

物質化学専攻	研究分野	理論化学	Lab. ID MC03
研究室Webサイト	http://chem.s.kanazawa-u.ac.jp/theo/index.html		
研究課題の概要			
<p>研究室では「実験パート」と「計算パート」に分かれて、原子・分子レベルでの物性研究を行っています。実験パートでは物性研究のための固体NMRの解析法の開発、特に常磁性試料や複雑な構造を有する物質における分子ダイナミクスの高精度の解析法の開発を行っています。また、開発した固体NMRの解析法およびESR、X線・中性子線回折、熱測定、量子化学計算など物理化学的手法を用いて特異的物性の研究を行っています。計算パートでは統計力学および量子力学に基づいた計算化学の手法により、分子やクラスターの静的・動的物性の解析を行っています。また配置間相互作用法などの従来の方法では解析が困難であった系に対して、高精度でかつ簡便な解析方法の開発も行っていきます。</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>実験パートの学生は、固体NMRを用いた物性解析を中心に、必要なときは、試料作成や熱測定、電気伝導度測定などを行います。計算パートの学生は、計算機を用いて、量子化学計算を行います。特に計算方法の開発を行う学生には、プログラミングの勉強もしてもらいます。また、研究室全体で行う輪読のゼミが週に1回(学部4年生と大学院生は別の本を読みます)、実験パート、計算パートに分かれて行うゼミが週に1回ずつあります。</p>			
研究室生活の紹介等			
<p>週に1回行われる全体ゼミには全員参加します。また、それ以外に週に1回、実験もしくは計算パートで行うゼミがあり、それぞれ所属するパートの人が参加します。ゼミ以外の時間は学生ごとに与えられたテーマに沿った研究を行っています。比較的飲み会は多く、飲み会の中で学生と先生の交流や、研究に対するモチベーションを上げています。(D2)</p>			
教員からのメッセージ			
<p>当研究室では、学生が教員の指示通りに研究を進めるだけでなく、お互いに意見交換しながら研究を進めていきたいと考えています。研究を進めるときに、実際に実験や計算の作業を行っている者にしか分からないことも多く、対等な意見交換が重要となるからです。もちろん初めは教員が教えることが多くなりますが、お互いに議論しながら研究テーマをより面白いものに発展させていきましょう。</p>			
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		
2017.3	プロトン伝導性複合体 PVPA /xIm($x \geq 2$)におけるイミダゾールの運動性と局所構造		
2016.3	固体2次元交換NMRを用いた炭素間距離決定		
2016.3	アルギン酸-イミダゾール複合体における分子運動とプロトン伝導性		
2016.3	セバシン酸イミダゾリウム結晶における構造変化とプロトン伝導性		
2015.9	分子動力学法によるFerredoxin-NADP+-Reductaseの局所構造と活性相関		
2015.3	マロン酸イミダゾリウム結晶の局所構造とプロトン伝導性		
2014.3	イミダゾールのプロトン移動に関する理論的研究		
2014.3	水素結合を有する液晶分子の配向性とダイナミクスの研究		
2013.3	電場勾配テンソル計算によるZnO結晶にドーパされたInの局所構造解析		
2013.3	固体重水素NMRを用いたBSA結晶中の局所的な水分子のダイナミクス		
2013.3	重水素NMRによるメソポーラスシリカ細孔内の水のダイナミクスと液-液転移の解析		
2013.3	液晶配向場に取り込まれた小分子の挙動と物性への影響		
2013.3	固体NMRを用いたニワトリ卵白リゾチームの水和水の局所的なダイナミクス		
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		
2017.3	Theoretical study of intermolecular proton transfer using diabatic potential (透熱ポテンシャルを用いた分子間プロトン移動の理論的研究)		
2016.9	Phase transition and dynamics of water confined in nanoscale spaces (ナノスケール空間に閉じ込められた水の相転移とダイナミクス)		
2016.3	7CB-ノルマルヘプタン二成分系液晶の分子の配向性と相転移		
2013.9	固体NMRによるプロトン伝導性コハク酸イミダゾリウム結晶の局所構造と分子運動の解析		
研究室連絡先メールアドレス	水野 元博 <mizuno *at* se.kanazawa-u.ac.jp>		