

広島大学
大学院理学研究科化学専攻
理学部化学科

教育研究成果報告書

平成16年度
(2004年度)

平成17年7月

目 次

はじめに	1
1. 化学専攻	2
1-1. 化学専攻の組織	2
1-1-1. 教員・事務員	2
1-1-2. 教員の異動	3
1-1-3. 非常勤講師	3
1-1-4. 化学専攻の運営	4
1-2. 化学専攻における大学院教育	5
1-2-1. 教育目標と入学者受入方針	5
1-2-2. 在籍学生数とチューター	6
1-2-3. 平成16年度化学専攻授業科目履修表	7
1-2-4. 平成16年度化学専攻開講授業科目	8
1-2-5. TAおよびRA	9
1-2-6. 各研究グループの在籍学生数	11
1-2-7. 平成16年度修士学位授与	12
1-2-8. 博士課程修了者の進路	13
1-2-9. 平成16年度博士学位授与	14
1-3. 化学専攻における研究活動	15
1-3-1. 研究活動の概観	15
1-3-2. 客員研究員・博士研究員	16
1-3-3. 分子構造化学講座	17
構造物理化学研究グループ	17
固体物性化学研究グループ	20
錯体化学研究グループ	25
分析化学研究グループ	27
構造有機化学研究グループ	30
1-3-4. 分子反応化学講座	33
反応物理化学研究グループ	33
反応有機化学研究グループ	36
天然物有機化学研究グループ	40

集積化学研究グループ	43
量子化学研究グループ	48
1-4. 化学専攻としての活動	51
1-4-1. 化学講演会	51
1-4-2. Chem サロン	54
1-4-3. 化学専攻教員の理学研究科および全学での活動	54
1-4-4. 化学専攻教員の受賞	55
1-4-5. 量子生命科学プロジェクト研究センター	56
2. 化学科	67
2-1. 化学科の構成	67
2-1-1. 化学科の教員	67
2-1-2. 化学科の運営	68
2-2. 化学科における学部教育	69
2-2-1. 教育目標と入学者受入方針	69
2-2-2. 在籍学生数とチューター	70
2-2-3. 平成16年度化学科開講授業科目	71
2-2-4. 担当授業科目一覧	74
2-2-5. 平成16年度新入生用履修要領	75
2-2-6. 平成16年度新入生用化学科授業科目履修表	76
2-2-7. 卒業研究	77
2-2-8. 卒業生の進路	81
報告書作成ワーキンググループ	81

はじめに

平成 16 年度化学専攻長・化学科長

相田 美砂子

平成 16 年 4 月に、国立大学法人広島大学がスタートしました。化学専攻・化学科では、大学の組織変更に右往左往させられることなく、これまでどおり着実に、本来の教育・研究を推進することができました。この平成 16 年度化学科・化学専攻の教育研究成果報告書は、その成果をまとめたものです。

化学専攻では「分子認識と分子設計」や「量子生命科学」に関する研究の推進を中期目標としており、平成 16 年度に着任した新しい 3 人のメンバーとともに、これらの研究を進展させています。また、平成 15 年度科学技術振興調整費新興分野人材養成「ライフサイエンス分野を中心とする融合領域」の分野として採択された『ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム』（NaBiT プログラム）の推進も順調に進んでいます。

21 世紀に入って数年がたち、アトムの日も過ぎてしまいました。化学の分野の未来を担う次世代の教育に、私達は日々取り組んでいます。私達が独自の研究を推進していくことが、同時に、次世代を担う若い人たちの教育そのものとなります。しかし、基礎の部分は補強が必要です。大学に入学してくる学生が持っている基礎知識は、文部（科学）省の推進した「ゆとり教育」の直接の結果として、確実に減少しています。「学ぶ権利」がそこなわれたような状態で小・中・高を育ってきた学生に、どのような内容をどのように教えていくのか、化学科では工夫を重ねています。万全の対策を施すことはできず、悩みは続いています。より良い教育の仕組みを見出すために努力を続けています。

この報告書は、化学専攻・化学科の長い時間軸上の、ある t における幅 Δt の断面を表わしています。この断面について、自らしっかり吟味し、また、外部からの評価・批判を受けることによって、これからの教育・研究をより一層推進していくことができます。私達の研究・教育の最新情報については下記 URL をご参照ください。

化学専攻

<http://www.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/index.html>

化学科

<http://www.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/undergraduate/index.html>

NaBiT プログラム

<http://www.nabit.hiroshima-u.ac.jp/>

1. 化学専攻

1-1. 化学専攻の組織

1-1-1. 教員・事務員

平成 11 年度の大学院部局化によって、教員は大学院に所属することとなった。化学専攻は、分子構造化学講座と分子反応化学講座の二大講座で構成されており、各講座内でいくつかの研究グループが形成されている。平成 17 年 3 月現在の化学専攻の構成員は次のとおりである。

化学専攻分子構造化学講座

教授	井上	克也
教授	江幡	孝之
教授	深澤	義正
教授	藤原	照文
教授	三吉	克彦
助教授	塚原	聡
助教授	灰野	岳晴
助教授	水田	勉
助教授	山田	康治
助教授	吉田	弘 (1 月死去)
助手	岩本	啓
助手	大木	寛
助手	岡本	泰明
助手	久保	和幸
助手	福原	幸一

化学専攻分子反応化学講座

教授	相田	美砂子
教授	大方	勝男
教授	大野	啓一
教授	齊藤	昊 (5 月死去)
教授	山本	陽介
助教授	石橋	孝章
助教授	岡田	和正
助教授	河内	敦
助教授	小島	聡志
助教授	田林	清彦
助手	勝本	之晶
助手	高木	隆吉
助手	高橋	修
助手	仲	一成
助手	平賀	良知

化学専攻事務化学専攻事務

事務員	伊野木	真由美
事務補佐員	加藤	道子
事務補佐員	中野	由佳

1-1-2. 教員の異動

平成16年

3月31日	太田 伸二	(自然科学研究支援開発センター助教授)	長浜バイオ大学教授として転出
3月31日	奥田 勉	(分子構造化学講座教授)	定年退職
3月31日	松浦 博厚	(分子構造化学講座教授)	定年退職
3月31日	榮 慶丈	(分子反応化学講座助手)	広島大学大学院理学研究科特任助手として転出
4月 1日	井上 克也	(分子構造化学講座教授)	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助教授より採用
4月 1日	江幡 孝之	(分子構造化学講座教授)	東北大学大学院理学研究科助教授より採用
4月 1日	石橋 孝章	(分子反応化学講座助教授)	神奈川科学技術アカデミーより採用
5月20日	齊藤 昊	(分子反応化学講座教授)	死去

平成17年

1月 4日	吉田 弘	(分子構造化学講座助教授)	死去
3月31日	大木 寛	(分子構造化学講座助手)	信州大学理学部助教授として転出

1-1-3. 非常勤講師

平成16年度の非常勤講師

北川 進	(京都大学大学院工学研究科教授)
授業科目名：集積型金属錯体の機能化学	担当：錯体化学研究グループ
尾崎 幸洋	(関西学院大学理工学部教授)
授業科目名：振動分光法の新しい展開	担当：集積化学化学研究グループ
富岡 秀雄	(三重大学工学部教授)
授業科目名：反応有機化学特論	担当：反応有機化学研究グループ

1-1-4. 化学専攻の運営

化学専攻の運営は、化学専攻長を中心にしておこなわれている。化学専攻長補佐がそれを補佐する。

平成16年度化学専攻長	相田 美砂子
化学専攻長補佐	水田 勉

また、化学専攻の円滑な運営のために各種委員会等が活動している。平成16年度の各種委員会の委員一覧を次にあげる。

【1】化学専攻内の各種委員会

情報処理委員	◎ 相田 高橋 吉田 芦田 大木 岡本 高木
エックス線 障害防止委員	◎ 水田 山田 河内 岡田 岩本 平賀

【2】理学研究科における各種委員会の化学専攻委員

施設活用委員*	大野 相田
定員配分委員	大野 相田
5ヶ年計画委員	大野 相田
教務委員**	小島
学生生活委員**	河内
国際交流委員*	三吉
自己点検・評価委員*	深澤 三吉
環境保全委員*	◎● 藤原（照）
広報委員**	岩本
大学院委員	大野 相田
入学者選抜方法検討委員**	泉
計算機利用委員	吉田
エックス線障害防止委員	水田
特殊加工技術開発室推進委員	山田
学部・研究科公開実行委員*	塚原
ホームページ委員	吉田
要覧編集委員**	田林
R I K K S 運営委員	高橋
中央廃液処理施設運営委員**	● 大方
作業環境測定専門委員会委員	● 小島
留学生センター運営委員*	● 小島

◎は委員長 ●全学委員
 *は 任期2年（H16年度～）
 **は任期2年（H15年度～）

1－2．化学専攻における大学院教育

1－2－1．教育目標と入学者受入方針

【1】教育目標

化学専攻は、学部教育での化学を体系的に身に付けた人材とともに、他分野の教育基盤をもつ人材を新たに受け入れ、物質科学の中心を占める基幹学問としての化学とその関連分野における最先端の領域を切り開いていく研究者および高度な専門的知識を有する職業人を養成することを目的とする。現代科学の急速な学際化・国際化・情報化に対応して、以下の教育目標を設定する。

- (1) 化学の専門的知識を体系化して教えるとともに、他分野の基盤をもつ人材にも配慮した幅広い教育を行う。
- (2) 化学分野の学際的な研究領域の拡大に応じ、他分野の研究者と交流し最先端の研究にふれることのできる教育をおこなう。
- (3) 社会的要請に対応するために、化学とその関連分野における高度専門職業人を養成する教育をおこなう。
- (4) 社会の国際化・情報化に対応するために、英語教育・情報教育を併用した化学専門教育に積極的に取り組む。

【2】アドミッションポリシー

化学専攻では、大学院で高度な化学の専門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る。

1-2-2. 在籍学生数とチューター

【1】平成16年度化学専攻在籍学生数

(平成16年10月1日現在)

入学年度	化学専攻博士課程前期	化学専攻博士課程後期
平成16年度	33 (10)	3 {1}
平成15年度	34 (9) {1}	11 (3) [1] {1} <1>
平成14年度		4 [1] <1>
平成13年度		1
合計	67 (19) {1}	24 (3) [2] {2} <2>

() 内は女子で内数

[] 内は国費留学生数で内数

{ } 内は私費留学生数で内数

< > 内は社会人学生数で内数

【2】チューター

理学部においては以前から学部学生に対してチューター制度を適用していたが、理学研究科でも、大学院学生に対してチューターを設定することになった。各学年のチューターを次にあげる。

	博士課程前期	博士課程後期
平成16年度生	深澤, 小島	相田, 藤原(照)
平成15年度生	三吉	大方, 田林
平成14年度生	相田, 藤原(照)	山本
平成13年度生	大方, 田林	齊藤, 山田

1-2-3. 平成16年度化学専攻授業科目履修表

授業科目		博士課程前期								担当教員
		1年次				2年次				
		1		2		3		4		
		単位	時間	単位	時間	単位	時間	単位	時間	
必修	化学構造論A	2	2							大野, 相田
	化学構造論B	2	2							藤原 (照), 三吉
	化学反応論A	2	2							齊藤, 岡田
	化学反応論B	2	2							山本
	化学特別研究	2	6	2	6	2	6	2	6	各教員
	現代英語			2	2					小島
	構造物理化学Ⅰ	2	2							*
	構造物理化学Ⅱ			2	2					江幡
	固体物性化学Ⅰ	2	2							井上, 山田
	固体物性化学Ⅱ			2	2					井上, 山田
選択	錯体化学Ⅰ	2	2							*
	錯体化学Ⅱ			2	2					*
	分析化学Ⅰ	2	2							*
	分析化学Ⅱ			2	2					*
	構造有機化学Ⅰ	2	2							灰野
	構造有機化学Ⅱ			2	2					深澤
	理論化学			2	2					*
	集積化学	2	2							大野, 相田, 岡田
	反応物理化学Ⅰ	2	2							*
	反応物理化学Ⅱ			2	2					*
	反応有機化学Ⅰ	2	2							山本, 河内
	反応有機化学Ⅱ			2	2					山本, 河内
	天然物有機化学Ⅰ	2	2							*
	天然物有機化学Ⅱ			2	2					*
	計算情報化学			2	2					相田
	計算化学演習			2	2					吉田
	物質科学特論			2	2					相田, 岩田
	量子情報科学	2	2							相田, 神沼
	計算機活用特論	2	2							吉田, 森本
	計算機活用演習	2	2							吉田, 森本
	構造物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	江幡, 吉田
	固体物性化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	井上, 山田
	錯体化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	三吉, 水田
	分析化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	藤原 (照), 塚原
	構造有機化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	深澤, 灰野
	理論化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	*
	反応物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	齊藤, 田林
	反応有機化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	山本, 河内
	天然物有機化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	大方, 小島
	集積化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	大野, 相田, 岡田
	量子生命科学セミナー	1	2	1	2					相田, 吉田, 泉, 片柳
	有機化学系合同セミナー	1	2			1	2			深澤, 大方, 山本
	化学特別講義									集中講義

* 隔年開講。平成16年度は開講しない。

1-2-4. 平成16年度化学専攻開講授業科目

	担当教員	授業のキーワード
化学構造論 A	大野, 相田	電子状態理論, 振動分光法
化学構造論 B	三吉, 藤原 (照)	溶液化学, 溶媒和イオンの構造, 無機典型元素化合物の構造
化学反応論 A	齊藤, 岡田	素反応過程, 反応速度論, 衝突理論
化学反応論 B	山本	有機反応機構, 分子軌道
現代英語	小島	英語, ヒアリング, 化学用語, 熟語
構造物理化学 II	江幡	レーザー分光, 電子・振動・回転スペクトル, 分子構造
固体物性化学 I	井上, 山田	固体物性, 複合物性, 分子磁性, 分子伝導性, X線, 回折現象
固体物性化学 II	井上, 山田	固体物性, 磁気測定, 伝導度測定, 熱測定, NMR, メスバウワー効果
構造有機化学 I	灰野	超分子化学, 分子認識, コンビナトリアル化学, 立体配座
構造有機化学 II	深澤	超分子化学, 分子認識, 立体配座解析
集積化学	大野, 相田, 岡田	光と分子, 分子間相互作用, 分子認識, 自己組織化
反応有機化学 I	山本, 河内	NMRによる構造および速度解析・典型元素
反応有機化学 II	山本, 河内	有機反応の中間体, 有機典型元素, 有機超原子価化合物, 有機合成
計算情報化学	相田	量子化学, 計算化学, 情報化学, 化学情報学, データベース, 分子設計
計算化学演習	吉田	量子化学, 計算化学
物質科学特論	相田, 岩田	原子間力, 分子間力, 化学結合論, 水素結合, 分子クラスター, 金属クラスター
量子情報科学	相田, 神沼	物理学と情報, 量子現象と計算, 情報と生命
計算機活用特論	吉田, 森本	計算機言語, Java, C++, Fortran, データマイニング, データベース
計算機活用演習	吉田, 森本	計算機言語, Java, C, Fortran

1-2-5. TAおよびRA

【1】ティーチング・アシスタント

化学専攻大学院博士課程後期在学学生（留学生は除く）に、ティーチング・アシスタント（TA）のシステムを適用している。教員による教育的配慮の下に化学科3年次必修の化学実験の教育補助業務を行わせることによって、大学院生の教育能力や教育方法の向上を図り、指導者としてのトレーニングの機会を提供する。

平成16年度のTA

氏名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
河 口 誉元	化学実験	固体物性化学	D 2
田 中 雅人	化学実験	量子化学	D 2
田 邊 和久	化学実験	天然物有機化学	D 2
山 根 庸平	化学実験	固体物性化学	D 3
三 宅 敏子	化学実験	量子化学	D 2
上 野 里志	化学実験	天然物有機化学	D 2
今 村 友紀	化学実験	錯体化学	D 2
吉 田 智喜	化学実験	量子化学	D 2
吉 田 智喜	情報活用演習	量子化学	D 2

【2】リサーチ・アシスタント

化学専攻における研究支援体制を充実・強化し、また若手研究者の養成を促進するために、リサーチ・アシスタント（RA）のシステムを適用している。大学院博士課程後期在学者を、その所属研究グループに研究補助者として参画させることによって、その研究グループにおける研究活動を効果的に促進し、研究体制を充実させる。さらに、その学生に対して、若手研究者としての研究遂行能力の養成を図る。

平成 16 年度の R A

大学院生氏名	日高 次彦	所属研究グループ	天然物有機化学
学年	D 3	指導教員	小島 聡志 助教授
研究プロジェクト名	ケイ素の特性を活かした選択的オレフィン合成反応の開発と応用に関する研究		
研究の内容	アミド基を有する Peterson 試薬を反応機構に基づいて設計し、それを Peterson 反応に用いたところ、高選択的に Z- α , β -不飽和アミドを合成できた。また、選択的 Horner- Wadsworth-Emmons 反応を用いて高い Z-選択性で Weinreb アミドを合成し、これらのアミドと有機セリウムとの反応によって、ほぼ完全な立体保持で Z- α , β -不飽和ケトンに変換できた。		

1-2-6. 各研究グループの在籍学生数

(平成16年4月現在)

研究グループ名	M1	M2	D1	D2	D3	D4
化学専攻分子構造化学講座						
構造物理化学研究グループ	2	2	0	0	0	0
固体物性化学研究グループ	5	1	0	1	1	0
錯体化学研究グループ	4	7	0	1	0	0
分析化学研究グループ	2	5	0	0	1	0
構造有機化学研究グループ	6	6	0	1	1	0
化学専攻分子反応化学講座						
反応物理化学研究グループ	3	2	0	0	0	0
反応有機化学研究グループ	7	6	1	0	0	0
天然物有機化学研究グループ	3	4	1	3	2	0
集積化学研究グループ	1	0	1	2	0	1
量子化学研究グループ	0	2	1	3	0	0
計	33	35	4	11	5	1

1-2-7. 平成16年度修士学位授与

括弧内は所属研究グループ名である。

浅野 広巳	衝撃波管による高エネルギー物質 NTO のクラスター反応機構に関する研究 (反応物理化学)
阿萬 正明	キレート化による立体制御を利用した W-P-Pd 2 核骨格の構築と Pd 中心の反応性 (錯体化学)
飯盛 将史	N-P-N 架橋 3 座配位子を利用した edge-shared 型 2 核 Pd(II) および Pt(II) 錯体の合成とその触媒能 (錯体化学)
石津 優子	歪んだ Diphospha[2]ferrocenophane 二座配位子とその金属錯体の合成と、熱及び光反応性 (錯体化学)
伊藤 純	ピリジン及びピリミジンを配位子とする新規三座配位子の合成とその応用 (反応有機化学)
浦垣 充朗	鉄-アシルホスホネート及びビスホスフィンイミド錯体をキレート配位子として有するアルミニウム錯体の合成と反応性 (錯体化学)
雲林院 敏文	アントラセン配位子を有するクロロゲルミレンの反応および超原子価 4 配位酸素化合物(10-O-4)合成の試み (反応有機化学)
大久 真幸	溶液内置換反応の自由エネルギー変化についての QM/MM-MC 法における研究 (量子化学)
片岡 紘子	メタル炉加熱気化導入法の特長を活用した非金属元素の高性能 ICP 原子スペクトル分析法の開発 (分析化学)
片山 貴文	チタナジホスフィンキレートをもつ Pd 錯体によるアルキンのダブルヒドロホスフィニレーション反応とその反応機構 (錯体化学)
河村 智子	閉環メタセシス(RCM)と Diels-Alder 反応による 5-6-5 員環の連続的構築に関する研究 (天然物有機化学)
姜 新東	Synthesis and Isomerization of O-Equatorial Unstable Pentacoordinate Spirophosphoranes Bearing a Modified Martin Ligand (<i>o</i> -C ₆ H ₄ (Li)C(C ₂ F ₅) ₂ OL i) (新規 Modified Martin 配位子 (<i>o</i> -C ₆ H ₄ (Li)C(C ₂ F ₅) ₂ OL i) を有する超原子価 5 配位リン化合物(O-equatorial)の合成と異性化) (反応有機化学)
河内 満	開閉式扉をもつカゴ型カリックス[4]アレーンホストの極性溶媒中でのゲスト包接挙動 (構造有機化学)
小林 睦美	Ag ⁺ イオンとビピリジンの配位結合を基盤とした自己集合カプセルの合成とその包接挙動 (構造有機化学)
鹿野 達也	赤潮プランクトン <i>Heterocapsa circularisquama</i> に含まれるカキ致死活性物質の単離と構造解析 (天然物有機化学)
獅野 裕一	液液界面近傍における AOT 巨大逆ミセルの動的挙動の <i>in situ</i> 顕微測定と解析 (分析化学)
多田 修悟	酸素 K 殻励起したギ酸メチルクラスターの光化学反応 (反応物理化学)
田中 温子	逆ミセル吸着シリカの顕微蛍光測定と、それを固定相とした HPLC における有機化合物幾何異性体の分離挙動 (分析化学)
田中 俊考	吸着逆ミセルを用いたポリアミド合成とポルフィリン化合物の分離挙動 (分析化学)
田中 正洋	1,3 双極子付加環化反応を基盤とするイソオキサゾール液晶化合物の固相法を用いたコンビナトリアル合成 (構造有機化学)
寺井 良英	オキサアルカンのコンホメーションと融解挙動の鎖長依存性 (構造物理化学)

西平 佳奈	オキサアルカノールの構造と熱物性との相関（構造物理化学）
濱村 弘明	E(=O,NR)の配位をカギとした $\text{Cp}^*(\text{CO})_2\text{Fe}\{\text{P}(=\text{E})(\text{OMe})_2\}$ と 4 族遷移金属錯体との反応（錯体化学）
藤井 隆吏	相補的な自己集合体を形成するビスポルフィリンホストの合成とゲスト包接挙動（構造有機化学）
増原 直治	キラルな置換基を持つ二核フェロセン誘導体の混合原子価状態の制御とその結晶構造（固体物性化学）
松本 陽子	ダブルカリックス[5]アレーンとフラーレンの超分子形成を利用した自己集合ナノ構造体の合成（構造有機化学）
村井 豊	Peterson 反応の中間体を用いた反応機構の検討（天然物有機化学）
村上 江梨	Amphoteric なメタラホスフィノボランモノマーの生成と、Lewis 酸・塩基ならびに多重結合化合物との反応（錯体化学）
薬師神 啓孝	新規な反応活性種としてのボリルテルリドの合成、構造および反応（反応有機化学）
八谷 恵美	[4+3]および[5+2]付加環化反応などに基づいたビシクロ[4.3.1]デセン骨格の合成研究（天然物有機化学）
山口 虎彦	Construction of a Novel Tridentate Ligand Derived from Thioxanthone Bearing an Oxygen Atom at 1,8-Positions（1,8 位に酸素原子を有するチオキサントンから誘導した新規三座配位子系の構築）（反応有機化学）
山口 泰生	カリックスアレーンでキャップした金属ポルフィリンと軸配位子との錯形成挙動（構造有機化学）

1-2-8. 博士課程修了者の進路

(平成 17 年 5 月現在)

（平成17年度分）													
	修了者総数	就職者									進 学	研 究 生・補 助 員	そ の 他
		一般職						教職					
		科学技術者	製造業	情報処理技術者	公務員	その他	小計	高等学校 教諭	大学 教員	小計			
前期修了	32(9)	23(8)	0	0	0	0	23(8)	2	0	2	7(1)	0	0
後期修了*	3(0)	2(0)	0	0	0	1	3(0)	0	0	0	—	0	0

() 内は女子で内数

*単位取得退学者を含む。

1-2-9. 平成16年度博士学位授与

授与年月日を〔 〕内に記す。

栗田 栄一 〔平成16年4月26日〕(甲)

Vibrational Spectroscopic Studies on Stretching Vibrations and Force Constants of CX (X=C, Si, Ge, N, P, As, O, S, Se, F, Cl, and Br) Single and Multiple Bonds

(CX (X=C, Si, Ge, N, P, As, O, S, Se, F, Cl, Br) 単結合および多重結合の伸縮振動と力の定数に関する振動分光学的研究)

主査：大野 啓一 教授

副査：大方 勝男 教授，相田 美砂子 教授，松浦 博厚 教授

Shahnaz Begum 〔平成16年9月30日〕(甲)

Studies on Stereoselectivity in the Formation of Three-Membered Rings by Nucleophilic Conjugate Addition

(求核的な共役付加による三員環形成における立体選択性に関する研究)

主査：大方 勝男 教授

副査：深澤 義正 教授、山本 陽介 教授

日高 次彦 〔平成17年3月21日〕(甲)

