張するため遷移金属-典型元素間に共有結合をもつ錯体の構造や反応性に関する研究を行っている。さらに、外部から与える信号(電位や光)を化合物の形(分子に書き込まれる情報)に変換する研究にも取り組んでいる。

Our group is interested in the development of useful catalytic systems and metal complexes having unusual chemical and electronic properties. Research subjects are (1) syntheses of ligands forming multinuclear complexes, (2) transition metal complexes containing a new type of bond fashion between a transition metal and a main group element, (3) chemical systems which can store external physical stimuli as chemical information.

Key Words 有機金属化学、多核遷移金属錯体、金属-典型元素間共有結合、外場応答性錯体
Organometallics, Multinuclear transition-metal complexes, Covalent bond between transition metal and main group element, Switchable coordination complexes



2つの金属を内包できる大環状リン配位子
Phosphamacrocycle that can incorporate two metal fragments in its hole

光機能化学 Photochemistry of Advanced Materials

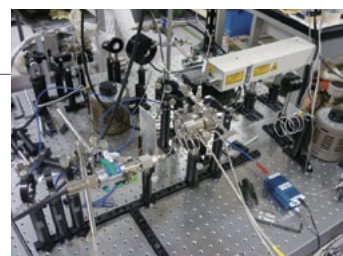
スタッフ●齋藤 健一(協力教員・自然科学研究支援開発センター教授)

Staff/SAITOW Ken-ichi (Professor from the Natural Science Center for Basic Research and Development)

研究テーマは、乱れた系における光物性の実験的研究。特に、物理化学と分子科学を背景に、化学・応用物理・物質物性の境界領域において、ナノマテリアルサイエンスを展開している。現在の主なテーマは、(1)物理化学的手法に基づくナノ構造体作製のための方法論の開発、(2)ナノ構造体の光物性、(3)有機固体の光・電子物性、(4)次世代型のLEDと太陽電池の基礎構造の開発、(5)凝縮相の光物性。

Our research interests are in the followings. i) development of fabrication method of nanostructured material on the basis of physical chemistry, ii) Optical properties of nanostructured materials, iii) Optoelectrical properties of organic solids, iv) development of next-generation LED & photovoltaic cell, v) optical properties of condensed matters.

Key Words ナノマテリアルサイエンス、分子科学、光半導体、LED、太陽電池、エネルギー
Nanomaterial science, Molecular science, Optical semiconductor, LED, Photovoltaic cell, Solar cell



開発したナノ構造体創製装置
Developed instrument for fabricating nanomaterials

分析化学 Analytical Chemistry

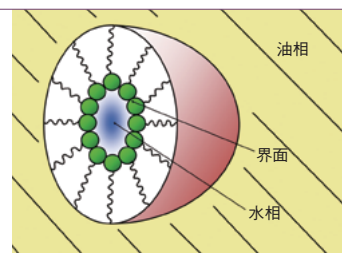
スタッフ●藤原 照文(教授)、石坂 昌司(准教授)、岡本 泰明(助教)

Staff/FUJIWARA Terufumi (Professor), ISHIZAKA Shoji (Associate Professor), OKAMOTO Yasuaki (Assistant Professor)

逆ミセルにおける特異な反応性の解明とそれを反応場とする化学発光法を溶媒抽出法と組み合わせたフロー分析システムの開発、光ピンセットの手法を用いて雲の発生や成長に関わる微小水滴の物理化学現象を光学顕微鏡下で再現し、単一水滴レベルでレーザー分光計測する基盤技術の開発、およびメタル炉上での *in situ* 固相反応系を用いた選択的酸化分離法を原子スペクトル分析法と組み合わせた超微量分析システムの開発に関する研究を行っている。

Research in our laboratory is devoted to the following major areas: (1) study of reverse micelle function as a microreactor for analytical use; (2) development of analytical methods based on a chemical process (separation, reversed micellar mediated reaction or solid phase reaction) coupled on-line to spectrometric detection; (3) application of laser trapping and spectroscopy as a novel approach to study on physical and chemical properties of single water droplets in air.

Key Words 逆ミセル、フロー分析法、光ピンセット、レーザー分光法、酸化分離、原子スペクトル分析
Reverse micelles in chemical analysis, Flow analysis, Atomic spectrometry, Laser trapping and spectroscopy, Aerosol



輪切りにした逆ミセルの構造
Reverse micelle

構造有機化学 Organic Stereochemistry

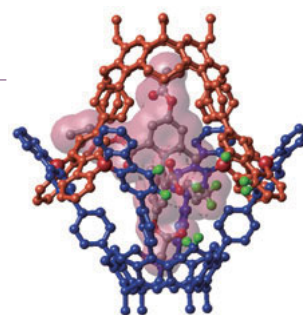
スタッフ●灰野 岳晴(教授)、関谷 亮(准教授)、池田 俊明(助教)

Staff/HAINO Takeharu (professor), SEKIYA Ryo (Associate Professor), IKEDA Toshiaki (Assistant Professor)

有機化合物の動的な三次元構造を決定し、構造とその化合物のもつ性質がどのように関連しているかを明らかにし、有用な機能をもつ化合物を作り出すことを目的としている。特に分子間相互作用を基盤とした超分子化学における分子認識機構について研究している。超分子的手法を用いて分子の配列構造を制御することによって、超分子ポリマーや超分子集積体、超分子カプセルなどの新しい機能性をもった超分子集合体を開発している。

The group's interests direct to developing supramolecular objects including supramolecular polymers, molecular stacks, topological molecules and molecular capsules with functions. A primary theme is the rational design of objects formed by self-assembly of small molecules that spontaneously organizes into larger, complex structures with new functionalities.