Studies on Highly Z-Selective Preparation of α, β -Unsaturated Amides and the Efficient Conversion of Weinreb Amides to Z- α, β -Unsaturated Ketones

(α, β -不飽和アミドの高いZ-選択的合成と Weinreb アミドの Z- α, β -不飽和ケトンへの効率的変換)

主査：大方 勝男 教授

副査：相田 美砂子 教授，深澤 義正 教授，山本 陽介 教授

小島 聡志 助教授

1－3．化学専攻における研究活動

1－3－1．研究活動の概観

化学専攻の各研究グループにおいて，平成 16 年度（2004 年度）に行われた研究の諸成果は，1－3－3 項および 1－3－4 項に，それぞれ，分子構造化学講座および分子反応化学講座の研究グループごとに記載する。それらの各研究グループのデータを化学専攻としてまとめたものを，この項において概観する。

【1】 招待講演・導入研究費・特許出願等の総数

化学専攻のスタッフが平成 16 年度（2004 年度）に受けた招待講演等や導入した研究費等の総数を示す。

項目	分類	数
総説・著書	日本文	6
	英文	6
招待・依頼・特別講演	国内の学会・研究会	10
	国際学会	12
科学研究費補助金	特定領域研究	4
	基盤研究(A)	2
	基盤研究(B)	7
	基盤研究(C)	4
	萌芽研究	3
	若手研究(A)	1
	若手研究(B)	1
	外国人特別研究員奨励費	0
	学術創生研究費	1
その他の研究費（公募）		5
委任経理金		7
特許出願		0

1-3-2. 客員研究員・博士研究員

平成16年度に化学専攻で受け入れた研究員等を次にあげる。

日本学術振興会外国人特別研究員

氏名	Imdad Ullah Mohammadzai (パキスタン・ペシャワール大学)
受入期間	2003 年 9 月－2004 年 7 月
研究課題	生物学的及び速度論的研究におけるモデルとしてのミセルメディアの分析化学的応用
受入教員	藤原 照文 教授 (分析化学研究グループ)

日本学術振興会外国人特別研究員

氏名	Jozef Drabowicz (ポーランド・ポーランド科学アカデミー)
受入期間	2005 年 1 月－2005 年 2 月
研究課題	ヘテロ原子化合物の新規な不斉構造の構築
受入教員	山本 陽介 教授 (反応有機化学研究グループ)

1-3-3. 分子構造化学講座

構造物理化学研究グループ

スタッフ 江幡 孝之 (教授), 吉田 弘 (助教授), 福原 幸一 (助手)

○研究活動の概要

当研究グループでは、種々の非線形レーザー分光法と超音速分子線装置を用いて、水素結合やファンデルワールス力等の分子間力で結びついた分子集団 (分子クラスター) の構造、および化学反応、振動エネルギー緩和の研究を行っている。また、振動分光法・熱分析と量子化学計算を併用して、両親媒性分子を中心に多様な物質系の構造とそれに関わる相互作用を総合的に研究している。また、量子化学計算に基づいた分子クラスターの構造決定、振動スペクトルの解析も行っている。2004 年度における主な研究活動は次のとおりである。

ピコ秒赤外-紫外ポンプ-プローブ法を開発し、超音速分子線中の気相孤立フェノールやその同位体、さらに水素結合体の OH 伸縮振動緩和の実時間測定を行った。その結果、孤立フェノールの OH 振動の振動緩和速度は 15 ピコ秒であるが、CH 基をすべて重水素置換すると 80 ピコ秒と緩和が著しく遅くなることが分かり、この結果から OH 振動は CH 振動を含むドアウエイ状態を経由して緩和することが明らかになった。さらに、水素結合形成により OH 伸縮振動の緩和は速くなるが、エネルギーは直接分子間振動に散逸するわけではなく、一度分子内に再分配されてから分子間に散逸することを明らかにした。

ピコ秒レーザーを用いたポンプ-プローブ法で行った。親分子の消失および生成物の立ち上がりの時間変化、生成物の運動エネルギー分布の解析、さらには CASSCF 計算を行った。その結果、反応は水素原子そのものが移動する単純なものではなく、電子移動に伴いクラスター全体が変形し、その後プロトンが移動する反応であると結論した。

プロトンが付加した水分子クラスターの赤外分光を行なった。水分子数が少ないとクラスターは網目状構造を持つが、20 量体と大きくなるナノメートル程度のかご型構造を持つことを明らかにした。

アルキル鎖の一部をオキシエチレンブロックで置換した一連の鎖状アルキル/オリゴオキシエチレン/アルキルトリブロック関連化合物において、鎖長に依存した多様なコンホメーション状態と特異な熱物性を見出した。これらはオキシエチレンブロックのコンホメーション安定性、アルキルブロックの van der Waals 相互作用、C-O 部分の局所双極子-双極子相互作用などの弱い分子間相互作用の競合により発現することがわかった。

○発表原著論文

- V. Venkatesan, A. Fujii, T. Ebata and N. Mikami, "A direct evidence for an aromatic C-H---O hydrogen bond by fluorescence-detected infrared spectroscopy." *Chem. Phys. Lett.* **394**, 45-48 (2004)
- A. Fujii, S. Morita, M. Miyazaki, T. Ebata, and N. Mikami, "A molecular cluster study on activated CH/ π interactions: Infrared spectroscopy of aromatic molecule-acetylene clusters.", *J. Phys. Chem. A*, **108**, 2652-2658 (2004)
- Y. Yamada, T. Ebata, M. Kayano, and N. Mikami, "Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study on the dynamics of vibrational relaxation of jet-cooled phenol I -IVR of the OH and CH stretching vibrations of bare phenol-.", *J. Chem. Phys.* **120**, 7400-7409 (2004)
- M. Kayano, T. Ebata, Y. Yamada, and N. Mikami, "Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study on the dynamics of vibrational relaxation of jet-cooled phenol II - IVR of the OH stretching vibration of hydrogen-bonded clusters", *J. Chem. Phys.* **120**, 7410-7417 (2004)
- M. Miyazaki, A. Fujii, T. Ebata and N. Mikami, "Infrared spectroscopic evidence for protonated water clusters forming nanoscale cages.", *Science*, **304**, 1134-1137 (2004)

- O. David, C. Dedonder-Lardeux, C. Jouvet, H. Kang, S. Martrenchard, T. Ebata and A. L. Sobolewski, "Hydrogen transfer in excited pyrrole-ammonia clusters", *J. Chem. Phys.* **120**, 10101-10110 (2004)
- Y. Yamada, N. Mikami and T. Ebata, "Real time detection of doorway states in the intramolecular vibrational energy redistribution of the OH/OD stretching vibration of phenol.", *J. Chem. Phys.* **121**, 11530-11534 (2004)
- M. Miyazaki, A. Fujii, T. Ebata and N. Mikami, "Infrared spectroscopy of size-selected benzene-water cluster cations $[C_6H_6-(H_2O)_n]^+$ ($n=1-23$): Hydrogen bond network evolution and microscopic hydrophobicity.", *J. Phys. Chem. A*, **108**, 10656-10660 (2004)
- N. Biswas, S. Wategaonkar, T. Watanabe, T. Ebata and N. Mikami, "Fluorescence, REMPI, hole-burning, and FDIR spectroscopy of para-cyanophenol-water₁ complex", *Chem. Phys. Lett.* **394**, 61-67 (2004)
- M. Miyazaki, A. Fujii, T. Ebata and N. Mikami, "Electronic spectroscopy of benzene-water cluster cations, $[C_6H_6-(H_2O)_n]^+$ ($n=1-4$): Spectroscopic evidence for phenyl radical formation through size-dependent intracluster proton transfer reactions.", *Chem. Phys. Lett.* **399**, 412-416 (2004)
- N. Akai, H. Yoshida, K. Ohno and M. Aida, "Photochemistry of *p*-toluidine in a low-temperature argon matrix. Infrared spectrum and geometrical structure of 4-methylanilino radical", *Chem. Phys. Lett.*, **403**, 390-395 (2005)
- K. Taga, Y. Jibu, S. Hamada, Y. Yamamoto, T. Yoshida, N. Shida, H. Yoshida, K. Ohno and H. Matsuura, "Density functional study of *n*-propyltrichlorogermane and *n*-propyltrichlorostannane", *J. Mol. Struct.*, **694**, 63-71 (2004)
- K. Fukuhara, T. Mizawa, T. Inoue, H. Kumamoto, Y. Terai, H. Matsuura, and K. Viras, "Chain-length-dependent conformational transformation and melting behaviour of alkyl/oligo(oxyethylene)/alkyl triblock compounds: α -octyl- ω -octyloxyoligo(oxyethylene)s", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **7**, 1457-1463 (2005)

○招待・依頼・特別講演

- 江幡孝之, "Picosecond time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopy of molecular clusters.", Physical chemistry colloquium on ultrafast and intense field phenomena, 仙台, 2004 年 8 月 (国際学会, 招待講演)
- 江幡孝之, "Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study on the IVR of the OH stretching vibration of phenol and its isotopomers in jets.", 金沢, 2004 年 11 月 (国際学会, 招待講演)
- 江幡孝之, "Picosecond time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopy of molecules and molecular clusters.", 南パリ大学 (フランス), 2004 年 9 月 (依頼講演)
- 江幡孝之, 「時間分解ポンププローブ法による電子励起クラスターの反応ダイナミクス研究」, 広島, 2004 年 6 月 (国内学会, 招待講演)

○国際学会での講演

- 江幡孝之, "IVR dynamics probed by time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopy.", Gordon research conference on molecular and ionic clusters, フランス, 2004 年 9 月 (口頭講演)

○研究助成の受け入れ状況

- 科学研究費補助金 基盤研究(B)「水素結合を触媒とした気相ナフトールの光誘起シス-トランス異性化反応の研究」江幡 孝之(2003-2005)
- 科学技術振興調整費新興分野人材養成 「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」 コアメンバー 吉田 弘
- 広島大学 ベンチャー・ビジネス・ラボラトリー 「バイオ-IT 融合産業創出計画」 代表 吉田 弘

○学界ならびに社会における活動

- ・学協会役員, 委員
- 江幡 孝之, Ohio state university international symposium on molecular spectroscopy, International

advisory committee (2003-)

江幡 孝之, 分子科学研究会 幹事(2001-)

吉田 弘, 日本コンピュータ化学会理事(2002-)

・論文誌編集委員

吉田 弘, Journal of Computer Chemistry, Japan (2003-)

・学会の組織委員

江幡 孝之, 分子構造総合討論会 2004, 広島, 2004 年 9 月

吉田 弘, 分子構造総合討論会 2004, 広島, 2004 年 9 月

福原 幸一, 分子構造総合討論会 2004, 広島, 2004 年 9 月

・座長を行った学会・討論会の名称

江幡 孝之, 第 20 回化学反応討論会, 東京, 2004 年 6 月

○その他

日本学術振興会日仏共同研究 (2004- 2005) 代表 江幡孝之

固体物性化学研究グループ

スタッフ 井上 克也 (教授), 山田 康治 (助教授), 大木 寛 (助手)

○ 研究活動の概要

当研究室では新しい機能をもつ固体の創製を目指し、種々の手法を用い固体の静的・動的構造と物性の関係を解明してきた。

協奏的多重機能を有する分子磁性体の構築と物性研究：キラル構造を有する磁性体（キラル磁性体）は、空間反転対称性と時間反転対称性が同時に破れた新しいカテゴリーに属する固体と考えられる。キラル磁性体では2つのパリティが同時に破れていることから、特異な磁気光学効果、磁気構造、電気—磁気効果（M-E 効果）を示すと考えられる。純粋な無機化合物でキラル構造を達成するのは難しいため、我々は分子性の設計性の容易さを利用してキラル磁性体の構築とその物性研究を進めている。

新規イオン伝導体探索と伝導機構の解明：2次元層状構造をもつ RbSn_2F_5 においては低温相から超イオン伝導相にいたる過程を複素イオンピーダンス法による電氣的測定、 ^{19}F NMR の線形シミュレーションや単結晶構造解析で追跡し、さらに放射光と最大エントロピー法を用いた超イオン伝導相の電子密度分布から、フッ化物イオンの無秩序状態やイオン伝導経路を明らかにした。カチオン伝導体である Na_3InCl_6 では単結晶の ^{23}Na NMR によりサイト間の交換とその速度を直接検出し、イオン伝導パスを明らかにした。また、このイオン伝導の経路は 200K と 450K での構造解析の結果を比較総合することで確認することができた。一方、超プロトン伝導体に転移する CsH_2PO_4 では転移温度の直前で、水素結合を切断し $\text{H}_2\text{PO}_4^{2-}$ の再配向運動が励起されることを ^1H 、 ^{31}P NMR で確認した。

2004 年度の研究成果は次の通りである。

(1) キラル構造を有する分子磁性体の構築研究：キラル構造を有する分子磁性体の構築研究では、より大きなキラル磁気構造を有すると考えられる 5 価タングステンおよび 5 価モリブデンを有する新規キラル磁性体の構築に成功した。

(2) キラル磁性体の磁気構造解明研究：二次元キラルフェリ磁性体 Green Needle ($[\text{Mn}\{(S \text{ or } R)\text{-pnH}\}(\text{H}_2\text{O})][\text{Cr}(\text{CN})_6](\text{H}_2\text{O})$) について、飛行時間分解型粉末中性子線回折を高エネルギー物理学研究所、中性子施設で行い、得られた磁気反射を計算機シミュレーションを行うことにより、磁気空間群が $P2_12_12_1$ であることを明らかにした。この磁気空間群は、以前磁気非線形光学効果の測定で得られた結果と一致する。また同じ Green Needle の単結晶試料について、スペイン・Zaragoza 大学、フランス・ラウエランジェバン研究所との共同で、中性子線回折実験を行った。転移温度以下で磁気反射の観測に成功したが、長周期構造に伴う衛星反射の観測には至らず、磁気構造のらせんピッチが長大であることが示唆された。Green Needle の単結晶試料について、高輝度放射光施設 (Spring-8) において X 線の非弾性磁気散乱の研究を行った。いくつかについて、磁気構造のらせんピッチに相当する衛星反射が確認され、そのアジマス角依存性は、コニカル磁気構造と仮定する計算結果と一致したが、その再現性が乏しく、更なる研究を進めている。

(3) キラル磁性体の内部磁化測定：Green Needle の単結晶試料について、高エネルギー物理学研究所、中間子実験施設とカナダ、ブリティッシュ コロンビア大学、TRIUMF 中間子実験施設との共同研究で、中間子測定を行った。転移温度以下で明瞭な長距離秩序が観測され、内部磁化の情報を得ることができた。詳細については更なる検討を進めている。

(4) キラル磁性体の磁気光学効果：可視磁気円二色性 (MCD) の測定を様々な様々なキラル磁性体について測定した。その結果、光学活性と転移温度以下で明瞭なファラデー効果が観測され、キラル構造を有する強磁性体（フェリ磁性体）であることを確認した。また Green Needle の粉末試料について高輝度放射光施設 (Spring-8) において XMCD 測定を行った。各元素別 XMCD の観測に成功し、磁気測定から得られた磁気構造を一致することが確認された。また一部の測定で磁

気不斉二色性の観測にも成功した。磁気不斉二色性の結果については、再現実験を継続中である。

(5) キラル磁性体の磁気ダイナミクス：キラル磁性体では、偏った電場と磁気スピンのカップリングによる特異な磁気ダイナミクスが予想される。ロシア、ウラル州立大学と共同研究で、Green Needle の単結晶試料についてパルス磁場による高速磁化過程の研究を行った結果、磁化反転の遅れが観測された。この遅れは、通常の磁性体で見られるものと比べて、非常にゆっくりとしたものであったが、その原因については、キラル構造に由来するものか磁壁の移動によるものか、詳細に再測定を行っている。Green Needle の単結晶試料について X バンド、Q バンドによる電子スピン共鳴 (ESR) 研究を、自然科学研究機構およびロシアの固体物理研究所と共同研究を行った。その結果、転移温度近傍以下で、非常に複雑なスペクトルを得た。完全解明には至っていないが、解析を進めている。W バンドおよびさらに高磁場の ESR 測定を Green Needle の単結晶試料についてドイツ、フンボルト大学、福井大学、高等研究所で共同研究を行った。その結果、マンガニオンとクロムイオンのフェリ磁性相互作用の強磁性転移に伴う磁化過程が 120 テスラ (1, 200, 000 ガウス) 付近に観測された。スペクトルの解明と主に詳細に検討を進めている。

(6) キラル磁性体の物性理論：キラル磁性体の磁気構造、ダイナミクスについて、九工大、東北大、東京大学、産総研・CERC 理論グループ、日本原子力研究所理論グループと進めた。磁気スピン交換相互作用、磁気双極子相互作用、ジアロシンスキーモリヤ相互作用を含めて、解析的に解を求めた結果、転移温度直下にコメンシュレートインコメンシュレート (整合-非整合、C-IC) 転移の可能性が示唆され、磁気データの異常な結果を支持した。今後、上記相互作用に加えて、磁気異方性を含めて磁化の温度変化および磁化過程を解析的、あるいは不可能であれば数値計算的に求めて行く予定である。

(7) 新規なイオン伝導体探索と伝導機構の解明：ハイパーバレント結合をもつ Sn(II) のフッ化物 MSn_2F_5 ($\text{M}=\text{K}, \text{Rb}$) ではフッ化物イオンが異なったサイト間をジャンプしながら拡散することを ^{19}F NMR と新しく開発した線形シミュレーションで確認した。また、高温相の構造を放射光を用いた X 線回折で追跡し、フッ化物イオンの無秩序状態を最大エントロピー法で明らかにした。また、カチオン伝導体である Na_3InCl_6 では単結晶の ^{23}Na NMR によりサイト間の交換を直接検出することができ、イオン伝導パスが明らかとなった。超プロトン伝導体に転移する CsH_2PO_4 では転移温度の直前で、水素結合を切断して $\text{H}_2\text{PO}_4^{2-}$ の再配向運動が励起されることが確認できた。

(8) 最大エントロピー法によるイオン伝導経路：一連の新規イオン伝導体 CuHgSX ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) を合成し粉末 X 線回折により結晶構造を明らかにし、最大エントロピー法により銅イオン伝導の伝導経路を明らかにした。また、 AgHgSX ($\text{X}=\text{Br}, \text{I}$) についても同様な実験を行ない、銀イオンを電荷担体とするイオン伝導性物質であることを示した。

(9) メスバウアー分光法による静的・動的構造の解明：二核フェロセン誘導体の混合原子価状態を決定する因子として、カチオン対称性の効果とカチオン回りの環境の効果をキラルな置換基を導入することにより独立に議論した。また、anti-gauche 異性を有する架橋配位子を用いることで多彩な集積構造の構築に成功し、その電子状態の変化を検討した。

○発表原著論文

Hiroyuki Imai, Katsuya INOUE, Koichi Kikuchi, Yusuke Yoshida, Mitsuhiro Ito, Tetsuya Sunahara, Satoru Onaka, "Three-dimensional Chiral Molecule-based Ferrimagnet with Triplet-helical Strand Structure" *Angew. Chem. Int. Ed.*, **43**, 5618-5621 (2004).

Akinori Hoshikawa, Takashi Kamiyama, Agus Purwanto, Kazuki Oishi, Wataru Higemoto, Toru Ishigaki, Hiroyuki Imai, Katsuya Inoue, "TOF neutron powder diffraction studies on a chiral two-dimensional molecule-based magnet" *J. Phys. Soc. Jpn.*, **73**, 2597-2600 (2004).

Yoshimi Oka and Katsuya Inoue, "Structures and Magnetic Properties of a New Cobalt(II) Linear Trimer with Phenylcinnamic Acid," *Chem. Lett.*, **33**, 402-403 (2004).

Kumagai H, Oka Y, Inoue K, Kurmoo M, "2D molecular square grid of cobalt(II) with tridentate phenylglycinate and mandelate: structure and magnetism," *J. Phys. and Chem. Solids*, **65**, 55-60

- (2004).
- Hitoshi Kumagai, Motoko Akita-Tanaka, Satoshi Kawata and Katsuya Inoue, "Hydrothermal Synthesis and Structural Characterization of a Manganese (II) Wire Made Up of Octahedral and Square Mn(II) Ions," *Chem. Lett.*, **34**, 526-527 (2004).
- Shinya Hayami, Kazutoshi Danjobara, Katsuya Inoue, Yoshihiro Ogawa, Naohide Matsumoto, Yonezo Maeda, "A Photoinduced Spin Transition Iron(II) Complex with Liquid-Crystal Properties," *Adv. Mater.*, **16**, 869-872 (2004).
- Sinya Hayami, Koichiro Hashiguchi, Gergely Juhasz, Masaaki Ohba, Hisashi Okawa, Yonezu Maeda, Kenichi Kato, Keiichi Osaka, Masaki Takeda, Katsuya Inoue, "1-D Cobalt (II) Spin Transition Compound with Strong Interchain Interaction: $[\text{Co}(\text{pyterpy})\text{Cl}_2] \cdot \text{X}$," *Inorg. Chem.*, **43**, 4124-4126 (2004).
- Yoshida Y, Tateiwa N, Mitoh M, Hidaka M, Kawae T, Hosokoshi Y, Inoue K, Takeda K, "Magnetization plateau and cusp in $S=1$ spin ladder," *Physica B, Condens. Mat.*, **376**, 34-37 (2004).
- Wang ZM, Zhang B, Otsuka T, Inoue K, Kobayashi H, Kurmoo M, "Anionic NaCl-type frameworks of $[\text{Mn-II}(\text{HCOO})_3]$, templated by alkylammonium, exhibit weak ferromagnetism," *Dalton Transactions.*, 2209-2216 (2004).
- Sakai T, Okamoto K, Okunishi K, Kindo K, Narumi Y, Hosokoshi Y, Katoh K, Inoue K, Goto T, "Magnetic field effects on an organic $S=1/2$ alternating linear Heisenberg antiferromagnet F5PNN," *J. Mag. Mag. Mat.*, **272-76**, 872-873 (2004).
- Yamada K, Yagishita S, Tanaka H, Tohyama K, Adachi K, Kaizaki S, Kumagai H, Inoue K, Kitaura R, Chang HC, Kitagawa S, Kawata S, "Metal-complex assemblies constructed from the flexible hinge-like ligand $\text{H}(2)\text{bhnq}$: Structural versatility and dynamic behavior in the solid state," *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **10**, 2684-2660 (2004).
- T. Kubo, M. Sakamoto, M. Akabane, Y. Fujiwara, K. Yamamoto, M. Akita, K. Inoue, T. Takui, and K. Nakasuji, "Four-stage amphoteric redox properties and biradicaloid character of tetra-tert-butylidicyclopenta[b,d]thieno[1,2,3-cd;5,6,7-c' d']diphenylene," *Angew. Chem. Int. Ed.*, **43**, 6474-6479 (2004).
- V.I. Maksimov, N.V. Baranov, V.G. Pleschov, K. Inoue, "Influence of the Mn intercalation on magnetic properties of TiSe_2 ," *J. Alloys and Compounds.*, **384**, 33-38 (2004).
- N V Baranov, K Inoue, V I Maksimov, A S Ovchinnikov, V G Pleschov, A Podlesnyak, A N Titov and N V Toporova, "Ni intercalation of titanium diselenide: effect on the lattice, specific heat and magnetic properties," *J. Phys., Condes. Mat.*, **16**, 9243-9258 (2004).
- Keiko Nunokawa, Tetsuya Sunahara, Satoru Onaka, Kazuya Okazaki, Hiroyuki Imai, Katsuya Inoue, and Tomoji Ozeki, "A Novel Au_{12} Supramolecule Composed of Two-, Three-, and Four-coordinated Au(I) Centers Constructed on the S_3 Scaffolding," *Chem. Lett.*, **33**, 1300-1301 (2004).
- Kanda H, Narumi Y, Hosokoshi Y, Suzuki T, Kawata S, Kindo K, Inoue K, Kaizaki S, "Synthesis, magnetic properties and MCD spectra of a four coordinate copper(II) complex with two chelated phenolate-substituted imino nitroxides," *Inorganica Chimica Acta.*, **357**, 3125-3133 (2004).
- K. Mukai, N. Senba, T. Hatanaka, H. Minakuchi, K. Ohara, M. Taniguchi, Y. Misaki, Y. Hosokoshi, K. Inoue, N. Azuma, "Molecular Paramagnetic Semiconductor: Crystal Structures and Magnetic and Conducting Properties of the $\text{Ni}(\text{dmit})_2$ Salts of 6-Oxoverdazyl Radical Cations ($\text{dmit} = 1,3\text{-Dithiol-2-thione-4,5-dithiolate}$)," *Inorg. Chem.*, **43**, 566-576 (2004).
- Sunahara T, Onaka S, Ito M, Imai H, Inoue K, Ozeki T, "Construction of nano-channels based on zinc(II) pyrazine-2-carboxylate complexes," *Eur. J. Inorg. Chem.*, 4882-4890 (2004).
- K. Yamada, M. M. Ahmad, Y. Ogiso, T. Okuda, J. Chikami, G. Miehe, H. Ehrenberg, and H. Fuess, "Two dimensional fluoride ion conductor RbSn_2F_5 studied by impedance spectroscopy and ^{19}F , ^{119}Sn , and ^{87}Rb NMR," *Europ. Phys. B*, **40** 167-176 (2004).
- Y. Tomita, H. Matsushita, H. Yonekura, Y. Yamauchi, K. Yamada, and K. Kobayashi, "Li ion

conductivity of solid electrolyte, $\text{Li}_{3-2x}\text{M}_x\text{InBr}_6$ ($\text{M}=\text{Mg, Ca, Sr, Ba}$)", *Solid State Ionics*, 174, 35-39 (2004).