Key Words 超分子化学、分子認識、機能性有機化合物、超分子ポリマー、自己集合
Supramolecular Chemistry, Molecular Recognition, Functional Organic Compounds, Supramolecular Polymer, Self-assembly



超分子カプセルによるゲスト分子の包接
Guest binding of supramolecular capsule

分子反応化学講座 Molecular Reaction Chemistry

反応物理化学 Physical Chemistry of Kinetics

スタッフ●山崎 勝義(教授)、高口 博志(准教授)

Staff/YAMASAKI Katsuyoshi (Professor), KOHGUCHI Hiroshi (Associate Professor)

レーザー分光法を利用して原子・分子の単一量子状態の高感度検出を行うと同時に、並進・回転・振動励起種の衝突素過程にともなう化学反応およびエネルギー移動に関する実験的観測を行っている。反応分子および生成分子の量子状態選別的な速度定数測定にもとづく反応速度論的アプローチと生成分子のエネルギー分配および散乱角度分布測定にもとづく反応動力学的アプローチを融合した化学反応素過程研究を推進している。

Experiments based on the selective detection of a single quantum state of atoms and molecules by laser spectroscopy. Studies on the kinetics and dynamics of the chemical reactions and energy transfer processes in atomic and molecular collisions.

Key Words 化学反応速度論、化学反応動力学、分子衝突過程、レーザー分光法
Chemical Kinetics, Reaction Dynamics, Molecular Collisions, Laser Spectroscopy



実験を行うために色素レーザ装置を調整している様子
A student is tuning the dye laser system for experiments.

有機典型元素化学 Organic Main Group Chemistry

スタッフ●山本 陽介(教授)、小島 聡志(准教授)

Staff/YAMAMOTO Yohsuke (Professor), KOJIMA Satoshi (Associate Professor)

山本…(1)新規高配位および低配位典型元素化合物創製およびそのための配位子合成(いくつかの新規三座配位子系などの合成)、(2)ポルフィリン酸化体(16 π)の合成と性質の検討、(3)新規三重項・一重項カルベン合成と展開など。河内…(1)高配位および低配位14族元素化合物の合成・構造・反応、(2)ホウ素置換芳香族化合物の新規合成法の開発。小島…(1)典型元素の特性を活かした合成反応の開発、(2)新規高配位リン化合物の創成。

Synthesis, Structure, and Reactions of High- and Low Coordinate Main Group Compounds (Group 13-16), Oxidized Porphyrins, Carbenes, Boron Substituted Aromatics, Development of Synthetic Methods Based on Characteristic Features of Main Group Elements

Key Words ケイ素、ホウ素、リン、炭素、硫黄、ポルフィリン、有機合成
Silicon, Boron, Phosphorus, Carbon, Sulfur, Porphyrin, Organic Synthesis



研究グループ集合写真(2012年11月)
A photo of members (Nov., 2012)

反応有機化学 Organic Reaction Chemistry

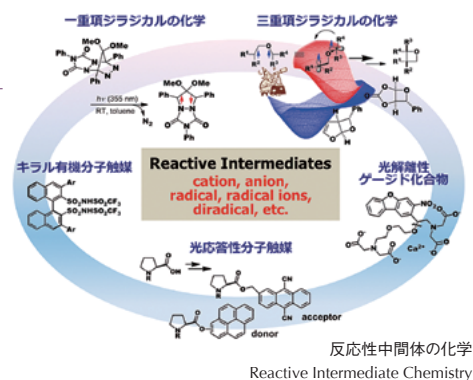
スタッフ●安倍 学(教授)、高木 隆吉(助教)、波多野 さや佳(助教)

Staff/ABE Manabu (Professor), TAKAGI Ryukichi (Assistant Professor), HATANO Sayaka (Assistant Professor)

当研究グループでは「自ら学ぶ姿勢と自然への感受性」を標語に、日々未知との遭遇を楽しみにして、反応有機化学に関する研究を実施している。具体的には、反応性中間体(特に開殻系分子)の反応挙動精査に基づく新規な機能性有機材料への応用研究、光エネルギーを利用した有機合成反応の開発研究、生理活性化合物の機能発現機構の解明のための光解離性ケージド化合物の合成、さらには有機触媒や金属触媒を利用した簡便な有機合成手法の開発研究に邁進している。

Our research study focuses on "Reactive Intermediate Chemistry", "Organic Photochemistry", "Caged Compound", and "Synthetic Organic Chemistry".