K. Yamada, T. Sagara, Y. Yamane, H. Ohki, and T. Okuda, "Superprotonic conductor CsH_2PO_4 studied by ^1H , ^{31}P NMR and X-ray diffraction", *Solid State Ionics*, 175, 557-562 (2004).

K. Yamada, K. Kumano and T. Okuda, "Conduction path of the sodium ion in Na_3InCl_6 studied by X-Ray diffraction and ^{23}Na and ^{115}In NMR", *Solid State Ionics*, 176, 823-829 (2005).

S. Nakashima, Y. Asada, and T. Okuda, " ^{57}Fe Mossbauer Spectroscopic Study on the Assembled Iron Complexes", *Hyperfine Interactions*, 156/157, 353-358 (2004).

S. Nakashima, Y. Yamamoto, Y. Asada, N. Koga, and T. Okuda, "New Assembled Fe-trans-1,2-Bis(4-pyridyl)ethylene-NCS(NCSe) Complexes -Hydrogen Bonded and p-p Interacted Structure and Grid Structure Enclathrating Ligand-", *Inorg. Chim. Acta*, 358, 257-264 (2005).

○総説・著書

Katsuya INOUE, Shin-ichi OHKOSHI and Hiroyuki IMAI "Chiral Molecule-based Magnets" *J. S. Miller & M. Drillon Eds, Magnetism: Molecules to Materials V, Molecule-Based Materials*, Wiley-VCH, Weinheim, 41-70 (2004).

○招待・依頼・特別講演

K. Inoue, "Structures and Properties of Transparent Chiral Magnets", II Russian Conference "High spin molecules and molecular magnets, Novosibirsk, May 13-16, 2004.

K. Inoue, "Physical properties of chiral magnets based on transition metals", ISSP (Institute for Solid State Physics, Chel'novka) conference, Chel'novka, May 17-18, 2004.

K. Inoue, "Physical properties of transparent chiral magnets", Kyushu Institute of Technology International Symposium on Multifunctional Molecular Magnetism [KIT-ISMMM 2004], Tobata, Oct. 8-11, 2004.

K. Inoue, "Development of synthesis and properties of chiral molecule-based magnets", International Symposium on Quantum Spin Systems, Hayama, Nov. 30-Dec. 3, 2004.

井上克也, "キラル磁性体の磁気構造", 学術創成「新しい研究ネットワークによる電子相関係の研究」コラボによる研究の新展開, Izu, Dec. 10-11, 2004.

○研究助成の受け入れ

科学研究費補助金基盤研究(B) 「高温キラル分子磁性体の構築と磁気物性」

代表 井上克也

科学研究費補助金学術創成研究費「新しい研究ネットワークによる電子相関係の研究__物理学と化学の真の融合を目指して__」

分担者 井上克也

文部科学省ナノ支援事業「高分解能磁気測定」

担当責任者 井上克也

科学研究費補助金基盤研究(C) 「岩塩型リチウムイオン伝導体の構築とその動的構造」

代表 山田康治

○学界ならびに社会における活動

・学協会役員, 委員

山田 康治, 日本化学会中国四国支部事務局庶務幹事 (1999)

日本化学会中国四国支部事務局会計幹事 (2000)

・ 討論会の組織委員

井上克也, 分子研研究会「Chiral/multiferroic material の物性-強誘電磁性体と磁気光学効果の

新展開-」 7/16-18, 2004、提案代表者

Kyushu Institute of Technology International Symposium on Multifunctional
Molecular Magnetism [KIT-ISMMM 2004], Tobata, Oct. 8-11, 2004、組織委員長
分子構造討論会、プログラム委員

・ 座長を行った学会・討論会の名称

井上克也, II Russian Conference "High spin molecules and molecular magnets

分子磁性国際会議(ICMM2004)

錯体討論会

分子構造討論会

分子研研究会

Kyushu Institute of Technology International Symposium on Multifunctional
Molecular Magnetism

山田 康治, 第 30 回固体イオニクス討論会.

錯体化学研究グループ

スタッフ 三吉 克彦 (教授), 水田 勉 (助教授), 久保 和幸 (助手)

○研究活動の概要

リンは3価と5価の原子価状態をとるため金属との間に多様な結合様式が可能である。当研究グループではこの多様性を利用して新規リン配位子の開発を行い、金属との間に新しい結合様式の形成や金属触媒として有用な立体構造の構築へと展開している。

イミノホスホラン ($R_3P=NR'$) には、ヘテロ原子化学的に興味深い反応が数多く報告されている。この観点から、リン上のRの一つが遷移金属Mになったメタライミノホスホランにも多様な反応性が期待できる。しかしながら、このタイプの錯体は、合成例すら極めて限られていたが、有望な合成ルートを開発することに成功した。そこで、これを新たな窒素ドナー配位子として用い、2つの金属がP=N結合で架橋されたヘテロ二核錯体の合成とその反応性の研究へと展開した。また、窒素原子の強いLewis塩基性と遷移金属フラグメントのLewis酸性を利用した新規な有機小分子の取り込み反応を見出した。

多核金属錯体を合成するためには、一般に架橋配位子が用いられる。P-P直接結合をナフタレン骨格で補強することにより、加熱しても切断されることのない新規ジホスフィンを合成した。これを架橋とした2核錯体を合成し、加熱により2核骨格のcis-trans異性化を実現した。一方、フェロセンの1,1'位をリンで架橋したリン架橋[1]フェロセノファンが、光照射により開環重合することを利用して2量化反応を行い、リン架橋[1.1]フェロセノファンを合成した。この[1.1]フェロセノファンは、syn-antiの平衡にあり、新規なキレート配位子として有望なsyn体が熱的に安定であることを明らかにした。

○発表原著論文

- K. Kubo, N. D. Jones, M. J. Ferguson, R. McDonald, R. G. Cavell, "Chelate and Pincer Carbene Complexes of Rhodium and Platinum Derived from Hexaphenylcarbodiphosphorane, $Ph_3P=C=PPh_3$ " *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 5314-5315 (2005).
- T. Mizuta, Y. Imamura, K. Miyoshi, H. Yorimitsu, K. Oshima, "Phosphorus-Bridged [1.1]Ferrocenophane with syn and anti Conformations" *Organometallics*, **24**, 990-996 (2005).
- T. Mizuta, S. Kunikata, K. Miyoshi, "Synthesis and molecular structures of dinuclear complexes with 1,2-dihydro-1,2-diphenyl-naphtho[1,8-c,d]1,2-diphosphole as a bridging ligand" *J. Organomet. Chem.*, **689**, 2624-2632 (2004).
- K. Kubo, I. Kanemitsu, E. Murakami, T. Mizuta, H. Nakazawa, K. Miyoshi, "Synthesis of a transition-metalated phosphinoborane dimer" *J. Organomet. Chem.*, **689**, 2425-2428 (2004).
- H. Nakazawa, T. Kawasaki, K. Miyoshi, CH. Suresh, N. Koga, "C-C bond cleavage of acetonitrile by a carbonyl iron complex with a silyl ligand," *Organometallics*, **23**, 117-126 (2004).
- T. Ishiyama, K. Miyoshi, H. Nakazawa, "Ethylene polymerization and ethylene/styrene copolymerization with secondary phosphine-pendant and phosphide-pendant complexes of Zr and Hf" *J. Mol. Cat. A: Chem.*, **221**, 41-45 (2004).

○総説・著書・その他

水田 勉, 第5版 実験化学講座 22 「金属錯体・遷移金属クラスター」, 2004年, 丸善
久保和幸, 「“リンゴ”を集めてサッカーボールをつくる—P₅配位子錯体の集積による無機フラーレン錯体の構築」, 化学同人, 化学, **59**, 64 (2004)

○国際学会での講演

- T. Mizuta, M. Aman, Y. Ishizu, K. Miyoshi "Preparation and Reactivity of P-Pd- or P-P-Bridged [2]Ferrocenophane" The International Symposium on Dynamic Complexes, ISDC 2004, Nagoya, January 9-10, 2005. (ポスター発表)

○研究助成の受け入れ

科学研究費補助金 基盤研究(B) 「多様なリン配位子架橋を利用した反応性多核金属錯体の創製」 代表 三吉 克彦

科学研究費補助金 基盤研究(C) 「メタラリンヘテロ環を配位子とする金属錯体の合成と金属同士の共同的基質活性化反応」 代表 水田 勉

科学研究費補助金 特定領域研究 「リン原子の立体的および電子的柔軟性に基づく多核金属錯体の動的架橋構造」 代表 水田 勉

広島大学研究支援金 「P-メタライミノホスホランの反応性とこれを配位子として用いた高機能性触媒の構築」 代表 久保 和幸

○学界ならびに社会における活動

・座長を行った学会・討論会の名称

水田 勉, 第 54 回錯体化学討論会, 熊本, 2004 年 9 月

水田 勉, 第 83 回日本化学会春季年会, 東京, 2005 年 3 月

・その他

三吉 克彦, 広島県立皆実高等学校出張講義 (日本化学会事業) (2005 年 2 月)

スーパーサイエンスハイスクール (鳥取県立鳥取東高等学校)

水田 勉・久保和幸 自然化学実験 広島大学 (2004 年 9 月)

水田 勉 自然化学特別講義 鳥取県立鳥取東高等学校 (2004 年 11 月)

分析化学研究グループ

スタッフ 藤原 照文 (教授), 塚原 聡 (助教授), 岡本 泰明 (助手)

○研究活動の概要

近年, 種々の異相界面のナノ微小域を対象とする先端的研究が推し進められており, その微小域における化学種の相互作用に関する情報を得る方法論が重要になる。また, ナノ微小域の特異性を活用した新規な分離・検出法の開発も期待される。そこで, 当研究グループではナノ微小域における特異な反応性の本質の解明と外場による制御, 及び原子・分子スペクトルによる新規な超微量計測法の開発を目的として, 以下のテーマを中心に研究を行っている。

1. ナノ微小域における特異な反応性と外場による制御に関する研究

以下のことが, 平成 16 年度の研究成果である。

- (a) 逆ミセルメディア化学発光(CL)反応とフロー分析法: 逆ミセル中での CL 反応に対する銅(II)-オキシシラン錯体の特異な触媒能を活用して, キレート抽出法を結合させた高感度なフローインジェクション CL 定量法を開発した。
- (b) 吸着逆ミセルを用いた界面分離化学: シリカゲル表面への陽イオン界面活性剤逆ミセルの吸着平衡に影響を及ぼす因子を明らかにするとともに, 吸着した逆ミセル相を顕微蛍光法により観測することに成功した。さらに, その吸着逆ミセルを固定相として活用し, 液体クロマトグラフ分離に関する相互作用について検討した。
- (c) 逆ミセル吸着ナノ界面場を用いたポリアミド合成と分離分析への活用: シリカ表面の吸着逆ミセル界面相においてポリアミドを合成し, 形成されたナノ構造体を原子間力顕微鏡による観測した。さらに, そのポリアミドを固定相としてポルフィリン化合物の分離挙動を調べ, 特異な保持能をもつことを明らかにした。
- (d) 液液界面における不均一反応の *in situ* 顕微測定: 従来, 巨視的な分光測定によって, 平均的な情報しか得られなかった液液界面における様々な化学現象を, 薄層二相マイクロセルを用いた *in situ* (その場) 顕微法によって測定した。本手法により, 1. 液液界面における AOT 逆ミセルの生成・消滅過程の測定; 2. 液液界面に生成する酸型ポルフィリン会合体の偏光特性の解明; 3. 液液界面における単一巨大 DNA の構造転移と吸着現象の測定, を行った。
- (e) マイクロ四重極電極を用いた単一 DNA の誘電泳動: 40 kbp(bp:塩基対)を超える大きな DNA の分離分析法の確立を目指して, マイクロ四重極電極を用いた誘電泳動に関する研究を継続している。DNA と会合する様々な添加物について, 泳動に与える影響を明らかにした。

2. 選択的気化分離過程の導入による高性能原子スペクトル分析法の研究

平成16年度は, ICP-MSとICP-AESを併用するホウ素の化学形態別定量法を開拓した。ホウ酸が揮発性に富むことに着目して, ホウ酸のみをメタル炉加熱気化導入法により定量した後, 気化装置内に残存している不揮発性ホウ素を炉上分解して, さらに気化導入することで, ネブライザー試料導入による従来法より簡便に, 両者を分別して定量することを可能にした。また, 鉄鋼試料などの無機材料中の微量成分を迅速にICP-AESで分析するために, 固体試料を前処理することなく直接定量する方法について, 亜鉛を例にして基礎的検討を行った。

○発表原著論文

- Y. Okamoto, H. Kataoka, S. Tsukahara, T. Fujiwara, "Sequential determination of boric acid and boron nitride by electrothermal vaporisation inductively coupled plasma atomic spectrometry," *J. Anal. At. Spectrom.*, **20**, 383-384 (2005).
- T. Uechi, Y. Okamoto, T. Fujiwara, "A flow method for the determination of oxine-copper based on a reversed micellar mediated chemiluminescence detection system following on-line extraction," *Bunseki Kagaku*, **53**, 285-290 (2004).
- A. Takata, S. Tsukahara, H. Watarai, "Dynamic microscopic extraction of europium(III) with

- 2-thenoyltrifluoroacetone observed as random fluorescence flashes at dodecane-water interface,” *Chem. Lett.*, **33**, 518-519 (2004).
- T. Tokimoto, S. Tsukahara and H. Watarai, “Interfacial kinetics of synergistic extraction of samarium(III) studied by micro-two-phase sheath flow/fluorescence microscopy,” *Analyst*, **129(11)**, 1099-1105 (2004).
- S. Tsukahara, A. Takata, H. Watarai, “Magnetic field enhanced microextraction rate of europium(III) with 2-thenoyltrifluoroacetone and oxalate at dodecane-water interface,” *Anal. Sci.*, **20(11)**, 1515-1521 (2004).
- Y. Okamoto, H. Kataoka, C. Konishi, T. Fujiwara, K. Ito, “Sensitive determination of iodine by tungsten boat furnace vaporization inductively coupled plasma mass spectrometry using tetramethylammonium hydroxide as a chemical modifier,” *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **18**, 2351-2353 (2004).
- Y. Okamoto, C. Konishi, H. Kataoka, T. Fujiwara, “Determination of iron in calcium-rich samples by tungsten boat furnace vaporization inductively coupled plasma mass spectrometry (TBF/ICP-MS) using calcium(II) ion as a chemical modifier,” *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **18**, 3148-3151 (2004).
- Y. Okamoto, K. Kanda, S. Kishiwada, T. Fujiwara, “Determination of phosphorous and sulfur in environmental samples by electrothermal vaporization inductively coupled plasma atomic emission spectrometry,” *Appl. Spectrosc.*, **58**, 105-110 (2004).

○総説・著書・その他

- 藤原 照文, “溶媒の諸物性,” *化学便覧 基礎編II改訂5版*, 第11章9節, 372-373 (2004).
- H. Watarai, H. Monjushiro, S. Tsukahara, M. Suwa, Y. Iiguni, “Migration analysis of micro-particles in liquids using microscopically designed external fields,” *Anal. Sci.*, **20**, 423-434 (2004). (総説)
- 塚原 聡 (分担執筆), *基礎分析化学実験*, 梅澤喜夫, 本水昌二, 渡会 仁, 寺前紀夫編, 東京化学同人, (2004).

○招待・依頼・特別講演

- 塚原 聡, 「液液界面において生成するメゾスコピック分子会合体の直接顕微測定」, 大阪大学分析化学研究懇談会, 豊中市, 2004年9月 (依頼講演)

○国際学会での講演

- I. U. Mohammadzai, T. Ashiuchi, S. Tsukahara, Y. Okamoto, T. Fujiwara, “On-line solvent extraction coupled to a reversed micellar mediated chemiluminescence detection system: application to the determination of degradation products of trinitrotoluene in environmental samples,” International Conference on Environmental Challenges in the New Millennium, 2004年3月11-13日, Peshawar (Pakistan). (口頭発表)
- I. Morita, K. Hata, K. Ito, Z. Huang, T. Hirokawa, A. R. Timerbaev, H. Kataoka, Y. Okamoto, T. Fujiwara, E. Iwamoto, “Ion chromatography of Iodine species in natural water,” 第1回日中韓合同イオンクロマトグラフィー討論会, 2004年12月14-16日, 春日井. (口頭発表)
- S. Tsukahara, “Direct microscopic measurements of chemical dynamics at liquid-liquid interface,” Asia Young Analytical Chemist Sessions (Tokyo Conference 2004), Chiba (Japan), Aug.-Sep. 2004 (ポスター発表).

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内および国際)

- 岡本 泰明, 日本鉄鋼協会「次世代鉄鋼迅速オンサイト分析の実用化」研究会 研究分担者 (2002～)
- 岡本 泰明, 広島県立大学重点研究事業 「超臨界水反応場を利用する環境・生体試料分解システム開発と原子分光分析への応用」 研究分担者 (2003～2004)

○研究助成の受け入れ状況

日本学術振興会科学研究費補助金 基盤研究(C)(2)「逆ミセル吸着ナノ界面場の特性と新規な液体クロマトグラフ分離法の開発」代表者 藤原 照文
 理学部学術研究助成金（委任経理金）三井化学株式会社「工程管理における微量金属及び過酸化物のオンライン化学発光分析法の開発」代表者 藤原 照文
 文部科学省科学研究費補助金 萌芽研究(2)「不均一交流電場内における DNA 伸張運動の機構の解明と新規泳動分析法の開発」代表者 塚原 聡
 日本学術振興会科学研究費補助金 基盤研究(B)(2)「液液界面に生成するナノ集積体の外部場による移動制御と分離への展開」代表者 塚原 聡
 奨学寄附金 日本鉄鋼協会「次世代鉄鋼迅速オンサイト分析の実用化」代表者 岡本 泰明

○学界ならびに社会における活動

・学協会役員，委員

藤原 照文，日本化学会中国四国支部庶務幹事（2004）
 藤原 照文，日本分析化学会中国四国支部庶務幹事（1989～）
 塚原 聡，日本分析化学会近畿支部常任幹事（2000-2001）
 塚原 聡，日本分析化学会近畿支部幹事（1999，2002-2003）
 塚原 聡，日本分析化学会若手交流会近畿支部委員（2001-2002）
 塚原 聡，日本溶媒抽出学会理事（2004～）

・論文誌編集委員

藤原 照文，日本分析化学会分析化学編集委員（2003-2004）

・学会の組織委員

藤原 照文，日本分析化学会第 64 回分析化学討論会実行委員会委員（2002-2003）
 藤原 照文，日本化学会西日本大会実行委員会委員（2003）
 藤原 照文，第 1 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員会委員（2004）
 塚原 聡，日本分析化学会第 63 回日本分析化学討論会実行委員（2001-2002）

・座長を行った学会・討論会の名称

藤原 照文，第 65 回分析化学討論会，沖縄，2004 年 5 月
 塚原 聡，第 65 回分析化学討論会，沖縄，2004 年 5 月
 塚原 聡，日本分析化学会第 53 年会，習志野，2004 年 9 月
 塚原 聡，第 1 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム，東広島，2004 年 11 月

・その他

客員研究員の受け入れ

藤原 照文，平成 15 年度日本学術振興会外国人招へい研究者（長期）事業，I. U. Mohammadzai（パキスタン，ペシャワール大学教授），2003 年 9 月 5 日～2004 年 7 月 4 日

構造有機化学研究グループ

スタッフ 深澤 義正 (教授), 灰野 岳晴 (助教授), 岩本 啓 (助手)

○研究活動の概要

2005 年度, 当研究室では主に芳香族化合物を基盤とした人工レセプター分子の開発を行った。以下にその概要を示す。

ポルフィリンを有する分子ピンセットが平面 π 電子化合物を包接することを見いだした。また C₆₀ を包接することを見いだした。

ピリジンジカルボキシアミドで架橋したビスポルフィリンの有機溶媒中での自己相補的二量化反応を発見した。

ポルフィリンの環電流効果を見積もる手法を確立した。得られたパラメータから求められる化学シフト変化量は実測値を良く再現し, 含ポルフィリン有機化合物の構造決定に本手法が有効であることを示した。

カリックス [5] アレーンと C₆₀ をオキシエチレン鎖で架橋した化合物の分子内会合について検討したところ, 温度が高くなるにつれて C₆₀ の会合度が上昇する興味深い現象が明らかになった。詳細な解析により, この分子内会合はエントロピー支配による会合であることが分かった。

dinaphthalene-1-carboxylate SnIV(tpp)錯体の溶液中における構造解析を、ポルフィリンの環電流計算法を用いて解析したところ、二種類のコンフォメーションが存在することを見だし、この配座平衡における熱力学パラメータを算出した。

カリックスレゾルシンアレーンを基盤とした新規なキャビタンドを合成し, その銀イオンによるカプセル形成に成功した。このカプセルは空孔内に 14Å 程度の分子の大きさをもつゲスト分子を CH/ π 相互作用を駆動力に選択的に包接した。

カリックス [5] アレーンを基盤としたダンベル型 C₁₂₀ を包接する新規人工ホスト分子を開発した。

硫黄置換ステロイド化合物を合成し, チオエーテルの磁気異方性効果を見積もるためのパラメータを求めた。得られたパラメータから求められる化学シフト変化量が実測値を良く一致し, 含硫黄有機化合物の構造決定に本手法が有効であることを示した。

○発表原著論文

H. Iwamoto, M. Yamaguchi, S. Hiura, Y. Fukazawa, "Synthesis of molecular tweezers bearing porphyrins and its complexation toward electron acceptors," *HETEROCYCLES*, **63**, 2005–2011 (2004).

T. Haino, T. Fujii, Y. Fukazawa, "Self-complementary Bis-porphyrins," *Tetrahedron Lett.*, **46**, 257–260 (2005).

H. Iwamoto, K. Hori, Y. Fukazawa, "A Model of Porphyrin Ring Current Effect," *Tetrahedron Lett.*, **46**, 731–734 (2005).

T. Haino, M. Yanase, Y. Fukazawa, "Self-Inclusion Properties of C₆₀-linked Calix[5]arene," *Tetrahedron Lett.*, **46**, 1411–1414 (2005).

H. Iwamoto, Y. Fukazawa, "Conformational Analysis of Dinaphthalene-1-carboxylate Complex of SnIV(tetraphenylporphyrin)," *HETEROCYCLES*, **65**, 523–530 (2005).

T. Haino, M. Kobayashi, M. Chikaraishi, Y. Fukazawa, "A New Self-Assembling Capsule via Metal Coordination," *Chem. Commun.* 2321 – 2323 (2005), (selected as HotPapers).

T. Haino, J. Seyama, C. Fukunaga, Y. Murata, K. Komatsu, Y. Fukazawa, "Calix[5]arene-based receptor for dumb-bell-shaped C₁₂₀," (BCSJ Awarded paper) *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **78**, 768–770 (2005).

Y. Mouri, Y. Fujiwara, T. Aoki, H. Yoshida, K. Naka, Y. Aoki, H. Yonemura, S. Yamada, T. Haino, Y. Fukazawa, Y.; Tanimoto, "High Magnetic Field Effect on Biradical Lifetimes-Evaluation of Magnetic Field Dependence and Chain Length Dependence Using Calculated g and Hyperfine Tensors," *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **78**, 804–813 (2005).

H. Iwamoto, T. Kawatani, Y. Fukazawa, "Shielding effect of thioether C-S bond from proton chemical shifts of 4-thia-5a- and 4-thia-5b-androstane-17-ones," *Tetrahedron*, **61**, 3691–3696 (2005).

○招待・依頼・特別講演

深澤義正, 「Conformational Analysis of Flexible Molecules with Chemical Shift Simulation」, Pusan, September, 2004, (invited lecture)

灰野岳晴, 「カリックス [5] アレーンを基盤とする機能性人工ホスト分子の開発」若手化学者のための化学道場 (2004 年 9 月、高知) (依頼講演)

Takeharu HAINO, "Self-Assembling Molecular Containers for Fullerenes," ACS Southwest Regional Meeting, Texas, September 29–October 2, 2004, (invited lecture)

灰野岳晴, 「カリックスアレーン類を基盤とした新規機能性人工ホスト分子の開発」第 27 回有機合成化学協会中国四国支部奨励賞受賞講演並びに特別講演会 (2004 年 11 月、岡山) (受賞講演)

○国際学会での講演

Masahiro Tanaka, Takeharu Haino, Keiko Ideta, Kanji Kubo, Akira Mori, Yoshimasa Fukazawa, "Solid-phase Synthesis of Liquid Crystalline Isoxazole Library," IUPAC ICOS-15, Nagoya, August 1-6, 2004 (Poster presentation)

Hajime Iwamoto, Yuka Kobayashi, Masataka Suzuki, Takefumi Kawatani, Yoshimasa Fukazawa, "Determination of Absolute Configuration of Secondary Alcohol using a New Chiral Agent and Chemical Shift Simulation Method," IUPAC ICOS-15, Nagoya, August 1-6, 2004 (Poster presentation).

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金基盤研究 (B) (2) 「化学シフト計算法に基づく動的構造論の創製」深澤 義正
科学研究費補助金萌芽研究「コンビナトリアル化学を基盤としたフラーレンレセプターの探索」

灰野 岳晴

科学研究費補助金若手研究 (B) 「ロタキサンの運動性により、平面 π 電子化合物包接能を制御するクレフト分子の創製」岩本 啓

○受賞状況

深澤義正、BCSJ 論文賞「Calix[5]arene-based receptor for dumb-bell-shaped C120」(2005)

灰野岳晴、BCSJ 論文賞「Calix[5]arene-based receptor for dumb-bell-shaped C120」(2005)

灰野岳晴、第 27 回有機合成化学協会中国四国支部奨励賞「カリックスアレーン類を基盤とした新規機能性人工ホスト分子の開発」(2004)

○学界ならびに社会における活動

・学協会役員, 委員

深澤 義正, 日本化学会化学技術賞選考委員 (1999–2000)

深澤 義正, 日本化学会技術進歩賞選考委員 (1999–2000)

深澤 義正, 日本化学会化学技術有功賞選考委員 (1999–2000)

深澤 義正, 日本化学会中国四国支部支部長 (2001)

深澤 義正, シクロファン研究会会長 (2005~)

灰野 岳晴, 生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事 (2004~)

・論文誌編集委員

深澤 義正, 日本化学会欧文誌 (Bull. Chem. Soc. Jpn) 編集委員 (2001-2004)

・学会の組織委員

深澤 義正, 11th International Symposium on Supramolecular Chemistry, Fukuoka (Japan), August 2000
(組織委員)

深澤 義正, 第 14 回シクロファン研究会, 2000 (組織委員)

深澤 義正, 第 15 回シクロファン研究会, 2001 (組織委員)

深澤 義正, 第 16 回シクロファン研究会, 2002 (組織委員)

深澤 義正, 第 17 回シクロファン研究会, 2003 (組織委員)

深澤 義正, 第 18 回シクロファン研究会, 2004 (組織委員)

・座長を行った学会・討論会の名称

深澤 義正, 日本化学会第 85 春季年会, 横浜, 2005 年 3 月

灰野 岳晴, 日本化学会第 85 春季年会, 横浜, 2005 年 3 月

灰野岳晴, 生体機能関連化学部会支部講習会, 岡山, 2004 年 11 月

岩本 啓, 日本化学会第 85 春季年会, 横浜, 2005 年 3 月

1-3-4. 分子反応化学講座 反応物理化学研究グループ

スタッフ 齊藤 昊 (教授), 田林 清彦 (助教授), 高橋 修 (助手)

○ 研究活動の概要

1. 高温熱化学反応の研究

我々は、著しく感度が低くまた高性能で取り扱いが容易である高エネルギー物質 NTO の初期分解過程に対して、クラスター反応が関与していることを量子化学計算によって明らかにしてきた。今年度、衝撃波管を使った熱分解実験で生成したガス成分を GC/MS で分析することにより、クラスター反応より生成すると考えられる nitroso-TO からの分解反応経路の可能性について検討した。

2. 真空紫外光領域における高励起状態と光化学反応の研究

レーザー多光子励起-質量分析法を用いて高励起状態やイオン化状態における気体孤立分子やクラスターの光誘起化学過程を追跡するとともに、励起ポテンシャル上の速度論的、動力学的考察からこれらの微視的反応機構の検討を行った。また、蛍光分散スペクトル測定より励起性解離過程に伴う反応ダイナミックスを、解離生成物の振動・回転状態分布のシミュレーション解析などから解明を試みた。

3. 軟 X 線光領域における分子クラスターの光化学反応

軟 X 線光領域における希ガスクラスターの研究例は数多くあるが、一般の多原子分子クラスターの軟 X 線光励起実験はこれまでほとんど行われていない。我々は、 $(\text{N}_2\text{O})_n$ クラスターの N 原子 K 殻電子励起で生成する二価のクラスターイオンの光解離反応を、主として光電子-光イオン-光イオン同時計測 (PEPIPICO) 法を用いて観測し、その反応機構を解離エネルギーやクラスターサイズの観点から明らかにした。

4. 内殻励起化学反応の反応メカニズムの理論的解明

我々は、内殻励起化学反応機構の理論的研究のため密度汎関数法を用いているが、今回、励起エネルギーの汎関数依存性を詳細に検討した。また内殻励起状態動力学法と我々のオージェスペクトル作成法を組み合わせ、内殻励起動力学を反映したオージェスペクトルを作成する理論的手法を新たに開発した。

5. 弱い水素結合を有する有機化合物の構造と反応

弱い水素結合の 1 つである CH/π 結合は、有機化合物・生体内物質間での分子認識に対して重要視されており、その起源解明が求められている。我々は R-X-Y-Ph ($\text{R}=\text{H}, \text{Me}, \text{Et}, \text{i-Pr}, \text{t-Bu}$; $\text{X}=\text{CO}, \text{CH}_2, \text{CHOH}, \text{NH}, \text{O}, \text{S}, \text{SO}, \text{SO}_2$; $\text{Y}=\text{CH}_2, \text{CHCH}_3$) 形の分子に着目し、これらの構造、およびケトンの還元反応について検討し、鎖状ケトンのジアステレオ面選択反応 (1, 2-不整誘導) に関する Cram 則と分子内 CH/π および CH/O 結合の関連性について議論した。

○ 発表原著論文

- K. Tabayashi, S. Tada, J. Aoyama, K. Saito, H. Yoshida, S. Wada, A. Hiraya, K. Tanaka, "Dissociation Mechanisms and Dynamics of core-excited $(\text{N}_2\text{O})_n$ clusters." *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 179-182 (2005).
- Jun-ichi Aoyama, Kiyohiko Tabayashi and Ko Saito, "Dissociative Excitation of Benzonitrile by Ultraviolet Multiphoton Absorption." *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, **172** (3), 241-249 (2005).
- T. Ibuki, Y. Shimada, S. Nagaoka, A. Fujii, H. Hino, T. Kakiuchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Matsudo, Y. Yamana, I.H. Suzuki, Y. Tamenori. "Total Photoabsorption Cross-Sections of CF_3SF_5 in the C, F, and S K-shell Regions." *Chem. Phys. Lett.* **392** (4-6), 303-308 (2004).
- Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, K. Honma, "Inner-shell Excitation of Ethanol Cluster at O K-edge." *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 235-238 (2005).
- K. Okada, Y. Yamana, T. Ibuki, A. Fujii, S. Nagaoka, K. Tabayashi, Y. Shimada, Y. Morishita, Y. Tamenori, I.H. Suzuki, K. Ohno, "Vibrational Effect on the Fragmentation Dynamics of the C K-shell Excited

- CF₂CH₂.” *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 187-189 (2005).
- Osamu Takahashi, Ko Saito, Yuji Kohno, Hiroko Suezawa, Shinji Ishihara, and Motohiro Nishio, “Origin of the diastereofacial selectivity in the nucleophilic addition to chiral acyclic ketones. An ab initio MO study”, *New J. Chem.* **28**, 355-360 (2004).
- Osamu Takahashi, Ko Saito, Yuji Kohno, Hiroko Suezawa, Shinji Ishihara, and Motohiro Nishio, "The Conformation of Alkyl Benzyl Alcohols Studied by ab initio MO Calculations - A Comparison with IR and NMR Spectroscopic Data", *Euro. J. Org. Chem.* **2004** (11), 2398 - 2403.
- Osamu Takahashi and Lars G. M. Pettersson, "Functional Dependence of Core-Excitation Energies", *J. Chem. Phys.* **121**, 10339-10345 (2004).
- Osamu Takahashi, Ko Saito, Masaaki Mitani, Hiroaki Yoshida, Fumitaka Tahara, Tetsuji Sunami, Keiichiro Waki, Yasunori Senba, Atsunari Hiraya, and Lars G. M. Pettersson, "Studies of the X-ray Absorption Spectra of Some Methylcyano Esters", *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **142** (2), 113-119 (2005).

○ 招待・依頼・特別講演

○ 国際学会での講演

- K. Tabayashi, S. Tada, J. Aoyama, K. Saito, H. Yoshida, S. Wada, A. Hiraya, and K. Tanaka, “Dissociation mechanisms and dynamics of core-excited nitrous oxide clusters by time-of-flight fragment mass spectroscopy.” The 14th international conference on vacuum ultraviolet radiation physics, Cairns (Australia), July 2004. (ポスター発表)
- T. Ibuki, S. Nagaoka, K. Okada, I.H. Suzuki, K. Tabayashi, Y. Tamenori, Y. Shimada, A. Fujii, M. Hino, T. Kakiuchi, T. Matsudo, and Y. Yamana, “Photoabsorption spectra and site-selective fragmentation of C, F, and S K-shell excited CF₃SF₅.” The 14th international conference on vacuum ultraviolet radiation physics, Cairns (Australia), July 2004. (ポスター発表)
- Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, K. Honma, “Inner-shell Excitation of Ethanol Cluster at oxygen K-edge region.” The 14th international conference on vacuum ultraviolet radiation physics, Cairns (Australia), July 2004. (ポスター発表)
- K. Okada, Y. Yamana, T. Ibuki, A. Fujii, S. Nagaoka, K. Tabayashi, Y. Shimada, Y. Morishita, Y. Tamenori, I.H. Suzuki, K. Ohno, “Vibrational Effect on the Fragmentation Dynamics of the C K-shell Excited CF₂CH₂.” The 14th international conference on vacuum ultraviolet radiation physics, Cairns (Australia), July 2004. (ポスター発表)
- S. Tada, C. Harada, S. Yamamoto, H. Yoshida, A. Hiraya, S. Wada, K. Tanaka, and K. Tabayashi, “Production of methyl-oxonium ion and its complexes in the core-excited methyl-formate (MF) clusters.” The 9th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation, Higashi-Hiroshima (Japan), March 2005. (ポスター発表)
- C. Harada, S. Tada, S. Yamamoto, H. Yoshida, A. Hiraya, K. Tanaka, and K. Tabayashi, “Dissociation Mechanisms and Dynamics of N(1s)-excited (CD₃CN)_n clusters.” The 9th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation, Higashi-Hiroshima (Japan), March 2005. (ポスター発表)

○ 研究助成の受け入れ

科学研究費補助金基盤研究（A）研究代表者 田中健一郎（広島大院理）「サイト選択的イオン脱離反応のダイナミックス」分担 高橋 修

○ 他研究機関での講義・客員

○ 学界ならびに社会における活動

- ・ 学協会役員，委員

齊藤 昊，日本化学会中国四国支部副支部長（2003）

田林 清彦，日本化学会中国四国支部幹事，事務局長（2000）

田林 清彦，日本化学会中国四国支部幹事（2001）

- ・ 討論会の組織委員

齊藤 昊，第 16 回化学反応討論会実行委員会委員（2000）

田林 清彦，第 16 回化学反応討論会実行委員会委員（2000）

高橋 修，第 16 回化学反応討論会実行委員会委員（2000）

田林 清彦，第 14 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム実行委員会委員
（2000-2001）

田林 清彦，広島地区化学講演会（日本化学会中国四国支部）（2001）

田林 清彦，2004 分子構造総合討論会準備委員会委員（2002-2004）

- ・ 座長を行った学会・討論会の名称

田林 清彦，2004 分子構造総合討論会，広島，2004 年 9 月

- ・ 社会における活動

反応有機化学研究グループ

スタッフ 山本 陽介（教授），河内 敦（助教授）

○研究活動の概要

我々は、典型元素の化学を中心に、generalityが高く、広範囲に impact のある研究を目指している。

- A. 今年度は、最近、我々によって初めて単離・構造できた hypervalent な電子過剰型の 5 配位炭素化合物，すなわち S_N2 反応における遷移状態を安定化した形の化合物，の研究のうち，アントラセン系と van Koten 系の本論文を，分子研永瀬教授，電気通信大岩崎教授との共同研究として発表することができた。また，これまでの研究経過を有機合成化学協会誌の英文版に account としてまとめた。さらに，中心の炭素およびホウ素と配位原子間の相互作用を強くするために，7 員環を二つベンゼンに縮環した硫黄配位子系などの検討も行っている。
- B. アントラセン配位子を用いたゲルマニウム化合物の研究も速報として報告した。
- C. 新規な典型元素活性種の開発をおこなった。(i) 7-シラノルボルナジエン化合物から対応するシリルリチウム化合物の合成に成功した。このシリルリチウム化合物は求核性を有すると同時に，高歪みなノルボルナジエン骨格に由来した求電子性を発現することが期待できる。現在，その反応性について検討をおこなっている。(ii) ボリルトリフラートを經由した，ボリルテルリドの効率的合成に成功した。今後，ホウ素-テルル結合の反応性を明らかにしていく。
- D. 典型元素複核錯体の合成と性質について研究をおこなった。(i) 新しい高配位ケイ素化合物の合成を目指して，配位子としてイリド炭素に注目している。現在，分子内の配位可能な位置にホスホニウムイリド部位を導入したケイ素化合物の合成を検討している。その過程で，興味深い分子内シリル基移動を観測した。(ii) また最近，ベンゼン環の隣り合った位置にケイ素原子置換基とホウ素原子置換基を導入することに成功した。この化合物はルイス酸としての性質に興味もたれる。
- E. ポーランド科学アカデミーとの超原子価セレン系の共同研究の成果を一部論文として報告した。

○発表原著論文

- M. Miyasato, T. Sagami, M. Minoura, Y. Yamamoto, K.-y. Akiba, "Syntheses and Reactions of Hexavalent Organotellurium Compounds Bearing Five or Six Tellurium-Carbon Bonds," *Chem. Eur. J.*, **10**, 2590-2600 (2004).
- M. Itagaki, K. Hagiya, M. Kamitamari, K. Masumoto, K. Suenobu, Y. Yamamoto, "Highly Efficient Chiral Copper Schiff-base Catalyst for Asymmetric Cyclopropanation of 2,5-Dimethyl-2,4-hexadiene," *Tetrahedron*, **60**, 7835-7843 (2004).
- J. Drabowicz, J. Luczak, M. Mikolajczyk, Y. Yamamoto, S. Matukawa, K.-y. Akiba, "First Optically Active Selenurane Oxide: Resolution of C2-Symmetric 3,3,3'-3'-Tetramethyl-1-1'-Spiro[3H,2,1]-Benzoxaselenole Oxide," *Chirality*, **16**, 598-601 (2004).
- A. Kawachi, Y. Oishi, T. Kataoka, K. Tamao, "Preparation of Sulfur-Substituted Silyllithiums and Their Thermal Degradation to Silylenes," *Organometallics*, **23**, 2949-2955 (2004).
- M. Yamashita, Y. Yamamoto, K.-y. Akiba, D. Hashizume, F. Iwasaki, N. Takagi, S. Nagase, "Syntheses and Structures of Hypervalent Pentacoordinate Carbon and Boron Compounds Bearing an Anthracene Skeleton-Elucidation of Hyperavalent Interaction Based on X-ray Analysis and DFT Calculation," *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 4354-4371 (2005).

- M. Itagaki, K. Masumoto, Y. Yamamoto, "Asymmetric cyclopropanation of 2,5-dimethyl-2,4-hexadiene by copper catalyst bearing new bisoxazoline ligand," *J. Org. Chem.*, **70**, 3292-3295 (2005).
- K.-y. Akiba, Y. Moriyama, M. Mizozoe, H. Inohara, T. Nishii, Y. Yamamoto, M. Minoura, D. Hashizume, F. Iwasaki, N. Takagi, K. Ishimura, S. Nagase, "Synthesis and Characterization of Stable Hypervalent Carbon Compounds (10-C-5) Bearing a 2,6-Bis(p-substituted phenyloxymethyl)benzene Ligand," *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 5893-5901 (2005).
- M. Yamashita, H. Murakami, T. Unrin-in, A. Kawachi, K.-y. Akiba, and Y. Yamamoto, "Synthesis and Structure of a Germylene Bearing a 1,8-Dimethoxyanthracene Ligand," *Chem. Lett.*, **34**, 690-691 (2005).

○総説・著書

- 山本陽介, 「新規ポルフィリンの合成と構造」化学工業, 55(2), 129-132 (2004).
- Y. Yamamoto, K.-y. Akiba, "Synthesis of Hyperavalent Pentavalent Carbon and Boron Compounds," *J. Synth. Org. Chem., Jpn.*, **62**, 1128-1137 (2004).

○招待・依頼・特別講演

- 山本陽介, 「有機超原子価炭素・ホウ素化合物の構造の研究」有機合成化学協会中国四国支部第56回パネル討論会, 東広島, 2004年5月15日(招待講演)
- Y. Yamamoto, "Synthesis and Structure of Oxidized Octaalkyltetraphenylporphyrins", Third International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-3) (Symposium on Main Group Metalloporphyrins, New Orleans, USA, 2004年7月11日～16日(依頼講演)
- A. Kawachi, "New Aspects on Low-valent and Hypervalent Silicon Compounds: Key Roles of Heteroatom Functional Groups", The VII International Symposium "Advances in Heteroatom Chemistry", Center of Molecular and Macromolecular Studies, Polish Academy of Science in Lodz, 2004. Nov. 25, Lodz, Poland (Invited).
- A. Kawachi, "New Aspects on Low-valent and Hypervalent Silicon Compounds: Key Roles of Heteroatom Functional Groups", The IV International Symposium "Selected Problems of Chemistry of Acyclic and Cyclic Heteroorganic Compounds", Institute of Chemistry and Environmental Protection, Jan Dlugosz, University of Czestochowa, 2004. Nov. 26, Czestochowa, Poland (Invited).

○国際会議での講演

- Y. Yamamoto, T. Masui, D. Saito, K.-y. Akiba, "Synthesis of a New Tridentate Ligand Bearing Two Coordinating Sulfur Atoms: Application for Synthesis of Hypervalent Carbon and Boron Compounds", 21st International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS XXI), Madrid, Spain, OB-11. 2004年7月4日～9日(口頭発表)
- W. Nakanishi, S. Hayashi, T. Furuta, N. Itoh, Y. Nishina, M. Yamashita, Y. Yamamoto, "Extended Hypervalent 5c-6e Interactions: Linear Alignment of Five C-Z—O—Z-C (Z=S, Se) Atoms in Anthraquinone and Anthracene Systems", 21st International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS XXI), Madrid, Spain, OB-12. 2004年7月4日～9日(口頭発表)
- Y. Yamamoto, T. Masui, D. Saito, K.-y. Akiba, "Synthesis of Hypervalent Carbon Compounds from a Novel Tridentate Ligand Precursor Bearing Two Coordinating Sulfur Atoms", IUPAC 15th International Conference on the Organic Synthesis (ICOS-15), Nagoya, Japan, 5-D-23. 2004年8月1日～6日(ポスター発表)
- A. Kawachi, H. Yakushijin, Y. Yamamoto, "Synthesis and Structures of Novel Boryl Tellurides", The 12th Japan-Korea Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry, Sendai, Japan. 2004年8月3日～5日(ポスター発表)
- Y. Yamamoto, T. Yamaguchi, K.-y. Akiba, "Attempted Synthesis of Hypervalent

Hexacoordinate Carbon Compounds”, The 7th IUPAC International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-7), Shanghai, China, O27. 2004年8月20日～25日(口頭発表)

X. Jiang, K.-i. Kakuda, K. Sena, K.-y. Akiba, Y. Yamamoto, “Synthesis of Pentacoordinate Spirophosphoranes Bearing a New Modified Martin Ligand”, The 7th IUPAC International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-7), Shanghai, China, P16. 2004年8月20日～25日(ポスター発表)

T. Yamaguchi, Y. Yamamoto, Y. Fujiwara, Y. Tanimoto, “Construction of a Novel Tridentate Ligand Derived from Thioxanthone Toward Synthesis of a Transition State Model of a Vinylic SN2 Reaction”, The 7th IUPAC International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-7), Shanghai, China, P17. 2004年8月20日～25日(ポスター発表)

H. Yamamichi, S. Matsukawa, K.-y. Akiba, Y. Yamamoto, “Synthesis and Structures of Pentacoordinate Phosphoranes Bearing a Novel Tridentate Ligand”, The 7th IUPAC International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-7), Shanghai, China, P18. 2004年8月20日～25日(ポスター発表)

○ 他研究機関での講義

山本陽介, 筑波大学数理物質科学研究科, 非常勤講師, 2004年6月1日-2005年3月31日

山本陽介, 三重大学工学部, 非常勤講師, 2004年7月27日

山本陽介, 鳥取大学工学部, 非常勤講師, 2005年1月12日-2005年1月13日

○ 共同プロジェクトへの参加

山本陽介, 日本学術振興会・二国間研究者交流事業, ポーランド科学アカデミー (Prof. J. Drabowicz), 日本側受け入れ代表者 (2005.1-2005.3)

○ 研究助成の受け入れ

科学研究費補助金特定領域研究「動的錯体」研究代表者 巽 和行 (名大院理), ”時空間制御” 班 吉良満夫 (東北大院理)

計画研究”炭素および高周期元素反応活性錯体の時空間制御” 山本陽介

科学研究費補助金萌芽研究「反芳香族性ポルフィリン酸化体の合成と性質」代表 山本陽介

科学研究費補助金若手研究(A)「剛直な分子骨格の特性を活かした典型元素化合物の構築と機能発現」代表 河内 敦

○ 学界ならびに社会における活動

- ・学協会役員・委員

山本陽介, IUPAC Commission II-2, National Representative (2002-)

山本陽介, 日本化学会中国四国支部幹事 (2004.3.1-2005.2.28)

- ・論文誌編集委員

山本陽介, Bulletin of the Chemical Society of Japan, 編集委員 (2002-)

- ・学会組織委員

山本陽介, IUPAC 15th International Conference on the Organic Synthesis (ICOS-15), 組織委員 2004年8月1日～6日 (名古屋)

- ・座長を行った学会・討論会の名称

山本陽介, Third International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-3) (Symposium on Main Group Metalloporphyrins, New Orleans, USA, 2004年7月11日～16日

山本陽介, 第17回基礎有機化学連合討論会, 2004年9月23日～25日 (仙台)

山本陽介，第 31 回ヘテロ原子化学討論会，2004 年 12 月 8 日～10 日（和歌山）

山本陽介，第 85 回日本化学会春季年会，2005 年 3 月 26 日～29 日（横浜）

河内 敦，第 85 回日本化学会春季年会，2005 年 3 月 26 日～29 日（横浜）

○その他

山本陽介，広島大学環境保全委員会委員長（2002. 4-2003. 3）

山本陽介，広島大学安全衛生管理対応準備ワーキング，実態調査サブワーキング長（2003. 4-2004. 3）

山本陽介，広島大学作業環境測定専門委員会委員長（2004. 4-）

山本陽介，広島大学薬品管理システム専門委員会委員（2004. 4-）

山本陽介，理学研究科研究科長補佐（労働安全衛生担当）（2004. 4-2005. 3）

山本陽介，広島大学国際交流委員会短期留学プログラム実施部会委員（2001. 7-）

山本陽介，広島大学附属高等学校 SSH 事業（2004. 8. 9-8. 10）

元学生が受けた賞

山下 誠（現東京大学大学院・工学系研究科・助手） 財団法人井上科学振興財団 第 21 回（平成 16 年度）井上研究奨励賞 “超原子価 5 配位炭素およびホウ素化合物の合成と構造”（平成 13 年度広島大学博士論文）