Key Words 開殻系分子、機能性有機材料、光エネルギー、ケージド化合物、有機触媒
Open-shell molecules, Organic Materials, Photo-energy, Caged compounds, Organocatalyst



量子化学 Quantum Chemistry

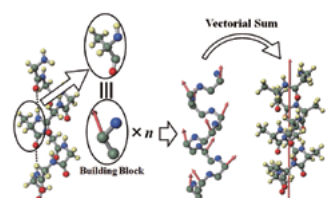
スタッフ●相田 美砂子(教授)、岡田 和正(准教授)、赤瀬 大(特任助教)

Staff/AIDA Misako (Professor), OKADA Kazumasa (Associate Professor), AKASE Dai (Assistant Professor (Special Appointment))

生体系や凝集系等の複雑な状態における分子あるいはその集合体の構造や反応性を、量子化学における理論と実験の両方の手法を用いることによって、分子のレベルで明らかにする。バイオ分野においては生体系における特異性の予測を、ナノサイエンス分野においてはナノサイズの分子設計・反応性予測を目指している。高分子の構造と機能との相関や、コンホメーション多様性のある溶質と水との相互作用についての分子論的研究を進めている。また放射光などの高エネルギー源により内殻励起された分子の特異的解離の研究も行っている。

We aim at predicting of chemical phenomena and understanding of reaction mechanisms in molecular assembly systems by means of quantum chemical and experimental methods. Research subjects include molecular assembly systems, chemical reactions in solution, and biological systems. In addition, fragmentation of molecules following inner-shell excitation by synchrotron radiation is also studied.

Key Words 分子軌道法、分子力場法、分子動力学法、モンテカルロ法、分子シミュレーション、赤外分光法、内殻励起
Molecular Orbital (MO), Molecular Mechanics (MM), Molecular Dynamics (MD), Monte Carlo (MC), Molecular simulation, IR spectra, Inner-shell excitation



α ヘリックスのマクロ双極子モーメントを、アミノ酸残基の双極子モーメントのベクトル和で予測
Macrodipole moment of a polypeptide in α -helix can be calculated by the vector sum of the component dipole moments.

放射線反応化学 Radiation Reaction Chemistry

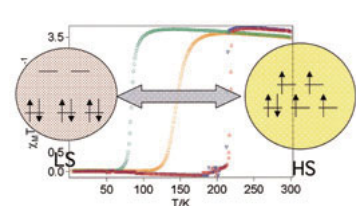
スタッフ●中島 覚(協力教員・自然科学研究支援開発センター教授)

Staff/NAKASHIMA Satoru (Professor from the Natural Science Center for Basic Research and Development)

放射化学的手法を用いて化学現象を解明している。特に、分子間の弱い相互作用に着目して、個々の分子、錯体を持つ性質とそれが集積することにより新たに発現する性質に焦点を当てて実験・理論両面から研究を進めている。また、新規二核錯体の合成とその反応機構の研究を進めている。さらに、環境中の放射性物質の移行についても研究している。

Our interests are to reveal chemical phenomena by using radiochemical technique as well as usual chemical approach. Especially, our research is focused on the control of electronic state and spin state by crystal construction and introducing guest molecule. We are also studying the migration of radioactive materials in the environment.

Key Words スピントクロスオーバー、二核錯体、集積型錯体、メスbauer分光法、DFT、環境放射能
Spin crossover, Binuclear complexes, Assembled complexes, Mössbauer spectroscopy, DFT, Environmental radioactivity



集積型鉄錯体のスピントクロスオーバー挙動
Spin-crossover phenomena of the assembled iron complexes.

Close-up FACILITY

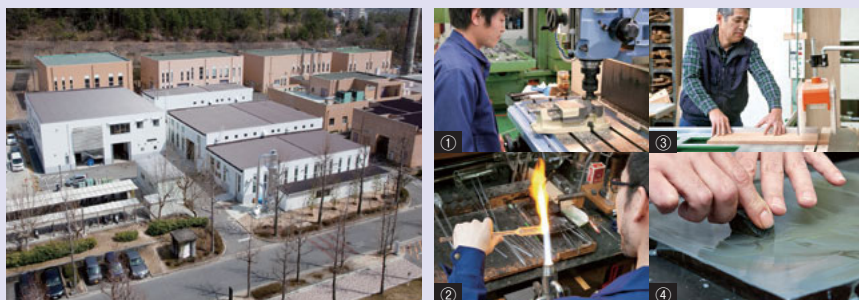
ものづくりプラザ

Innovation Plaza

〒739-8527 東広島市鏡山1-4-1 1-4-1 Kagamiyama, Higashi-Hiroshima-shi, 739-8527
<http://monoplaza.hiroshima-u.ac.jp>

全学の共通施設で、一般には市販されていない教育・研究用機器の設計・試作・製作・開発、試料製作および学生実習を行っています。また、学生が主体となって機械加工を行うフェニックス工房もあります。

This centre is for all members of this university and has well equipped workshop staffed by experienced personnel who provides technical support particularly in production, design and development of special apparatus and also in student training. Phoenix Workshop & Atelier, where student can carry-out machine works themselves, is also present in this plaza.



①機械加工 ②ガラス加工 ③木材加工 ④薄片製作
①machine work ②glass work ③wood work ④thin-section preparation