天然物有機化学研究グループ

スタッフ 大方 勝男（教授）、小島 聡志（助教授）、平賀 良知（助手）、高木 隆吉（助手）

○研究活動の概要

研究内容としては、有機合成、有機反応機構、天然物の全合成、酵素反応、海洋天然物などに関する研究を行っている。

有機合成に関する研究として、シクロプロパンやエポキシドなどの小員環化合物の合成的研究において、高立体選択的反応を見出し、それらの不斉誘導機構を有機反応機構的に解明した。特に、ピリジニウムイリドを用いた不斉反応は新規である。Peterson反応による α,β -不飽和アミドやWeinrebアミドを利用した α,β -不飽和シアニドのZ-選択的な生成反応を開発し、その反応機構についての知見を得た。さらにこの反応を用いて α,β -不飽和ケトンのZ-選択的な生成反応に拡張した。現在、 C_2 対称をもつピペリジン誘導体を合成し、その有機不斉触媒としての可能性を研究している。

生理活性天然物の合成的研究として、生理活性的にも構造的な観点からも注目されている天然物Scyphostatin, Phomoidride B (CP-263,114), Daphniphyllumアルカロイド類などの天然物の全合成を推進している。Scyphostatinに関してはほぼ全合成を達成した。また、Michael反応の介在したタンデム反応および閉環的メタセシスとDiels-Alder反応を組み合わせたドミノ型反応を鍵反応とした合成研究を行っている。

Scyphostatinの全合成研究において、高立体選択的なスピロ交差共役エノンの環状付加反応を見出した。本反応の有機反応機構的研究をLeo A. Paquette教授（The Ohio State University, U.S.A.）と共同研究を行った。

Carboxypeptidase Yの酵素反応における基質特異性について有機反応機構的側面から研究し、反応性に及ぼす媒質の粘度の影響について自由体積モデルを適用して説明した。また、酵母から単離された新規な酵素を用いた立体選択的合成についても研究している。

環境問題に関連して、牡蠣などの二枚貝に対して特異的な毒性を示す赤潮プランクトン中の生理活性物質の探索と構造解析や赤潮防御法などの地域社会の特徴を活かした研究を行なっている。最近、赤潮プランクトンから牡蠣に対する2種の致死活性物質を単離精製した。現在、これらの構造解析を行っている。

学生の国際性を養成するために、委託学生としてS. Niwayama教授の研究室（Texas Tech University, U.S.A）に二人の学生を派遣した。

学外への技術支援として、広島県産業科学技術研究所の核磁気共鳴スペクトル装置の保守や測定および分析の相談を行い、学外の研究者に協力している。

○発表原著論文

- K. Okada, M. Tanaka and K. Ohkata, "Computational study on conformational features of protonated 5*H*,7*H*-dibenzo[*b,g*][1,5]dithiocin oxides by *ab initio* MO," *Heterocycles*, **62**, 235–250 (2004).
- S. Begum, Md. M. Rahman, R. Takagi and K. Ohkata, "Facial selectivity in nucleophilic epoxidation of 2-aryl-2-phosphonoacrylates induced by the (–)-8-phenylmenthyl moiety as a chiral auxiliary," *Heterocycles*, **62**, 251–262 (2004).
- R. Takagi, S. Tsuyumine, H. Nishitani, W. Miyanaga and K. Ohkata, "Stereoselective synthesis of the hydrophobic side chain moiety of scyphostatin," *Aust. J. Chem.*, **57**, 439–447 (2004).
- S. Kojima, K. Hiroike and K. Ohkata, "Stereoselective synthesis of activated cyclopropanes with an α -pyridinium acetamide bearing an 8-phenylmenthyl group as the chiral auxiliary," *Tetrahedron Lett.*, **45**, 3565–3568 (2004).
- Y. Hiraga and S. Niwayama, "¹H and ¹³C NMR spectroscopic studies of half-esters from monohydrolysis of

- dialkyl bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2,3-dicarboxylates,” *Spectroscopy*, **18**, 469–483 (2004).
- Y. Kanosue, S. Kojima, Y. Hiraga and K. Ohkata, “Relationship between hydrophobicity of dipeptides and Michaelis-Menten constant K_m of their enzymatic hydrolysis,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **77**, 1187–1193 (2004).
- Y. Kanosue, S. Kojima and K. Ohkata, “Influence of solvent viscosity on the rate of hydrolysis of dipeptides by carboxypeptidase Y,” *J. Phys. Org. Chem.*, **17**, 448–457 (2004).
- R. Takagi, T. Nerio, Y. Miwa, S. Matsumura and K. Ohkata, “Construction of the bicyclo[3.3.1]nonenone core by successive Michael reactions of 2-cyclohexenone derivatives,” *Tetrahedron Lett.*, **45**, 7401–7405 (2004).
- K. Ohkata, Y. Tamura, B. B. Shetuni, R. Takagi, W. Miyanaga, S. Kojima and L. A. Paquette, “Stereoselectivity control by oxaspiro rings during Diels-Alder cycloadditions to cross-conjugated cyclohexadienones. The *syn* oxygen phenomenon,” *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 16783–16792 (2004).
- R. Takagi, S. Begum, A. Shiraki, A. Yoneshige, K. Koyama and K. Ohkata, “Influence of polymerization degree of poly-L-leucine catalyst and substituent effect on the Juliá-Colonna asymmetric epoxidation of benzalacetophenones catalyzed by poly-L-leucine,” *Heterocycles*, **64**, 129–141 (2004).
- W. Miyanaga, R. Takagi and K. Ohkata, “Synthetic study of an analogue of the hydrophilic moiety of scyphostatin via π -facial selective Diels-Alder reaction,” *Heterocycles*, **64**, 75–91 (2004).
- S. Kojima, T. Hidaka and Y. Ohba, “Synthesis of β -monosubstituted α,β -unsaturated amides with *Z*-selectivity using diphenylphosphonoacetamides,” *Heteroatom Chemistry*, **15**, 515–523 (2004).
- S. Kojima, T. Fukuzaki, A. Yamakawa and Y. Murai, “Highly *Z*-selective synthesis of β -monosubstituted α,β -unsaturated cyanides using the Peterson reaction,” *Org. Lett.*, **6**, 3917–3920 (2004).
- S. Kojima, T. Hidaka and A. Yamakawa, “Application of organocerium reagents for the efficient conversion of *Z*- α,β -unsaturated Weinreb amides to *Z*- α,β -unsaturated ketones,” *Chem. Lett.*, **34**, 470–471 (2005).
- R. Takagi, K. Tojo, M. Iwata and K. Ohkata, “Synthesis of a 4,5-epoxy-2-cyclohexen-1-one derivative via epoxide ring opening, 1,3-carbonyl transposition and epoxide ring regeneration: a synthetic study on a scyphostatin analogue,” *Org. Biomol. Chem.*, **3**, 2031–2036 (2005).

○研究助成の受け入れ

- 科学研究費補助金基盤研究(C)「ケイ素の特性を活かした選択的オレフィン合成反応の開発と応用」代表 小島 聡志 (2004 年度～2005 年度)
- 科学研究費補助金基盤研究(B)「瀬戸内海の新種赤潮プランクトンによる二枚貝致死の原因物質と活性発現機構」代表 平賀 良知 (2002 年度～2004 年度)
- 大塚製薬(株) 学術研究助成金「生理活性化合物の有機合成の研究」代表 大方 勝男

○学界ならびに社会における活動

- ・学協会役員, 委員
- 大方 勝男, 日本化学会代議員 (1999–2000)
- 大方 勝男, 日本化学会役員等選考委員 (2000)
- 大方 勝男, 日本化学会中国四国支部幹事 (2002–2004)
- 大方 勝男, 有機合成化学協会中国四国支部幹事 (1999–2005)
- 大方 勝男, 有機合成化学協会評議員 (2001–2004)
- 小島 聡志, 有機合成化学協会中国四国支部幹事 事務局局員 (2003–2005)

・座長を行った学会・討論会の名称

- 小島 聡志, 第 84 回日本化学会春季年会, 西宮, 2004 年 3 月
- 大方 勝男, 第 17 回基礎有機化学連合討論会, 仙台, 2004 年 9 月

高木 隆吉, 第 85 回日本化学会春季年会, 神奈川, 2005 年 3 月

平賀 良知, 第 85 回日本化学会春季年会, 神奈川, 2005 年 3 月

○その他

大方 勝男, 広島県立賀茂高等学校, “KAMO Academic Week”「総合的な学習の時間」“自然界の有機化合物「にょいの成分をたる」”「講義」 (2004. 7)

大方 勝男, 広島県立安古市高等学校, 「身の周りの有機化合物と有機化学」「講義」 (2004. 12)

平賀 良知, 広島県産業科学技術研究所, 研究協力員 (1998. 4－2005. 3)

集積化学研究グループ

スタッフ 大野 啓一 (教授), 岡田 和正 (助教授), 勝本 之晶 (助手)

○研究活動の概要

集積化学研究グループとしての研究のターゲットは、分子あるいは官能基の集積とそれによる新規な環境の出現や新たな反応性の発現などの集積効果である。2004 年度において得られた研究成果は次のとおりである。

①振動分光法と理論計算法による分子内・分子間相互作用の解明

分子内・分子間相互作用を明らかにすることは分子集積とその性質を解明するうえで重要である。特に水素結合は生体系で特徴ある役割を担っている。そこで、水、アルコール類の水素結合の様式と水素結合した OH 伸縮振動の波数値との関係を赤外分光法で調べた。今回、希薄四塩化炭素中でエーテル酸素にごく微量の水が結合する構造と OH 伸縮振動波数値の関係を明らかにした。また、エーテル酸素と OH 基を共に含む化合物では、液体状態でエーテル酸素と OH 基が水素結合したバンドと、OH 基同士の水素結合ネットワークを形成したバンドが分離して観測できた。これらのバンドを利用して液体から固体への相変化では、固体へ移行すると全ての OH 基は水素結合ネットワークを形成することが分かった。

②結合距離と力の定数についての理論的計算による解析

これまでに第 3 周期の元素を含む炭素—リン 2 重, 3 重結合の力の定数を実験と理論計算より明らかにしてきた。今回、第 2, 第 3 周期の元素を含む多重結合について系統的な理論計算を行い、結合距離と力の定数の関係式 ($f = 2.8R^{-3}$) を求めることが出来た。ここで、 R は換算結合半径で、 $R = r - d$ の関係にあり r は結合距離、係数 d は各周期で異なる値をとる。この式は、全ての元素に適応できる一般式であることが分かった。

③マトリックス単離赤外分光法による *p*-トルイジンの光化学反応の追跡

生体系で重要な官能基であるアミノ基の光による損傷を調べるために、アルゴンで希釈した *p*-トルイジンを 12K に冷却した CsI 板に吹き付け、UV 照射する実験を行った。UV 照射で *p*-トルイジンは 4-メチルアニリノラジカルを生成した。このラジカルは再結合して元の *p*-トルイジンまたは 4-メチル-2, 4-シクロヘキサジエン-1-イミンを生成した。これより、アミン—イミンの互変異性が UV 照射で生じることを明らかにした。

④内殻励起を用いた分子の解離とエネルギー移動の実験的研究

内殻電子の局在性により、軟 X 線領域の光で分子内の特定の原子を励起できる。これまでの研究で、我々は内殻励起分子において励起原子周りでの電子緩和・結合切断と分子全体へのエネルギー緩和が競合して起こっていることを明らかにしてきた。本年度は、メチルチオシアネートの内殻励起により生成する解離イオンの運動エネルギー分布を調べ、励起分子の解離ダイナミクスを考察した。 $\text{CH}_3^+ + \text{SCN}^+$ への解離に対して impulsive モデルを適用すると、 CH_3^+ の運動エネルギー分布の高エネルギー成分は $\text{CH}_3^+ + \text{SCN}^+$ への解離で生じたメチル断片によるものであることが分かった。これはこれまでの我々の解釈を支持する結果である。

⑤Kr 2p のイオン化状態からの多価イオン生成過程の研究

従来の分光器がカバーする範囲の谷間に位置していた 1700 eV 付近の光が、近年 SPring-8 の BL27SU で得られるようになり、この領域にしきい値をもつ Kr 2p 電子の励起が可能となった。本年度は、Kr 2p_{3/2} 光イオン化の後に放出される Auger 電子と生成した多価イオンとのコインシデンス測定により、特定の Auger 終状態から生じたイオンの価数分布を観測した。Auger 終状態によって生ずるイオンの価数が明確に異なった。実験結果と多価イオンのエネルギー準位図に基づいて、多価イオン化経路を明らかにすることができた。

⑥振動分光法と密度汎関数法を用いた Poly(*N*-isopropylacrylamide)(PNiPA)水溶液の Coil-Globule 転移過程の研究

PNiPA は水溶液中室温付近でコイル・グロビュール転移を起こす代表的な感熱応答性高分子であるが、その転移挙動は正則溶液論を高分子溶液系に発展させた Flory-Huggins 理論から著しく逸脱し、分子間相互作用の詳細な研究が必要であると考えられる。我々は、コイル・グロビュール転移過程において赤外スペクトルを測定し、密度汎関数法を用いたシミュレーションと実測スペクトルの比較から隣接側鎖間における CO $\cdots$ NH 結合の存在、その転移過程における変化、また、主鎖局所構造のシス・トランス変化を示唆した。隣接側鎖間における CO $\cdots$ NH 結合の存在は重水素交換過程を用いて実験的に証明した。

⑦低分子化合物の溶媒和と振動スペクトルにおけるバンド変化の関連性について

近年、低分子化合物の溶解性においては相互作用点モデルなど分子構造をより忠実に反映したモデルを用いた研究が盛んになってきているのに対し、高分子の溶媒への溶解性は未だに格子理論の相互作用パラメータや McMillan-Mayer 理論に現れるクラスタ積分で定性的に表されているにすぎない。しかし、実際の系においては、高分子の溶解性が溶媒の持つ分子構造・化学的性質に大きく影響されるだろうと推測される。そこで、Poly(*N*-dimethylacrylamide)とそのモノマーモデルである *N*-dimethylacetamide の溶媒和挙動を振動分光を用いて詳細に調べ、その物理化学的背景に一つのモデルを提案した。

○発表原著論文

- I. Kanesaka, S. Matsuzawa, T. Ishioka, Y. Kitagawa, and K. Ohno, "Crystal structure of 1,10-dibromodecane and its infrared intensity in a urea clathrate and in the crystal," *Spectrochim. Acta A*, **60**(11), 2621–2626 (2004).
- E. Kurita, H. Matsuura, and K. Ohno, "Relationship between force constants and bond lengths for CX (X = C, Si, Ge, N, P, As, O, S, Se, F, Cl and Br) single and multiple bonds: Formulation of Badger's rule for universal use," *Spectrochim. Acta A*, **60**(13), 3013–3023 (2004).
- K. Ohno, H. Takao, T. Masuda, and Y. Katsumoto, "Two characteristic H-bonded O–H stretching bands for the compounds containing ether oxygen and hydroxyl oxygen," *Chem. Lett.*, **34**(2), 250–251 (2005).
- Md. R. Matin, S. A. Wahab, Y. Katsumoto, H. Matsuura, and K. Ohno, "Thermal stability of the hydration structure of short-chain poly(oxyethylene) in carbon tetrachloride: An infrared spectroscopic observation of the breakdown of hydrogen bonds," *Chem. Lett.*, **34**(4), 502–503 (2005).
- N. Akai, H. Yoshida, K. Ohno, and M. Aida, "Photochemistry of *p*-toluidine in a low-temperature argon matrix: Infrared spectrum and geometrical structure of semiquinone-type 4-methylanilino radical," *Chem. Phys. Lett.*, **403**(4-6), 390–395 (2005).
- Y. Tamenori, K. Okada, S. Tanimoto, T. Ibuki, S. Nagaoka, A. Fujii, Y. Haga, and I. H. Suzuki, "Branching ratios of multiple-charged ions formed through photoionization of Kr 3d, 3p and 3s sub-shells using a coincidence technique," *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **37**(1), 117–129 (2004).
- A. De Fanis, N. Saito, M. Machida, K. Okada, H. Chiba, A. Cassimi, R. Dörner, I. Koyano, and K. Ueda, "Asymmetric nuclear motion of the F 1s-ionized state in BF₃ probed by quadruple-ion-coincidence momentum imaging," *Phys. Rev. A*, **69**(2), 022506 (4 pages) (2004).
- M. Machida, M. Lavollée, J. Randrianjafisoa, G. Laurent, M. Nagoshi, K. Okada, I. Koyano, and N. Saito, "Probe of bending motion following the 1s⁻¹π* excitation of N₂O," *J. Chem. Phys.*, **120**(8), 3635–3641 (2004).
- I. H. Suzuki, A. Fujii, S. Nagaoka, M. Kosugi, K. Okada, T. Ibuki, S. Samori, Y. Tamenori, and H. Ohashi, "Asymmetric peaks of photoelectrons and Auger electrons formed through the post-collision interaction following Kr 2p_{3/2} hole creation," *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **37**(7), 1433–1441 (2004).
- A. De Fanis, N. Saito, K. Okada, M. Machida, I. Koyano, A. Cassimi, R. Dörner, A. A. Pavlychev, and K. Ueda, "Satellite excitations due to internal inelastic scattering in the K-shell photoemission from CO₂," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **137-140**, 265–269 (2004).
- T. Ibuki, Y. Shimada, S. Nagaoka, A. Fujii, M. Hino, T. Kakiuchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Matsudo, Y.

- Yamana, I. H. Suzuki, and Y. Tamenori, "Total photoabsorption cross-sections of CF₃SF₅ in the C, F and S K-shell regions," *Chem. Phys. Lett.*, **392**(4-6), 303–308 (2004).
- K. Okada, S. Tanimoto, T. Ibuki, Y. Haga, T. Gejo, K. Saito, and K. Ohno, "Angle-resolved, mass-selected ion spectroscopy of carbon K-shell excited CF₃CCH," *Chem. Phys.*, **304**(3), 273–279 (2004).
- N. Saito, Y. Muramatsu, H. Chiba, K. Ueda, K. Kubozuka, I. Koyano, K. Okada, O. Jagutzki, A. Czasch, Th. Weber, M. Hattabaß, H. Schmidt-Böcking, R. Moshhammer, M. Lavollée, and U. Becker, "Deformation, nuclear motion and fragmentation of core-excited CO₂ probed by multiple-ion coincidence momentum imaging," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **141**(2,3), 183–193 (2004).
- M. N. Piancastelli, V. Carravetta, I. Hjelte, A. De Fanis, K. Okada, N. Saito, M. Kitajima, H. Tanaka, and K. Ueda, "Experimental and theoretical study of resonant Auger decay of core-excited NO₂," *Chem. Phys. Lett.*, **399**(4-6), 426–432 (2004).
- K. Okada, M. Kosugi, A. Fujii, S. Nagaoka, T. Ibuki, S. Samori, Y. Tamenori, H. Ohashi, I. H. Suzuki, and K. Ohno, "Variation in resonant Auger yields into the ¹G₄*nl* states of Kr across the L₃ threshold," *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **38**(4), 421–431 (2005).
- T. Ibuki, K. Okada, M. Takahashi, S. Samori, T. Goya, Y. Senba, H. Yoshida, A. Hiraya, and K. Ohno, "Energy relaxation through the π^* -state in C, F and O K-shell excited CF₃COCH₃," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **143**(1), 21–27 (2005).
- K. Okada, Y. Yamana, T. Ibuki, A. Fujii, S. Nagaoka, K. Tabayashi, Y. Shimada, Y. Morishita, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, and K. Ohno, "Vibrational effect on the fragmentation dynamics of the C K-shell excited CF₂CH₂," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **144-147**, 187–189 (2005).
- M. Kitajima, A. De Fanis, K. Okada, H. Yoshida, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ueda, "High-resolution resonant Auger spectroscopy of CF₄, SiF₄, and SF₆," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **144-147**, 199–202 (2005).
- Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, and K. Honma, "Inner-shell excitation of ethanol cluster at O K-edge," *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **144-147**, 235–238 (2005).
- T. Ibuki, Y. Shimada, R. Hashimoto, S. Nagaoka, M. Hino, K. Okada, I. H. Suzuki, Y. Morishita, and Y. Tamenori, "Photofragmentation of C, F and S K-shell excited CF₃SF₅ studied by PEPICO and PIPICO spectroscopy," *Chem. Phys.*, **314**(1-3), 119–126 (2005).
- Y. Katsumoto, T. Tanaka, and Y. Ozaki, "Relationship between the coil-globule transition of an aqueous poly(*N*-isopropylacrylamide) solution and structural changes in local conformations of the polymer," *Macromol. Symp.*, **205**, 209 (2004).
- A. Padermshoke, H. Sato, Y. Katsumoto, S. Ekgasit, I. Noda, Y. Ozaki, "Thermally induced phase transition of poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyhexanoate) investigated by two-dimensional infrared correlation spectroscopy," *Vib. Spectrosc.* **36** (2004) 241-249.
- A. Padermshoke, H. Sato, Y. Katsumoto, S. Ekgasit, I. Noda, and Y. Ozaki, "Crystallization behavior of poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyhexanoate) studied by 2D IR correlation spectroscopy", *Polymer* **45** (2004) 7159–7165.
- A. Padermshoke, H. Sato, Y. Katsumoto, S. Ekgasit, I. Noda, and Y. Ozaki, "Surface melting and crystallization behavior of polyhydroxyalkanoates studied by attenuated total reflection infrared spectroscopy", *Polymer* **45** (2004) 6547–6554.
- A. Padermshoke, Y. Katsumoto, H. Sato, S. Ekgasit, I. Noda, and Y. Ozaki, "Melting behavior of poly(3-hydroxybutyrate) investigated by two-dimensional infrared correlation spectroscopy." *Spectrochim. Acta A*. **61** (2005) 541-550.

○総説・著書

- T. Ibuki and K. Okada, "Mass-selected ion spectroscopy of K-shell excited polyatomic molecules: Fragmentation competing with intramolecular energy relaxation," *Recent Res. Devel. Chem. Phys.*,

5(Part I), 77–97 (2004).

Y. Ozaki, Y. Katsumoto, J-H. Jiang, and Y. Liang, "Spectral analysis in the NIR region" in *Useful and Advanced Information in the Field of Near Infrared Spectroscopy*, (Ed. S.Tsuchikawa) (2004) 1–16.

○招待・依頼・特別講演

なし

○国際学会での講演

K. Okada, Y. Yamana, T. Ibuki, A. Fujii, S. Nagaoka, K. Tabayashi, Y. Shimada, Y. Morishita, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, and K. Ohno, "Vibrational effect on the fragmentation dynamics of the C K-shell excited CF_2CH_2 ," 14th Int. Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIV), Cairns (Australia), July, 2004. (ポスター発表)

M. Kitajima, A. De Fanis, K. Okada, H. Yoshida, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ueda, "High-resolution resonant Auger spectroscopy of CF_4 , SiF_4 , and SF_6 ," 14th Int. Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIV), Cairns (Australia), July, 2004. (ポスター発表)

T. Ibuki, K. Okada, M. Takahashi, S. Samori, T. Goya, Y. Senba, H. Yoshida, and A. Hiraya, "Intramolecular energy flow through π^* orbital in C, F and O K-shell excited CF_3COCH_3 ," 14th Int. Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIV), Cairns (Australia), July, 2004. (ポスター発表)

T. Ibuki, S. Nagaoka, K. Okada, I. H. Suzuki, K. Tabayashi, Y. Tamenori, Y. Shimada, A. Fujii, M. Hino, T. Kakiuchi, T. Matsudo, and Y. Yamana, "Photoabsorption spectra and site-selective fragmentation of C, F and S K-shell excited CF_3SF_5 ," 14th Int. Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIV), Cairns (Australia), July, 2004. (ポスター発表)

Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, and K. Honma, "Inner-shell excitation of ethanol cluster at oxygen K-edge," 14th Int. Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (VUV-XIV), Cairns (Australia), July, 2004. (ポスター発表)

○共同プロジェクトへの参加状況

岡田 和正, 日本学術振興会・未来開拓学術研究推進事業 研究分担者 (1998–2003)

○他研究機関での講義・客員

なし

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金特定研究(2)「極低温マトリックス単離赤外分光法による酸化チタン光触媒反応の追跡」(代表: 大野啓一)

広島大学後援会研究助成金・サタケ教育研究助成「放射光分子メスによる分子の分解操作の研究」(代表: 岡田和正)

矢崎科学技術振興記念財団奨励研究助成(H15)「新規インテリジェント材料の開発をめざしたアクリルアミド系高分子の刺激応答性発現機構の解明」(代表: 勝本之晶)

○学界ならびに社会における活動

・学協会役員, 委員

大野 啓一, 日本化学会中国四国支部事務局長 (1995)

大野 啓一, 日本化学会中国四国支部幹事 (1996, 2000)

大野 啓一, 日本化学会代議員 (2001.11.1–2003.10.31)

- ・論文誌編集委員

岡田 和正, 日本分光学会「分光研究」編集委員(2003・2004年度)

- ・討論会の組織委員

大野 啓一, 分子構造総合討論会運営委員(2002-2005)

大野 啓一, 2004 分子構造総合討論会実行委員長(2004)

岡田 和正, 2004 分子構造総合討論会実行委員会事務局(2003-2004)

勝本 之晶, 2004 分子構造総合討論会実行委員

- ・その他の委員

大野 啓一, 広島県立海田高等学校学校評議員(2001-)

- ・座長を行った学会・討論会の名称

岡田 和正, 分子構造総合討論会 2004, 広島, 2004 年 9 月

岡田 和正, 第 1 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, 東広島, 2004 年 11 月

岡田 和正, 内殻励起ダイナミクスの最前線, 西播磨, 2005 年 3 月

- ・講演会・講習会(学会以外の一般向けのもの)の講師

岡田 和正, 数理科学夏季セミナー講師(2004 年 8 月)

○その他

岡田 和正, 広島県立西条農業高等学校, サイエンス・パートナーシップ・プログラム(SPP)事業「研究者招へい講座」(2004 年 11 月)

国費外国人留学生 Md. Ruhul Matin (バングラデシュ)(2004 年 4 月-)

量子化学研究グループ

スタッフ 相田 美砂子 (教授), 石橋 孝章 (助教授)

○研究活動の概要

量子化学研究グループの研究の目的は、生命系や凝集系また界面における、分子の構造や反応の特異性や分子挙動の特徴を、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明らかにすることである。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・反応性予測をめざしている。

①核酸塩基とアミノ酸側鎖間の特異的な相互作用の解明

遺伝子発現の時間的空間的制御は複雑な生命現象において重要な役割を果たしている。そこで、冗長性や柔軟性を備えた正確な制御の仕組みを、相互作用の自由エネルギーを計算することによって明らかにしている。本年度は、AT, GC 塩基対の3つスタックしているものと各種アミノ酸側鎖との間の相互作用自由エネルギー変化の塩基対依存性について検討した。

②quasi-classical direct ab initio MD 法からの振動スペクトル

ab initio MD 法の結果得られる振動数から、どのようにして正確な非調和項を得ることができるのかを明らかにすることを目的としている。MD から得られるトラジェクトリーを解析することによって基準振動解析からは得られない描像を得ることができることを示す。

③水クラスターの化学ポテンシャル

モンテカルロ法によって得られた水分子クラスターの NVT アンサンブルに対して、水素結合行列の定義を適用し水クラスターの構造を部分集合に分類するための手法を提案した。それを利用することによって、それぞれの分類された構造における水クラスターの化学ポテンシャルを得ることができた。

④赤外可視表面和周波発生分光装置の設置と拡張

石橋が (財) 神奈川科学技術アカデミーから広島大学に異動したこととともない、広島大学理学部 A 棟実験室を整備 (電源工事, 冷却水工事など) した後にマルチプレックス和周波分光システムを再構築した。再構築後、電子共鳴効果による和周波信号強度の増大を広い範囲の薄膜試料へ適用可能とするため、プローブ波長の波長可変範囲のより短波長領域への拡張作業を行った。その結果、非線形光学効果を利用し狭帯域可視プローブの可変域を紫外領域まで拡張した。200 および 217–400 nm の範囲において連続波長可変でパルスエネルギーが数 μJ 以上の出力を新たに得ることができた。拡張した光源とプローブ光カット用のバンドパスフィルターを用いて、標準試料である GaAs を用いて、紫外光 (270 nm) と赤外光 (3400 nm) の和周波信号を得た。

○ 発表原著論文

- M. Aida and M. Dupuis, "Fundamental absorption frequency from quasi-classical direct ab initio molecular dynamics: Diatomic Molecule," *Chemical Physics Letters*, **401**, 170–174 (2005).
- N. Akai, H. Yoshida, K. Ohno and M. Aida, "Photochemistry of p-toluidine in a low-temperature argon matrix: infrared spectrum and geometrical structure of 4-methylanilino radical," *Chemical Physics Letters*, **403**, 390–395 (2005).
- M. Tanaka and M. Aida, "An Ab Initio MO Study on Orbital Interaction and Charge Distribution in Alkali Metal Aqueous Solution: Li^+ , Na^+ and K^+ ," *Journal of Solution Chemistry*, **33** (6–7), 887–901 (2004).
- S. Fujiyoshi, T. Ishibashi and H. Onishi, "Fifth-Order Raman spectroscopy of Excited-State Molecules," *Journal of Physical Chemistry A*, **108**, 11165–11171 (2004).
- K. Iwata, T. Takaya, H. Hamaguchi, A. Yamakata, T. Ishibashi and H. Onishi, "Carrier dynamics in TiO_2 and Pt/TiO_2 powders observed by femtosecond time-resolved near-infrared spectroscopy at spectral region of 0.9 to 1.5 μm with direct absorption method," *Journal of Physical Chemistry B*, **108**, 20233–20239 (2004).
- T. Ishibashi, H. Uetsuka and H. Onishi, "An ordered retinoate monolayer prepared on TiO_2 (110)," *Journal of Physical Chemistry B*, **108**, 17166–17170 (2004).

- S. Fujiyoshi, T. Ishibashi and H. Onishi, "Interface-Specific Vibrational Spectroscopy of Molecules with Visible Lights," *Journal of Physical Chemistry B*, (Letter), **108**, 10636–10639 (2004).
- K. Takeshita, Y. Sasaki, M. Kobashi, Y. Tanaka, S. Maeda, A. Yamakata, T. Ishibashi and H. Onishi, "Effect of annealing temperature on back electron transfer and distribution of deep trap sites in dye-sensitized TiO₂, studied by time-resolved infrared spectroscopy," *Journal of Physical Chemistry B*, **108**, 2963–2969 (2004).
- S. Fujiyoshi, T. Ishibashi and H. Onishi, "Time-domain Raman measurement of molecular submonolayers by time-resolved reflection spectroscopy," *Journal of Physical Chemistry B*, (Letter), **108**, 1525–1528 (2004).

○総説・著書

- 相田 美砂子, 「バイオとナノテクの融合」 *情報処理*, 情報処理学会, **46**, 266–270 (2005).
- T. Ishibashi and H. Onishi, "Multiplex Sum-frequency Spectroscopy," *Chemistry Letters* (Highlight Review), **33**, 1404–1407 (2004).

○招待・依頼・特別講演

- 相田 美砂子, "生命科学への計算化学からの取り組み", 分子構造総合討論会シンポジウム, 広島, 2004 年 9 月 30 日 (依頼講演)
- 石橋 孝章, 「可視光のみを用いる界面選択的四次ラマン分光法」, 第 2 回 SFG 研究会, 名古屋, 2005 年 3 月 (招待講演)
- 藤芳 暁・石橋 孝章・大西 洋, 「液体界面の 4 次ラマン分光」, 第 24 回表面科学講演大会, 東京, 2004 年 11 月 (招待講演)
- 石橋 孝章, 「界面非線形振動分光法の新しい技術」, 分子科学研究所計算分子科学研究系オープンセミナー, 岡崎, 2004 年 10 月 (招待講演)

○国際学会での講演

- T. Ishibashi, S. Fujiyoshi and H. Onishi, "Interface-specific fourth-order nonlinear vibrational spectroscopy with visible light," Eleventh International Conference on Vibrations at Surfaces, Maine (USA), July 2004 (口頭発表).
- C. L. Pang, T. Ishibashi and H. Onishi, "Adsorption FITC-I dye on TiO₂(110) from an acetone solution," The 12th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (ICSPM12), Shizuoka (Japan), December 2004 (ポスター発表).

○他研究機関での講義・客員

- 相田 美砂子, 茨城大学理学部, 非常勤講師, 2004 年 4 月 1 日–2005 年 3 月 31 日
- 相田 美砂子, 九州大学先端物質化学研究所, 非常勤講師, 2004 年 4 月 1 日–2005 年 3 月 31 日

○研究助成の受け入れ状況

- 文部科学省科学技術振興調整費新興分野人材養成
「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」(代表: 相田 美砂子)
- 文部科学省科学研究費補助金 (基盤研究(A)(2))
「環境刺激 (放射線や活性酸素) による直接および間接的 DNA 損傷生成のメカニズム」(代表: 相田 美砂子)
- 文部科学省科学研究費補助金 (基盤研究(B)(2)) 「波長可変紫外プローブによる電子共鳴マルチブ
レックス SFG 分光」(代表: 石橋 孝章)
- 文部科学省科学研究費補助金特定領域研究 公募研究 「走査プローブ顕微鏡と和周波分光による
アナターゼおよびルチル光励起表面の観察」(代表: 石橋 孝章)
- 富士写真フイルム (株) 理学部学術研究助成金 「表面 SFG 法によるポリマー薄膜表面の配向構造
解析」(代表: 石橋 孝章)

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内および国際)

石橋 孝章, 科学技術振興機構 次世代光磁気材料を指向したナノデザイン制御 「周期デザイン基板の創成とクラスター修飾基板の評価」研究分担者 (2002-2007)

○学界ならびに社会における活動

・学協会役員, 委員

相田 美砂子, 日本化学会情報化学部会幹事 (1996-現在)

相田 美砂子, 日本化学会中国四国支部幹事 (2002-現在)

相田 美砂子, 情報計算化学生物学会 (CBI 学会) 理事 (2002-現在)

石橋 孝章, 日本分光学会赤外ラマン部会主査 (2003-現在)

石橋 孝章, 日本分光学会企画委員会委員 (1999-現在)

・論文誌編集委員

相田 美砂子, 日本生物物理学会「生物物理」編集委員 (2003-2004)

・討論会の組織委員

相田 美砂子, 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2003-2004)

相田 美砂子, 第 8 回理論化学討論会実行委員長 (2003-2004)

相田 美砂子, 第 1 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員長 (2004)

石橋 孝章, 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2004)

・その他の委員

相田 美砂子, 岡崎国立共同研究機構計算科学センター運営委員会委員 (2000-2001)

・座長を行った学会・討論会の名称

相田 美砂子, 2004 分子構造総合討論会, 広島, 2004 年 9 月

石橋 孝章, 2004 分子構造総合討論会, 広島, 2004 年 9 月

・講演会・講習会 (学会以外の一般向けのもの) の講師

相田 美砂子, “広島大学における『ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム』”

CBI 学会人材育成シンポジウム「先端的学際領域の専門教育と仕事の機会」,

化学会館 (東京), 2004 年 8 月 18 日

相田 美砂子, 「広島大学における新興分野人材養成の取り組み」, 科学技術振興調整費シンポジウム「未来を拓く科学技術」, 安田講堂 (東京), 2004 年 10 月 20 日

1-4. 化学専攻としての活動

1-4-1. 化学講演会

日時： 平成16年 7月1日 13:10

場所： 理学部 E002号教室

講師： 富岡 秀雄 教授（三重大学工学部）

演題： 三重項カルベン：一過性中間体から分子素材へ

担当研究グループ： 反応有機化学

日時： 平成16年7月15日 15:00

場所： 理学部 E211号

講師： Silvio Biali 教授（イスラエル，ヘブライ大学化学科）

演題： Preparation and Conformation of Ketocalixarene Derivatives

担当研究グループ： 構造有機化学

日時： 平成16年7月29日 15:30

場所： 理学部 E002号

講師： 尾崎 幸洋 教授（関西学院大学理工学部化学科）

演題： 単一ナノ粒子の表面増強ラマン散乱

担当研究グループ： 集積化学

日時： 平成16年10月1日 15:00

場所： 理学部 E002号

講師： Talal Mallah 教授（パリ南大学）

演題： Bottom up approach of molecular nanomagnets and coordination nanoparticles

担当研究グループ： 固体物性化学

日時： 平成16年10月5日 13:30

場所： 理学部 E002号

講師： 舟橋 重信 教授（名古屋大学大学院理学研究科）

演題： 金属錯体の動的挙動の解明

担当研究グループ： 分析化学

日時： 平成16年10月14日 16:00

場所： 理学部 E002号
講師： Javier CAMPO 博士（スペインザラゴザ大学）
演題： Basic Concepts on Neutron Scattering
担当研究グループ： 固体物性化学

日時： 平成16年10月15日 13:30
場所： 理学部 E002号
講師： Jean-Pascal Sutter 博士（フランス・ボルドー固体物性化学研究所）
演題： Towards Supramolecular Materials: Examples of Magnetic and Nano-porous Architectures
担当研究グループ： 固体物性化学

日時： 平成16年10月19日 13:30
場所： 理学部 E002号
講師： 三島 正章 教授（九州大学先端物質化学研究所）
演題： 気相と液相における活性化学種
担当研究グループ： 天然物有機化学

日時： 平成16年11月5日 15:00
場所： 理学部 E002号
講師： A. Ganesan 博士（University of Southampton, Department of Chemistry）
演題： Total Synthesis of Some Japanese Natural Products
担当研究グループ： 構造有機化学

日時： 平成16年11月15日 15:00
場所： 理学部 E210号
講師： Robert E. Maleczka, Jr. 教授（Department of Chemistry, Michigan State University）
演題： C-H Activation/Borylation-Based One-Pot Preparations of Aromatic Building Blocks for Organic Synthesis
担当研究グループ： 天然物有機化学

日時： 平成16年11月16日 15:00
場所： 理学部 E002号
講師： 北川 進教授（京都大学工学部）
演題： 新しい世界を拓く多孔性金属錯体

担当研究グループ： 錯体化学

日時： 平成17年3月10日 16:00

場所： 理学部 E208号

講師： Mohamedally Kurmoo 博士(フランス・ルイパスツール大学)

演題： Magnetism on Inorganic Solids

担当研究グループ： 固体物性化学

1-4-2. Chem サロン

Chem サロンは、いろいろな研究室の研究活動の紹介や化学関係教員・学生の交流の場を提供するために平成3年度より開始された。数理分子生命科学研究科（化学系）と共催で開催している。平成16年度の世話人は河内敦助教授である。

平成16年度の講師と題目を次にあげる。

第67回 2004年11月15日

『マルチプレックス赤外可視和周波発生分光法とその有機単分子膜への応用』

石橋 孝章 （化学専攻分子反応化学講座）

第68回 2004年12月13日

『高分子溶液論と分光法』

勝本 之晶 （化学専攻分子反応化学講座）

1-4-3. 化学専攻教員の理学研究科および全学での活動

藤原 照文	理学部環境保全委員会委員長	2004-2005
山本 陽介	全学作業環境測定専門委員会委員長	2004-
山本 陽介	全学薬品管理システム専門委員会委員	2004-
山本 陽介	理学研究科研究科長補佐（労働安全衛生担当）	2004
山本 陽介	全学国際交流委員会短期留学プログラム実施部会委員	2001-
大方 勝男	全学中央廃液処理施設運営委員	2003-2004
相田 美砂子	量子生命科学プロジェクト研究センター代表	2002-

1-4-4. 化学専攻教員の受賞

化学専攻の教員および名誉教授が、1990 年度以降に受けた学協会賞等を次にあげる。

1992 年度 (平成 4 年度)	化学ソフトウェア学会学会賞	吉田 弘
1993 年度 (平成 5 年度)	第 50 回中国文化賞	菅 隆幸
1994 年度 (平成 6 年度)	日本分析化学会学会賞	熊丸 尚宏
1996 年度 (平成 8 年度)	フンボルト賞	秋葉 欣哉
1997 年度 (平成 9 年度)	日本化学会賞 日本化学会学術賞	秋葉 欣哉 谷本 能文
1998 年度 (平成 10 年度)	第 55 回中国文化賞	秋葉 欣哉
1999 年度 (平成 11 年度)	日本化学会賞	岩田 末廣
1999 年度 (平成 11 年度)	錯体化学研究会研究奨励賞	久保 和幸
2000 年度 (平成 12 年度)	紫綬褒章	秋葉 欣哉
2004 年度 (平成 16 年度)	第 27 回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞	灰野 岳晴

1-4-5. 量子生命科学プロジェクト研究センター
Center for Quantum Life Sciences (QuLiS)

メンバー

理学研究科化学専攻

相田 美砂子 (代表), 吉田 弘 (平成 17 年 1 月まで), 小島 聡志, 勝本 之晶

理学研究科数理分子生命理学専攻

井出 博, 泉 俊輔, 片柳 克夫

先端物質科学研究科分子生命機能科学専攻

田中 伸和

医歯薬学総合研究科病態薬物治療学講座

小澤 孝一郎, 古武 弥一郎

総合科学部

森本 康彦

理学研究科特任教員 (常勤的非常勤)

岩田 末廣, 神沼 二眞, 石野 洋子, 松原 世明, 榮 慶丈, 原田 隆範

客員教授

細矢 治夫, 平野 恒夫, 齊藤 肇, 菅田 宏, 金子 元久,

諸熊 奎治 (米国エモリー大学教授),

竹内 敬人 (神奈川大学理学部教授),

伊藤 真人 (創価大学工学部教授)

客員助教授

平田 聡 (米国フロリダ大学化学科助教授)

客員研究員

白井 文幸 (藤沢薬品工業株式会社化学研究所・主任研究員),

尾島 典行 (島津製作所ライフサイエンス研究所・主任研究員),

Michel Dupuis (Pacific Northwest National Laboratory, Senior Chief Scientist)

博士研究員

高須 雄一, Shaheda A. Wahab, 赤井 伸行, 山本 竜也, Adchara Padermshoke

研究支援者

藤井 敏美

○研究活動の概要

量子生命科学プロジェクト研究センター (*Center for Quantum Life Sciences : QuLiS*) は広島大学プロジェクト研究センターの一つとして平成 15 年 4 月に設置された。膨大化しつつあるライフサイエンス分野の情報から有益な概念を抽出するためには, IT 技術を駆使することが必須であり, また, 従来の大学に根強く残っている既成の枠にとらわれることなく, 複合領域の研究者の自由な連携が必須である。量子生命科学プロジェクト研究センターは, 理学研究科化学専攻・同数理分子生命理学専攻, 医歯薬総合研究科および先端物質科学研究科の若手研究者が連携して構成している。

「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」のアドバンストコースは, 量子生命科学プロジェクト研究センター (QuLiS) において進める。学生や博士研究員と教員が密接にかかわりあうことによって, 新しい分野における教育や研究の推進をめざす。

○平成 16 年度の活動の記録

本センターは量子化学に根ざした生命科学研究をめざしている。そのために, 理論からのアプローチと実験からのアプローチがうまく相互作用するように, センター内のディスカッションおよび共同研究を積極的に推進した。研究会やセミナーの詳細はホームページに随時掲載した。
[\(http://www.qulis.org/\)](http://www.qulis.org/)

《1》量子生命科学プロジェクト研究センターの拠点

総合研究実験棟 7 階の共用スペース (701 室) をセンターの拠点として使用している。さらに、理学部 B 棟 1 階の共用スペース (B109 室) を実験室として、総合研究実験棟 6 階 (ユニット No.2) を計算機室として使用している。

《2》ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム (NaBiT プログラム) の一環として次のようなセミナーやシンポジウムを開催した。

①「量子生命科学セミナー」の実施 (第 1 回から第 28 回)。毎週金曜日 15:00~16:30 に理学部 E104 室において開催した。要旨等の詳細は上記 HP を参照してください。

- 第 1 回 2004 年 4 月 9 日 (金) ガイダンス
- 第 2 回 2004 年 4 月 16 日 (金) 「第 40 回中国四国産学連携化学フォーラム」
- 第 3 回 2004 年 4 月 23 日 (金)
 題目: Molecular Modeling
 講師: 吉田 弘 (広島大学大学院理学研究科)
- 第 4 回 2004 年 4 月 30 日 (金)
 題目: タンパク質分子の非経験的手法による計算: フラグメント分子軌道 (FMO) 法
 講師: 原田 隆範 (広島大学大学院理学研究科, 特任助手)
- 第 5 回 2004 年 5 月 7 日 (金)
 題目: 大規模分子計算プログラム (ONIOM 法)
 講師: 松原 世明 (広島大学大学院理学研究科, 特任助教授)
- 第 6 回 2004 年 5 月 17 日 (月) 15:00~16:30
 題目: “ONIOM, A Versatile Hybrid Method: Basics and Applications”
 講師: 諸熊 奎治 (広島大学客員教授・米国エモリー大学教授)
- 第 7 回 2004 年 5 月 21 日 (金)
 題目: 蛋白質の構造と創薬
 講師: 白井 文幸 (量子生命科学プロジェクト研究センター客員研究員・藤沢薬品工業株式会社化学研究所主任研究員)
- 第 8 回 2004 年 5 月 28 日 (金)
 題目: 振動円偏光二色分光
 講師: 菅田 宏 (広島大学客員教授)
- 第 9 回 2004 年 6 月 4 日 (金)
 講演題目: 励起状態の量子化学計算
 講師: 平野 恒夫 (広島大学客員教授・お茶の水女子大学名誉教授)
- 第 10 回 2004 年 6 月 11 日 (金)
 題目: 齊藤 肇 (広島大学客員教授・姫路工業大学名誉教授)
 講師: 生体高分子の固体 NMR による解析 (その 1 基礎原理)
- 第 11 回 2004 年 6 月 18 日 (金)
 題目: 局在量子構造による材料科学
 講師: 足立 裕彦 (京都大学名誉教授)
- 第 12 回 2004 年 6 月 25 日 (金)
 - (1) 題目: 創薬のための分子モデリング, バイオ・IT 融合産業の創出を目指して
 講師: 吉田 弘 (広島大学大学院理学研究科, 助教授)
 - (2) 題目: コンピュータと創薬,
 目に見えない蛋白質-化合物の世界を Virtual Reality の世界へ
 講師: 白井 文幸 (量子生命科学プロジェクト研究センター客員研究員・藤沢薬品工業株式会社化学研究所主任研究員)

- 第 13 回 004 年 7 月 2 日 (金)
題目：有機電子論はどこまで正しいか
講師：細矢 治夫 (広島大学客員教授・お茶の水女子大学名誉教授)
- 第 14 回 2004 年 7 月 9 日 (金) 場所：酒類総合研究所
独立行政法人 酒類総合研究所 見学
- 第 15 回 2004 年 7 月 16 日 (金)
題目：計算機で化学する (その 1)
講師：岩田 末廣 (広島大学大学院理学研究科・特任教授)
- 第 16 回 2004 年 7 月 23 日 (金)
題目：工学と生物学への Informatics (人工知能の視点から)
講師：石野 洋子 (広島大学大学院理学研究科・特任教授)
- 第 17 回 (企業人材シリーズ (1)) 2004 年 10 月 8 日 (金)
題目：創薬におけるニューラルネットワークの利用
講師：丹羽 朋子 (日本新薬株式会社創薬研究所主任研究員)
- 第 18 回 2004 年 10 月 15 日 (金)
題目：有機ゲルマニウム化学ーヘテロ原子化学の新しいフロンティア
講師：竹内 敬人 (神奈川大学教授・広島大学客員教授)
- 第 19 回 (企業人材シリーズ (2)) 2004 年 10 月 22 日 (金)
題目：蛋白質の構造と創薬：最適化研究における蛋白質の構造
講師：白井 文幸 (藤沢薬品工業株式会社化学研究所主任研究員)
- 第 20 回 (企業人材シリーズ (3)) 2004 年 10 月 29 日 (金)
題目：触媒開発と企業研究について
講師：岩崎 秀治 ((株)クラレ くらしき研究所 触媒・化学品研究開発グループ
兼 電気・電子デバイス研究開発グループ グループリーダー)
- 第 21 回 (企業人材シリーズ (4)) 2004 年 11 月 12 日 (金)
題目：電子産業の中の化学者の役割
講師：佐野 健二 ((株)東芝 研究開発センター)
- 第 22 回 (企業人材シリーズ (5)) 2004 年 11 月 19 日 (金)
題目：新領域を生み出す創造力
講師：五十島 健史 ((株)三菱化学 科学技術研究センター)
- 第 23 回 (企業人材シリーズ (6)) 2004 年 11 月 26 日 (金)
題目：科学捜査と非破壊分析
講師：下山 昌彦 (兵庫県警察本部科学捜査研究所)
- 第 24 回 2004 年 12 月 3 日 (金)
題目：バイオインフォマティクスの最前線ー経路網から疾患を理解する
講師：神沼 二眞 (広島大学大学院理学研究科・特任教授)
- 第 25 回 (企業人材シリーズ (7)) 2004 年 12 月 10 日 (金)
題目：論理的創薬における計算化学の役割
講師：多田 幸雄 (大鵬薬品株式会社 飯能研究センター創薬研究所)
- 第 26 回 (企業人材シリーズ (8)) 2005 年 1 月 21 日 (金)
題目：ライフサイエンス研究における最新 IT について
講師：高辻 博史 (日本アイ・ビー・エム(株) ライフサイエンス事業推進部)
- 第 27 回 (企業人材シリーズ (9)) 2005 年 1 月 28 日 (金)
題目：21 世紀の新薬開発
講師：堀内 正 (第一製薬株式会社 創薬開拓研究所)
- 第 28 回 (企業人材シリーズ (10)) 2005 年 2 月 4 日 (金)
題目：「製薬企業の求める人材」について
講師：瀧本 浩一 (藤沢薬品工業 (株) 人事部 研究開発担当部長)

②量子生命科学プロジェクト研究センター第2回シンポジウムを開催。要旨等の詳細は上記 HP を参照してください。

第2回 QuLiS シンポジウム「ナノサイエンスのひろがり」

日時：2005年3月25日（金）13：00～17：40

場所：理学部 E002 室

プログラム：

1. 13:00～13:50 白井 文幸（藤沢薬品）
「MOLDA の発展と進化 ―創薬のためのインターフェースをめざして―」
2. 13:50～15:00 埴田 博一（IMS）
「有機エレクトロニクスおよび分子エレクトロニクスの現状と問題点」
有機発光ダイオードが実用化を迎え、それを駆動するための有機トランジスターと電力
3. 15:20～16:30 永瀬 茂（IMS）
「ナノ分子と計算化学」
4. 16:30～17:40 榊 茂好（京大）
「遷移金属元素を含む複合電子系の理論的研究」

③NaBiT セミナーの開催。要旨等の詳細は上記 HP を参照してください。

第2回 NaBiT セミナー 2004年5月17日

講演題目：21世紀の量子化学

講師：西本 吉助 教授

第3回 NaBiT セミナー 2005年1月26日

講演題目：Theoretical Investigations in Chemical Physics

講師：Dr. Michel Dupuis

④理学研究科の正式授業科目として「計算化学演習」を集中講義として実施した。この演習において、総合研究実験棟 6 階にある計算機（40 ノードの PC クラスタ）を使用した。この演習には学生だけでなく、計算化学の手法を学びたいという広島大学内の教員の方々が参加した。大きな計算機システムを自由に使って最先端の計算化学の手法を学ぶことができる内容だったので、この演習は、履修した学生および参加した教員から大変好評だった。

⑤ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラムのアドバンストコースとして、博士研究員や学生と一緒に、生体系に関する研究・開発を推進した。

⑥2003・2004 年度ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム教育研究成果報告書を発行した。上記①から⑤の詳細はこの報告書に記載してある。

《3》センター独自の HP を拡充するだけでなく、広島大学の HP 中のプロジェクト研究センターのサイトへ、最新のお知らせを頻繁に掲載した。

○ 発表原著論文

Misako Aida and Michel Dupuis, “Fundamental absorption frequency from quasi-classical direct ab initio molecular dynamics: Diatomic Molecule,” *Chemical Physics Letters*, **401**, 170–174 (2005).

Masato Tanaka and Misako Aida, “An Ab Initio MO Study on Orbital Interaction and Charge Distribution in Alkali Metal Aqueous Solution: Li^+ , Na^+ and K^+ ,” *Journal of Solution Chemistry*, **33** (6–7), 887–901(2004).

Takeshi Nagata and Suehiro Iwata, “Perturbation expansion theory corrected from basis set superposition error I. Locally projected excited orbitals and single excitations,” *Journal of Chemical Physics*, **120**,

- 3555–3563 (2004).
- Takeshi Nagata, Mutsumi Aoyagi and Suehiro Iwata, “Noble gas clusters doped with a metal ion I. Ab initio studies of Na^+Ar_n ,” *Journal of Physical Chemistry A*, **108**, 683–690 (2004).
- Suehiro Iwata and Fenwu Chen, “Theoretical study of photoabsorption cross section of water cluster anions: The size and isomer dependences,” *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomina*, **142**, 277–281 (2005).
- Toshiaki Matsubara, “Density Functional Study of the Electronic Structure of the New Type of Ion Clusters $\text{X}(\text{O}_2)_2$ and $\text{X}(\text{NO})_2$ ($\text{X}=\text{H}^-, \text{H}^+, \text{Li}^+, \text{Na}^+, \text{K}^+, \text{Be}^{2+}, \text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}$) with the Cyclic Form,” *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)*, **676**, 177–184 (2004).
- Yoshitake Sakae and Yuko Okamoto, “Protein force-field parameters optimized with the Protein Data Bank.I. Force-field optimizations,” *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, **3**, 339–358 (2004).
- Yoshitake Sakae and Yuko Okamoto, “Protein force-field parameters optimized with the Protein Data Bank.II. Comparisons of force fields by folding simulations of short peptides,” *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, **3**, 359–378 (2004).
- Keiji Taga, Y. Jibu, S. Hamada, Y. Yamamoto, T. Yoshida, N. Shida, Hiroshi Yoshida, Keiichi Ohno and Hiroatsu Matsuura, “Density Functional Study of *n*-Propyltrichlorogermane and *n*-Propyltrichlorostannane,” *Journal of Molecular Structure*, **694**(1–3), 63–71 (2004).
- Nobuyuki Akai, Daisuke Negishi, Satomi Kudoh, Masao Takayanagi and Munetaka Nakata, “Infrared spectrum and molecular structure of lowest electronically excited triplet state of 1,4-dicyano-2,3,5,6-tetrafluorobenzene in low-temperature matrices,” *Journal of Molecular Structure*, **688**, 177–183 (2004).
- Mitsuhiro Nagata, Yoshisuke Futami, Nobuyuki Akai, Satomi Kudoh and Munetaka Nakata, “Structure and infrared spectrum of 2-hydroxyphenyl radical,” *Chemical Physics Letters*, **392**, 259–264 (2004).
- Nobuyuki Akai, Satomi Kudoh and Munetaka Nakata, “Matrix-isolation infrared spectrum and optimized structure of 2,3-dicyanonaphthalene in the T_1 state,” *Chemical Physics Letters*, **392**, 480–485 (2004).
- Nobuyuki Akai, Satomi Kudoh and Munetaka Nakata, “Hydrogen-atom migration and Wolff rearrangement in photolysis of chlorohydroquinone to produce p-benzoquinone and 3-hydroxy-2,4-cyclopentadiene-1-ylidenemethanone,” *Journal of Photochemistry and Photobiology A*, **169**, 47–55 (2005).
- Kenji Ujike, Nobuyuki Akai, Satomi Kudoh and Munetaka Nakata, “Photoisomerization and photocyclization of 3,5-cyclohexadiene-1,2-diimine and its methyl-substituted derivatives in low-temperature argon matrices,” *Journal of Molecular Structure*, **735–736**, 335–342 (2005).
- Satoshi Kojima, Kyoko Hiroike and Katsuo Ohkata, “Stereoselective synthesis of activated cyclopropanes with an α -pyridinium acetamide bearing an 8-phenylmenthyl group as the chiral auxiliary,” *Tetrahedron Letters*, **45**, 3565–3568 (2004).
- Yoshifumi Kanosue, Satoshi Kojima and Katsuo Ohkata, “Influence of solvent viscosity on the rate of hydrolysis of dipeptides by carboxypeptidase Y,” *Journal of Physical Organic Chemistry*, **17**, 448–457 (2004).
- Yoshifumi Kanosue, Satoshi Kojima, Y. Hiraga and Katsuo Ohkata, “Relationship between the hydrophobicity of dipeptides and the Michaelis-Menten constant K_m of their hydrolysis by carboxypeptidase-Y and carboxypeptidase-A,” *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **77**, 1187–1193 (2004).
- Satoshi Kojima, T. Fukuzaki, Atsushi Yamakawa and Y. Murai, “Highly Z-selective synthesis of β -monosubstituted- α,β -unsaturated cyanides using the Peterson reaction,” *Organic Letters*, **6**, 3917–3920 (2004).
- Satoshi Kojima, Tsugihiko Hidaka and Y. Ohba, “Synthesis of β -monosubstituted α,β -unsaturated amides with Z-selectivity using diphenylphosphonoacetamides,” *Heteroatom Chemistry*, **15**, 515–523 (2004).
- Katsuo Ohkata, Yukiko Tamura, B. B. Shetuni, Ryukichi Takagi, Wataru Miyanaga, Satoshi Kojima and L. A. Paquette, “Stereoselectivity control by oxaspiro rings during Diels-Alder cycloadditions to cross-conjugated cyclohexadienones: The syn oxygen phenomenon,” *Journal of the American*

- Chemical Society*, **126**, 16783–16792 (2004).
- Satoshi Kojima, Tsugihiko Hidaka and Atsushi Yamakawa, “Application of organocerium reagents for the efficient conversion of Z- α , β -unsaturated Weinreb amides to Z- α , β -unsaturated ketones,” *Chemistry Letters*, **34**, 470–471 (2005).
- Mayumi Matsubara, Tamon Tanaka, Hiroaki Terato, Eiji Ohmae, Shunsuke Izumi, Katsuo Katayanagi and Hiroshi Ide, “Mutational analysis of the damage-recognition and catalytic mechanism of human SMUG1 DNA glycosylase,” *Nucleic Acid Research*, **32**, 5291–5302 (2004).
- Tatsuya Yamamoto, Shunsuke Izumi and Kunihiro Gekko, “Mass Spectrometry on Segment-Specific Hydrogen Exchange of Dihydrofolate Reductase,” *The Journal of Biochemistry*, **135**, 17–24 (2004).
- Tatsuya Yamamoto, Shunsuke Izumi and Kunihiro Gekko, “Mass Spectrometry on Hydrogen/Deuterium Exchange of Dihydrofolate Reductase: Effects of Ligand Binding,” *The Journal of Biochemistry*, **135**, 663–671 (2004).
- Tatsuya Yamamoto, Eiji Ohmae and Kunihiro Gekko, “Mass Spectrometry of Hydrogen/Deuterium Exchange of *Escherichia coli* Dihydrofolate Reductase: Effects of Loop Mutations,” *The Journal of Biochemistry*, **135**, 487–494 (2004).
- Laurent Gros, Alexander A. Ishchenko, Hiroshi Ide, Rhoderick H. Elder and Murat K. Saporbaev, “The major human AP endonuclease (Ape1) is involved in the nucleotide incision repair pathway,” *Nucleic Acids Research*, **32**, 73–81 (2004).
- Mohammed Mohsin Ali, Satofumi Kurisu, Yoshihiro Yoshioka, Hiroaki Terato, Yoshihiro Ohshima, Kihei Kubo and Hiroshi Ide, “Detection of endonuclease III- and 8-oxoguanine glycosylase-sensitive base modifications in gamma-irradiated DNA and cells by the aldehyde reactive probe (ARP) assay,” *Journal of Radiation Research*, **45**, 229–237 (2004).
- Atsushi Katafuchi, Toshiaki Nakano, AyAya Masaoka, Hiroaki Terato, Shigenori Iwai, Fumio Hanaoka and Hiroshi Ide, “Differential specificity of human and *Escherichia coli* endonuclease III and VIII homologues for oxidative base lesions,” *Journal of Biological Chemistry*, **279**, 14464–14471 (2004).
- Tomoaki Yamasaki, Shunsuke Izumi, Hiroshi Ide and Yoshihiro Ohshima, “Identification of a novel rat microsomal vitamin D3 25-hydroxylase,” *Journal of Biological Chemistry*, **279**, 22848–22856 (2004).
- Alexander A. Ishchenko, Hiroshi Ide, D. Ramotar, G. Nevinsky and Murat K. Saporbaev, “Alpha-anomeric deoxynucleotides, anoxic products of ionizing radiation, are substrates for the endonuclease IV-type AP endonucleases,” *Biochemistry*, **43**, 15210–15216 (2004).
- Yaichiro Kotake, Katsuhiko Okuda, Machiko Kamizono, Naoki Matsumoto, Takao Tanahashi, Hiroshi Hara, Dominique Capparos-Lefebvre and Shigeru Ohta, “Detection and determination of reticuline and N-methylcoculaurine in the *Annonaceae* family using liquid chromatography-tandem mass spectrometry,” *Journal of Chromatography B Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences*, **806**, 75–78 (2004).
- Yukiteru Katsumoto, Takeyuki Tanaka and Yukihiro Ozaki, “Relationship between the Coil-Globule Transition of an Aqueous Poly(*N*-isopropylacrylamide) Solution and Structural Changes in Local Conformations of the Polymer,” *Macromolecular Symposia*, **205**, 209–223 (2004).
- T. Kimura, K. Ishihara, Koichiro Ozawa and M. Sasa, “Augmentation of serotonin-induced inhibition of neuronal activity in the hippocampus following repeated treatment with methamphetamine,” *Annals of the New York Academy of Sciences*, **1025**, 242–247 (2004).
- Katsuhito Nagano, Etsuko Suzuki, Yuko Nagano, Katsuko Kataoka and Koichiro Ozawa, “Early apoptosis signals in hindlimb unloading-induced muscle atrophy,” *Journal of Pharmacological Sciences*, **94**, 142 (2004).
- Kimiko Ihara, Hiriroko Unei, Kenji Kihira, Hiroshi Iwasaki, Koichi Kanigawa and Koichiro Ozawa, “Energy metabolism and nutritional support in the early phase of severely burned patients,” *Japanese Journal of Burn Injury*, **23**, 223–230 (2004).
- Hiroshi Moriuchi, Chiho Okamoto, Ryuichi Nishihama, Ichiro Yamashita, Yasunori Machida and Nobukazu Tanaka, “Nuclear localization and interaction of RolB with plant 14-3-3 proteins correlates with induction of adventitious roots by the oncogene *rolB*,” *The Plant Journal*, **38**, 260–275 (2004).
- Hiroshi Moriuchi, Yuki Fujikawa, Mohammed Aly Mohammed Aly, Hirofumi Saneoka, Khonosuke Fujita, Ichiro Yamashita and Nobukazu Tanaka, “Hairy root-mediated transgenic-plant regeneration in Egyptian clover (*Trifolium alexandrinum* L.),” *Plant Biotechnology*, **21**, 165–168 (2004).

- Nobukazu Tanaka, Kenji Suzuki and Ichiro Yamashita, "Evidence of horizontal gene transfer from *Agrobacterium rhizogenes* to tobacco plants during evolutionary process," *Endocytobiosis and Cell Research*, **15**, 151–162 (2004).
- Kazuo Yoshida, Misugi Uraji, Yoshiyuki Hattori, Kazuki Moriguchi, Katunori Suzuki, Nobukazu Tanaka and Akira Kato, "Genome structure and evolution of giant plant pathogenic plasmids in *Agrobacterium tumefaciens* and *Agrobacterium rhizogenes*," *Endocytobiosis and Cell Research*, **15**, 371–378 (2004).
- Yaichiro Kotake, Ryota Taguchi, Katsuhiro Okuda, Yoko Sekiya, Yoshikazu Tasaki, Masaaki Hirobe and Shigeru Ohta, "Neuroprotective effect of 1-methyl-1,2,3,4-tetrahydroisoquinoline on cultured rat mesencephalic neurons in the presence or absence of various neurotoxins," *Brain Research*, **1033**, 143–150 (2005).
- Adchara Padermshoke, Yukiteru Katsumoto, Harumi Sato, Sanong Ekgasit, Isao Noda and Yukihiro Ozaki, "Surface Melting and Crystallization Behavior of Polyhydroxyalkanoates Studied by Attenuated Total Reflection Infrared Spectroscopy," *Polymer*, **45**(19), 6547–6554 (2004).
- Adchara Padermshoke, Harumi Sato, Yukiteru Katsumoto, Sanong Ekgasit, Isao Noda and Yukihiro Ozaki, "Crystallization Behavior of Poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyhexanoate) Studied by 2D IR Correlation Spectroscopy," *Polymer*, **45**(21), 7159–7165 (2004).
- Adchara Padermshoke, Harumi Sato, Yukiteru Katsumoto, Sanong Ekgasit, Isao Noda and Yukihiro Ozaki, "Thermally Induced Phase Transition of Poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyhexanoate) Investigated by Two-Dimensional Infrared Correlation Spectroscopy," *Vibrational Spectroscopy*, **36**(2), 269–277 (2004).
- Adchara Padermshoke, Yukiteru Katsumoto, Harumi Sato, Sanong Ekgasit, Isao Noda and Yukihiro Ozaki, "Melting Behavior of Poly(3-hydroxybutyrate) Investigated by Two-Dimensional Infrared Correlation Spectroscopy," *Spectrochimica Acta A*, **61**, 541–550 (2005).
- Harumi Sato, Masayuki Nakamura, Adchara Padermshoke, Hiroshi Yamaguchi, Hikaru Terauchi, Sanong Ekgasit, Isao Noda and Yukihiro Ozaki, "Thermal Behavior and Molecular Interaction of Poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyhexanoate) Studied by Wide-Angle X-ray Diffraction," *Macromolecules*, **37**, 3763–3769 (2004).
- Harumi Sato, Rumi Murakami, Adchara Padermshoke, Fuminobu Hirose, Kenichi Senda, Isao Noda and Yukihiro Ozaki, "Infrared Spectroscopy Studies of CH•••O Hydrogen Bondings and Thermal Behavior of Biodegradable Polyhydroxyalkanoate," *Macromolecules*, **37**, 7203–7213 (2004).
- Hazime Saitô, Satoru Yamaguchi, H. Okuda, A. Shiraishi and Satoru Tuzi, "Dynamic Aspect of Bacteriorhodopsin as a Typical Membrane Protein as Revealed by Site-directed Solid-state ^{13}C NMR," *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*, **25**, 5–14 (2004).
- Hazime Saitô, J. Mikami, Satoru Yamaguchi, M. Tanio, A. Kira, Tadashi Arakawa, Kazutoshi Yamamoto and Satoru Tuzi, "Site-directed ^{13}C Solid-state NMR Studies on Membrane Proteins: Strategy and Goals toward Revealing Conformation and Dynamics as Illustrated for ^{13}C -Labeled Bacteriorhodopsin," *Magnetic Resonance in Chemistry*, **42**, 218–230 (2004).
- Akira Naito, Miya Kamihira, R. Inoue and Hazime Saitô, "Structural Diversity of Amyloid Fibril Formed in Human Calcitonin as Viewed from Site-directed ^{13}C Solid State NMR Spectroscopy," *Magnetic Resonance in Chemistry*, **42**, 247–257 (2004).
- Hazime Saitô, Satoru Yamaguchi, K. Ogawa, M. Marquez, C. Sanz and E. Padros, "Glutamic Acid Residue(s) of Bacteriorhodopsin at the extracellular Surface as Determinants for Conformation and Dynamics as Revealed by Site-directed Solid-state ^{13}C NMR," *Biophys. J.*, **86**, 1673–1681 (2004).
- Satoru Yamaguchi, Satoru Tuzi, J. U. Bowie and Hazime Saitô, "Secondary Structure and Backbone Dynamics of *Escherichia coli* Diacylglycerol Kinase, as Revealed by Site-directed Solid-state ^{13}C NMR," *Biochim. Biophys. Acta*, **1698**, 97–105 (2004).
- Satoru Yamaguchi, Kazumi Shimono, Yuki Sudo, Satoru Tuzi, Akira Naito and Hazime Saitô, "Conformation and Dynamics of [3- ^{13}C]Ala-, [1- ^{13}C]Val-labeled Truncated pharaonis Transducer, pHtrII (1-159) as Revealed by Site-directed ^{13}C Solid-state NMR: Their Changes due to Association with Phoborhodopsin (Sensory Rhodopsin II)," *Biophysical Journal*, **86**, 3131–3140 (2004).
- A. Kira, M. Tanio, Satoru Tuzi and Hazime Saitô, "Significance of low-frequency local fluctuation motions in the transmembrane B and C α -helices of bacteriorhodopsin, to facilitate efficient proton uptake from the cytoplasmic surface, as revealed by site-directed solid-state ^{13}C NMR," *European Biophysics*

- Journal*, **33**, 580–588 (2004).
- S. Kumazawa, K. Kajiyama, Akira Naito, Hazime Saitô, Satoru Tuzi, M. Tanio, M. Suzuki, F. Nanjo, E. Suzuki and T. Nakayama, “Direct Evidence of Interaction of a Green Tea Polyphenol Epigallocatechin Gallate, with Lipid Bilayers by Solid-state Nuclear Magnetic Resonance,” *Biosci. Biotechnol. Biochem.*, **68**, 1743–1747 (2004).
- Hazime Saitô, “Dynamic Picture of Membrane Proteins in Two-dimensional Crystal, Lipid Bilayer and Detergent as Revealed by Site-Directed Solid-state ^{13}C NMR,” *Chemistry and Physics of Lipids*, **132**, 101–112 (2004).
- Hazime Saitô, “Conformational and Dynamics Aspects of Polysaccharide Gels by High-Resolution Solid-State NMR In “Polysaccharides: Structural Diversity and Functional Versatility,” ed. by S. Dumitriu,” Marcel Dekker, Inc., (2004).
- Adchara Padermshoke, Harumi Sato, Yukiteru Katsumoto, Sanong Ekgasit, Isao Noda and Yukihiro Ozaki, “Thermally induced phase transition of poly(3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyhexanoate) investigated by two-dimensional infrared correlation spectroscopy,” *Vibrational Spectroscopy*, **36**, 241–249 (2004).
- Md Ruhul Matin, Shaheda A. Wahab, Yukiteru Katsumoto, Hiroatsu Matsuura and Keiichi Ohno, “Thermal Stability of the Hydration Structure of Short-chain Poly(oxyethylene) in Carbon Tetrachloride: An Infrared Spectroscopic Observation of the Breakdown of Hydrogen Bonds,” *Chemistry Letters*, **34**, 502–503 (2005).
- Keiichi Ohno, Hiroshi Takao, Takashi Masuda and Yukiteru Katsumoto, “Two Characteristic H-bonded O-H stretching Bands for the Compounds Containing Ether Oxygen and Hydroxyl Oxygen,” *Chemistry Letters*, **34**, 250–251 (2005).
- 神田 毅, 杉原 厚吉, 森本 康彦, 「幾何アルゴリズム加速のための混合演算に関する研究」, 応用数学会論文誌, **14** (2), 117–150 (2004)
- Kaori Fukuzawa, Kazuo Kitaura, Masami Uebayasi, Kotoko Nakata, Tsuguchika Kaminuma and Tatsuya Nakano, “Ab initio Quantum Mechanical Study of the Binding Energies of Human Estrogen Receptor with its Ligands: An application of Fragment of Molecular Orbital Method,” *Journal of Computational Chemistry*, **26**, 1–10 (2005).
- Tsuguchika Kaminuma, “Lessons Learned in Building a Global Information Network on Chemicals (GINC),” *Toxicology and Applied Pharmacology*, in press.

○総説・著書

- 田中 伸和, 森内 寛, “植物腫瘍化因子がかかわる細胞増殖・器官分化のタンパク質ネットワーク”, 生物物理, **44** (6), 286–289 (2004).
- 森本 康彦, “IT 革命によるテクノロジーの変化”, 制度と生活世界, 培風館, 149–157 (2004).
- Yukihiro Ozaki, Yukiteru Katsumoto, Jian-Hui Jiang, Yizeng Liang, “Spectral analysis in the NIR region” in *Useful and Advanced Information in the Field of Near Infrared Spectroscopy*, (Ed. S. Tsuchikawa), 1–16 (2004).

○招待・依頼・特別講演

- 山本 竜也, “質量分析法を利用したジヒドロ葉酸還元酵素の水素/重水素交換の研究”, 日本質量分析学会第 123 回関東談話会講演会, 東京, 2004 年 6 月 5 日 (招待講演)
- 岩田 末廣, “電子-水素結合: 実験と理論の最近の進歩”, 分光学会中国四国支部, 東広島, 2004 年 6 月 9 日 (招待講演)
- 相田 美砂子, “生命科学への計算化学からの取り組み”, 分子構造総合討論会シンポジウム, 広島, 2004 年 9 月 30 日 (依頼講演)
- 石野 洋子, “*Arabidopsis thaliana* のゲノム網羅的 SNP データベースの構築と活用”, 遺伝資源研究会, 筑波, 2005 年 2 月 3 日 (招待講演)
- 岩田 末廣, “欧米の大学における研究評価: 英国の RAE2001 から 2008 への動きを中心に”, 大学

評価学会第2回全国大会 第2分科会「学術・研究評価分科会」, 東京, 2005年3月27日(招待講演)

Koichiro Ozawa, "Model core curriculum for pharmaceutical education in Japan," The 64th Congress of International Pharmaceutical Federation, New Orleans, U.S.A., September 4-9. (招待講演)

○国際学会での講演

Tatsuya Yamamoto, Miyuki Inno, Shunsuke Izumi and Kunihiko Gekko, "Mass Spectrometry on H/D Exchange of Ligand-Complexes of *E.coli* Dihydrofolate Reductase," 52nd ASMS Conference on Mass Spectrometry, Gaylord Opryland Hotel, Nashville, Tennessee, May 23-27, 2004. (ポスター発表)

Nobuyuki Akai and Munetaka Nakata, "Photoreaction Mechanism of Chlorohydroquinone in a Low-temperature Argon Matrix," 5th. International Conference on Low Temperature Chemistry, Berlin-Dahlem(Germany), September 7-10, 2004. (ポスター発表)

Yoshitake Sakae and Yuko Okamoto, "Optimization of force-field parameters for protein systems," Frontiers in Bioinformatics: Structure, Interaction and Function, Kyoto (Japan), February 10, 2004. (ポスター発表)

Yoshitake Sakae and Yuko Okamoto "Force-field parameters based on Protein Data Bank" Gordon Research Conferences, Computational Chemistry, July, 2004. (ポスター発表)

Tsuguchika Kaminuma, "An experience of building a global information network on chemicals (GINC)," 10th International Congress of Toxicology, Tampere(Finland), July 11-15, 2004. (口頭発表)

Yoshitomo Tanaka, Tsuguchika Kaminuma, Kotoko Nakata and Hiroshi Tanaka, "Xenobiotic metabolic enzymes and transporters as nuclear receptor target genes," Toxicogenomics International Forum 2004, Kyoto(Japan), October 12-13, 2004. (口頭発表)

Yoshitomo Tanaka, Tsuguchika Kaminuma, Kotoko Nakata and Hiroshi Tanaka, "In Silico Search for Nuclear Receptor Target Genes," The 5th International Conference on Genome Informatics (GIW 2004), Yokohama (Japan), December 12-15, 2004. (ポスター発表)

Yoko Ishino, Hitomi Okada and Hisaaki Taniguchi, "Direct Mapping of *Synechocystis* sp.6803 MS/MS Data on Genomic DNA Sequence," 52nd ASMS Conference on Mass Spectrometry (Nashville, USA, May 23-27, 2004) (ポスター発表)

Hitomi Okada, Yoko Ishino, Masahiko Ikeuchi and Hisaaki Taniguchi, "Proteome Analysis of Cyanobacteria *Synechocystis* sp. PCC6803," 52nd ASMS Conference on Mass Spectrometry (Nashville, USA, May 23-27, 2004) (ポスター発表)

Yoko Ishino, Hitomi Okada and Hisaaki Taniguchi, "Annotating Genes Using Proteomic Data," Genome Informatics 2004: Joint Cold Spring Harbor Laboratory and Wellcome Trust Conference, (Hinxton, UK, Sep. 22-26, 2004) (ポスター発表)

Yuichi Takasu, Izumi Nishio and Hiroshi Yoshida, "Low Frequency Raman Scattering of Clathrate Hydrate -Ab Initio Calculations And New Analysis-, " The XIXth International Conference on Raman Spectroscopy (ICORS), (Gold Coast, Australia, Aug. 8-13, 2004) (ポスター発表)

Yasuhiko Morimoto, "Optimized Transitive Association Rule: Mining Significant Stopover between Events," 20th Annual ACM Symposium on Applied Computing, (Santa Fe, USA, March 13-17, 2005) (ポスター発表)

Hiroshi Moriuchi, Ichiro Yamashita, Yasunori Machida and Nobukazu Tanaka, "Adventitious root induction by the rooting locus gene B (rolB) correlates with the nuclear localization and interaction of RolB protein with plant 14-3-3 proteins," 25th Crown Gall Conference, (Urbana, USA, Aug 13-17, 2004) (口頭発表およびポスター発表)

○特許公報

森本康彦, 猪口明博, 「情報表示システム, 情報表示方法, 該情報表示方法を実行させるためのプログラム, 該プログラムを記録したコンピュータ可読な記憶媒体, サーバ制御方法, 該サーバ制御方法を実行させるためのプログラム, 該プログラムを記録したコンピュータ可読な記憶媒体および情報表示のためのグラフィカル・ユーザ・インタフェース・システム」, 特開 2004-102428, (2004).

○研究助成の受け入れ状況

文部科学省科学技術振興調整費新興分野人材養成

「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」(代表：相田 美砂子)

文部科学省新世紀重点研究創生プラン・タンパク 3000 プロジェクト

「神経系をはじめとする生命維持に主要な蛋白質の構造機能相関に関する基盤確立」

(平成 14 年－18 年)(代表：片柳 克夫)

文部科学省科学研究費補助金(基盤研究(A)(2))

「環境刺激(放射線や活性酸素)による直接および間接的 DNA 損傷生成のメカニズム」

(代表：相田 美砂子)

文部科学省科学研究費補助金(基盤研究(C)(2))

「基底関数欠損誤差(BSSE)を排除した分子間相互作用エネルギー」(代表：岩田 末廣)

文部科学省科学研究費補助金(基盤研究(C)(2))

「ケイ素の特性を活かした選択的オレフィン合成反応の開発と応用」(代表：小島 聡志)

文部科学省科学研究費補助金(萌芽研究)

「パーツ並べ変えタンパク質の X 線解析による新しいバイオインフォマティクス基盤の確立」

(代表：片柳 克夫)

文部科学省科学研究費補助金(若手研究(B))

「時空間情報をもつデータベースからの頻出パターン発掘アルゴリズムの研究」

(代表：森本 康彦)

○学界ならびに社会における活動

・講演会・講習会の講師

相田 美砂子

- 1) CBI 学会人材育成シンポジウム「先端的学際領域の専門教育と仕事の機会」,
化学会館(東京), 2004 年 8 月 18 日,
“広島大学における『ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム』”
- 2) 科学技術振興調整費シンポジウム「未来を拓く科学技術」,
安田講堂(東京), 2004 年 10 月 20 日,
“広島大学における新興分野人材養成の取り組み”

山本 竜也

- 1) 質量分析講習会(日本質量分析学会主催),
千里ライフサイエンスセンター(大阪), 2004 年 11 月 24～25 日
“H/D 交換法による蛋白質高次構造解析”

石野 洋子

- 1) 産総研ナノバイオ人材育成セミナー,
産業総合研究所・関西センター, 2004 年 10 月 8 日
“工学と生物学への Informatics: 人工知能の視点から”
- 2) ゲノムリテラシー講座「プロテオミクスにおける IT 技術」,
サイエンスプラザ(東京), 2004 年 12 月 3 日
講義: “プロテオームデータの更なる活用ーゲノム配列へのマッピングー”
実習: “プロテオミクスにおけるデータベース検索と情報処理”

・討論会の組織委員

相田 美砂子

- 1) 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員(2003－2004)
- 2) 第 8 回理論化学討論会実行委員長(2003－2004)
- 3) 第 1 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員長(2004)

吉田 弘

- 1) 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2003-2004)

松原 世明

- 1) 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2004)

榮 慶丈

- 1) 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2003-2004)
- 2) 第8回理論化学討論会実行委員 (2003-2004)
- 3) 第1回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員会委員 (2004)

原田 隆範

- 1) 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2004)

森本 康彦

- 1) 日本ソフトウェア科学会 第4回データマイニングワークショップ プログラム委員 (2004)

・学協会役員, 委員

相田 美砂子

- 1) 日本化学会情報化学部会幹事 (1996-現在)
- 2) 日本化学会中国四国支部幹事 (2002-現在)
- 3) 情報計算化学生物学会 (CBI 学会) 理事 (2002-現在)
- 4) 岡崎国立共同研究機構計算科学センター運営委員会委員 (2000-2001)
- 5) 日本生物物理学会「生物物理」編集委員 (2003-2004)

岩田 末廣

- 1) 慶応義塾大学大型研究助成審査委員 (1994-現在)
- 2) 山田科学財団審査員 (2001-現在)
- 3) 仁科記念財団選考委員 (2002-現在)
- 4) 林女性自然科学者研究助成基金選考委員 (2002-現在)
- 5) 21 世紀 COE プログラム 分野別審査・評価部会 化学・材料専門委員 (2002, 2004)

神沼 二眞

- 1) 情報計算化学生物学会 (CBI 学会) 理事 (2000-現在)
- 2) CBI Journal 刊行委員会顧問 (2001-現在)

片柳 克夫

- 1) 日本学術振興会「回折構造生物第169委員会」委員 (2000-現在)
- 2) 大阪大学蛋白質研究所共同研究員 (2001-現在)

森本 康彦

- 1) 日本ソフトウェア科学会 データマイニング研究会 主査 (2000-2004)
- 2) 情報処理学会 中国支部幹事 (2003-現在)

小澤 孝一郎

- 1) 広島県薬剤師会理事 (1999-現在)
- 2) 広島県薬剤師会薬局実習受入実行委員会委員 (1999-現在)
- 3) 広島県薬剤師会在宅服薬管理対策特別委員会委員 (2004-現在)
- 4) 日本薬学会中四国支部幹事 (1999-現在)
- 5) 日本薬学会広報委員会委員 (2004-現在)
- 6) FIP Academic Pharmacy section board member (2004-現在)
- 7) 長期実務実習を潤滑に進めるための教育者グループメンバー (2004-現在)
- 8) 共用試験 CBT 内容検討委員会委員・作業トライアルチームメンバー (2004-現在)
- 9) 共用試験 OSCE トライアル委員会委員・作業トライアルチームメンバー (2004-現在)

2. 化学科

2-1. 化学科の構成

2-1-1. 化学科の教員

化学科は化学専攻および数理分子生命理学専攻の化学系の教員が併任している。化学科授業科目担当の教員（平成17年3月1日現在）および平成16年度の非常勤講師を次にあげる。

職	氏名	所属
教授	相田 美砂子	化学専攻分子反応化学講座
	井上 克也	化学専攻分子構造化学講座
	江幡 孝之	化学専攻分子構造化学講座
	大方 勝男	化学専攻分子反応化学講座
	大野 啓一	化学専攻分子反応化学講座
	月向 邦彦	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	齊藤 昊	化学専攻分子反応化学講座（5月死去）
	谷本 能文	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	平田 敏文	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	深澤 義正	化学専攻分子構造化学講座
	藤原 照文	化学専攻分子構造化学講座
	舟橋 重信（非常勤）	名古屋大学大学院理学研究科
	三島 正章（非常勤）	九州大学先端物質化学研究所
	三吉 克彦	化学専攻分子構造化学講座
	山本 陽介	化学専攻分子反応化学講座
助教授	石橋 孝章	化学専攻分子反応化学講座
	泉 俊輔	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	岡田 和正	化学専攻分子反応化学講座
	片柳 克夫	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	河内 敦	化学専攻分子反応化学講座
	小島 聡志	化学専攻分子反応化学講座
	田林 清彦	化学専攻分子反応化学講座
	塚原 聡	化学専攻分子構造化学講座
	中島 覚	アイソトープ総合センター
	灰野 岳晴	化学専攻分子構造化学講座
	藤原 好恒	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	水田 勉	化学専攻分子構造化学講座
	山田 康治	化学専攻分子構造化学講座
	吉田 弘	化学専攻分子構造化学講座（1月死去）
助手	芦田 嘉之	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	岩本 啓	化学専攻分子構造化学講座
	大木 寛	化学専攻分子構造化学講座
	大前 英司	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	岡本 泰明	化学専攻分子構造化学講座
	勝本 之晶	化学専攻分子反応化学講座
	久保 和幸	化学専攻分子構造化学講座
	高木 隆吉	化学専攻分子反応化学講座
	高橋 修	化学専攻分子反応化学講座
	仲 一成	化学専攻分子反応化学講座
	平賀 良知	化学専攻分子反応化学講座
	福原 幸一	化学専攻分子構造化学講座
	藤原 昌夫	数理分子生命理学専攻生命理学講座

2-1-2. 化学科の運営

化学科の運営は、化学科長を中心にしておこなわれている。副化学科長および化学科長補佐がそれを補佐し、副化学科長は次期学科長予定者とする。

平成16年度化学科長 相田 美砂子
 副化学科長 藤原 照文
 化学科長補佐 水田 勉

また、化学科の円滑な運営のために各種委員会等が活動している。平成16年度の各種委員会の委員一覧を次にあげる。

図書委員	◎深澤 石橋 小島 田林 山田 灰野 福原 藤原（好）
化学実験委員	◎岡田 久保 大木 勝本 藤原（昌） 大前 岩本
自己点検・評価委員	深澤 三吉
教務問題検討委員	◎小島 谷本 藤原（照） 山本 岡田 山田 相田
紀要委員（2年）	月向
理学部計算機教育システム運営委員	高橋
野外研修企画委員	◎河内 相田 勝本 高木 芦田
当番教室	生物化学研究グループ
廃液処理指導員	福原 岡田 石橋
危険薬品庫管理者	藤原（照） 高木
就職担当	大野 H15年10月～H16年9月末 相田 H16年10月～H17年9月末

◎は委員長

2-2. 化学科における学部教育

2-2-1. 教育目標と入学者受入方針

【1】教育目標

化学は、物質科学の中心を占める基幹学問として、また、生命科学の複雑で精緻な世界を、分子およびその集合体レベルで解明するための基盤として、自然科学の中でますますその重要性を増している。化学科ではこのような時代に対応するため、化学の基盤を体系的に身に付けさせた上で、応用を含めた幅広く深い知識と問題解決能力を習得させることを教育目標とする。特に、基礎実験技術の習得を含めた体系化した教育を行う。また、環境問題や情報化時代に対応した化学教育の充実を図り、生命科学分野の基礎教育を充実させ、多様な科学の発展に適応できる広い視野を持った人材を育成する。

一方、学生の学習意欲や能力の多様化の問題を、個性の発現の好機ととらえる。各学生の指向や個性を考慮した教育指導を行い、学生の顔の見える教育というスローガンを掲げる。

具体的には、以下の目標を設定する。

- (1) 学生と教員の交流を促進し、各学生の生活指導を含めた一貫教育を行う。
- (2) 主要な化学分野の基礎の体系化を図る。
- (3) 学生実験を重視し、幅広い分野で、最新の科学技術の発展に対応できる実験技術を習得させる。
- (4) 情報化・国際化に対応した教育を行う。

【2】アドミッションポリシー

化学科では次のような入学者受け入れ方針を掲げている。

- 1) 真理を探究することの好きな人。
- 2) 好奇心の旺盛な人。
- 3) 化学の好きな人。
- 4) 新しいことに挑戦したいと思っている人。

2-2-2. 在籍学生数とチューター

【1】平成16年度化学科在籍学生数

平成16年5月1日現在

入 学 年 度	在 籍 学 生 数
平成16年度	60(13)
平成15年度	70(19)
平成14年度	59(24)
平成13年度	62(20)
平成12年度	7(0)
平成11年度	1(0)
合 計	259(76)

() 内は女子で内数

【2】チューター

入 学 年 度	チューター
平成16年度	相田, 水田
平成15年度生	大野, 吉田
平成14年度生	松浦, 岡田
平成13年度生	奥田, 灰野
平成12年度生	深澤, 小島
平成11年度生	三吉, 青木
平成10年度生	谷本, 藤原(照)

2-2-3. 平成16年度化学科開講授業科目

科目区分	開設期	選／必	授業科目名	担当教員	授業のキーワード
教養的教育	1 前	必修	教養ゼミ	深澤, 谷本, 月向, 三吉, 山本, 相田	化学的情報の収集・整理・提供
教養的教育	1 前	必修	情報活用演習	吉田	コンピューター, インターネット, 電子メール, WWW
教養的教育	3 前	必修	化学英語演習	相田, 塚原, 泉	
専門基礎	1 前	他学科用	化学概説 A	谷本	
専門基礎	1 後	他学科用	化学概説 B	山本	有機化学
専門基礎	1 前	必修	基礎化学 A	片柳	エネルギー保存の法則, 不確定性原理, シュレーディンガー方程式
専門基礎	1 前	必修	基礎化学 B	大方	有機化学, 命名法, 官能基, 立体化学, 有機反応, 構造効果
専門基礎	1 後	必修	基礎物理化学	藤原 (好)	化学熱力学, 化学ポテンシャル, 平衡
専門基礎	1 後	必修	基礎無機化学	三吉	無機化合物の結合と構造, 酸・塩基, 酸化・還元
専門基礎	1 後	必修	基礎有機化学	小島	有機電子論, 反応機構, 脂肪族, 付加反応, 求核置換反応, 脱離反応
専門	3 後	選択	先端化学	相田	先端化学, 卒業研究ガイダンス
専門	2 前	必修	物理化学 I	岡田	シュレーディンガー方程式, 境界条件, 調和振動子, 剛体回転子, オービタル
専門	2 後	必修	物理化学 II	田林	ボルツマン分布, 分配関数, 分子衝突, 反応速度, 反応機構
専門	2 後	必修	物理化学 III	吉田	原子構造, 分子構造, 分光学, 量子化学
専門	2 前	必修	無機化学 I	山田	最密充填, 結晶構造, 化学結合, X 線回折, 電子状態,
専門	2 前	必修	無機化学 II	塚原	化学量論, 化学平衡, 酸塩基, 酸化還元, 錯形成, 沈殿生成
専門	2 後	必修	無機化学 III	三吉	ウエルナー型金属錯体の結合, 構造, 反応性
専門	2 前	必修	有機化学 I	山本	アルコール, エーテル, フェノール, アミン
専門	2 前	必修	有機化学 II	灰野	カルボニル化合物, 炭素陰イオン
専門	2 後	必修	有機化学 III	深澤	芳香族, 複素環, 求電子置換, 求核置換, 電子環状反応
専門	2 前	必修	物理化学演習 I	片柳, 藤原 (好), 藤原 (昌), 福原, 大前, 仲	熱力学, 化学平衡, 相平衡, コンピューター・プログラミング
専門	2 後	必修	物理化学演習 II	田林, 吉田, 高橋, 岡田, 勝本	波動方程式, 原子スペクトル, 分子軌道法, 分配関数, 衝突頻度, 反応速度

科目区分	開設期	選／必	授業科目名	担当教員	授業のキーワード
専門	2 後	必修	無機化学演習	三吉	無機化学, 錯体化学, 分析化学
専門	2 後	必修	有機化学演習	大方	有機化学, 演習
専門	3 前後	必修	化学実験	岡田	化学実験, 無機・分析化学, 物理化学, 有機・生物化学
専門	4 前後	必修	卒業研究	各指導教員	課題研究
専門	3 前	選択	反応動力学	齊藤	分子衝突, ポテンシャルエネルギー, 遷移状態, 活性化エネルギー, 反応分子数
専門	3 前	選択	分子構造化学	江幡	分子構造, 分光法, 回転スペクトル, 振動スペクトル
専門	3 前	選択	量子化学	相田	電子状態理論, 分子軌道法, 計算化学
専門	3 後	選択	生体高分子化学	月向	生体高分子, 蛋白質, 構造, 安定性, 機能, 水和
専門	3 後	選択	分子光化学	谷本	電磁波, 電子スペクトル, 励起状態, 光化学反応
専門	3 後	選択	集積化学	大野	化学結合, 分子間相互作用, 分子認識, 自己組織化, 超分子
専門	3 前	選択	無機固体化学	井上	固体物性, 誘電・伝導・磁性体, 相転移
専門	3 前	選択	機器分析化学	藤原 (照)	溶媒抽出, イオン交換法, 分光分析法, 電気化学分析法
専門	3 後	選択	有機金属化学	水田	遷移金属, 錯体, 配位子, 触媒
専門	3 後	選択	放射化学	中島	放射線, 放射性同位元素, 化学状態
専門	2 後	選択	生物構造化学	片柳	蛋白質, 核酸, 分子構造, 回折法, 分光法, X線構造解析
専門	2 後	選択	生体物質化学	泉	蛋白質, 脂質, 糖, 生理活性物質, 生体構築物質, 生体機能物質
専門	3 前	選択	構造有機化学	深澤	立体化学, 立体配座, 高歪み化合物, 機能性物質
専門	3 前	選択	生物化学	平田	生体反応, 生合成, 酵素化学, 生体機能化学
専門	3 後	選択	反応有機化学	山本	転位反応, 軌道相互作用, Woodward-Hoffmann 則
専門	3 後	選択	天然物有機化学	大方	天然物, 有機合成, 不斉合成, 光学活性, 生合成, 全合成
専門	2 後	選択	有機分析化学	河内	構造解析, 機器分析, 核磁気共鳴 (NMR), 質量分析法 (MS), 赤外分光法 (IR)

平成 16 年度集中講義

舟橋 重信（名古屋大学大学院理学研究科教授）

授業科目名： 分析化学特論（3・4 年次生対象）

（担当：化学専攻分子構造化学講座分析化学研究グループ）

三島 正章（九州大学先端物質化学研究所教授）

授業科目名： 物理有機化学（3・4 年次生対象）

（担当：化学専攻分子反応化学講座天然物有機化学研究グループ）

2-2-4. 担当授業科目一覧

平成16年度担当授業科目					
職	氏名	講義	演習	化学 実験	卒業 研究
教授	相田 美砂子	教養ゼミ, 先端化学, 量子化学	化学英語演習		◎
	井上 克也	無機固体化学			
	江幡 孝之	分子構造化学			◎
	大方 勝男	基礎化学 B, 天然物有機化学	有機化学演習		◎
	大野 啓一	集積化学			◎
	月向 邦彦	教養ゼミ, 生体高分子化学			◎
	齊藤 昊	反応動力学			◎
	谷本 能文	教養ゼミ, 化学概説 A, 分子光化学			◎
	平田 敏文	生物化学			◎
	深澤 義正	教養ゼミ, 有機化学 III, 構造有機化学	有機化学演習		◎
	藤原 照文	機器分析化学	無機化学演習		◎
	舟橋 重信	分析化学特論			
	三島 正章	物理有機化学			
	三吉 克彦	教養ゼミ, 基礎無機化学, 無機化学 III	無機化学演習		◎
	山本 陽介	教養ゼミ, 化学概説 B, 有機化学 I, 反応有機化学			◎
助教授	石橋 孝章			○	◎
	泉 俊輔	生体物質化学	有機化学演習	○	◎
			化学英語演習		
	岡田 和正	物理化学 I	物理化学演習 II 分担	◎	◎
	片柳 克夫	基礎化学 A, 生物構造化学	物理化学演習 I 分担	○	◎
	河内 敦	有機分析化学	有機化学演習	○	◎
	小島 聡志	基礎有機化学		○	◎
	田林 清彦	物理化学 II	物理化学演習 II 分担	○	◎
	塚原 聡	無機化学 II	化学英語演習	○	◎
	中島 覚	放射化学			
	灰野 岳晴	有機化学 II		○	◎
	藤原 好恒	基礎物理化学	物理化学演習 I 分担	○	◎
	水田 勉	有機金属化学		○	◎
	山田 康治	無機化学 I		○	◎
	吉田 弘	物理化学 III	情報活用演習, 物理化学演習 II 分担	○	◎
助手	芦田 嘉之			○	○
	岩本 啓			○	○
	大木 寛			○	○
	大前 英司		物理化学演習 I 補助	○	○
	岡本 泰明			○	○
	勝本 之晶		物理化学演習 II 補助	○	○
	久保 和幸			○	○
	高木 隆吉			○	○
	高橋 修		物理化学演習 II 補助	○	○
	仲 一成		物理化学演習 I 補助	○	○
	平賀 良知			○	○
	福原 幸一		物理化学演習 I 補助	○	○
	藤原 昌夫		物理化学演習 I 補助	○	○
			○ 分担・補助	◎ 担当	

2-2-5. 平成16年度新入生用履修要領

化学科では専門的教育科目が体系的かつ効果的に履修できるように、専門的教育科目受講基準を定めている。科目の履修に当たっては、受講基準とともに次の事項に十分留意すること。

1. 必修の授業科目は、授業科目履修表に定められた年次に修得しておくことが望ましい。未修得科目が生じた場合には、次年次の授業科目と開講時間が重なるために受講できない場合があり、留年の原因となる。重なった場合には、未修得科目を優先して履修することが望ましい。
2. 受講基準1により化学実験を履修することができない場合には、卒業が遅れることになる。この場合でも、化学実験以外の授業科目は履修することができるが、未修得の必修科目の履修を優先させなければならない。
3. 教養的教育科目は3年次前期(5期)までに修得しておかないと、受講基準2により卒業研究が履修できない場合がある。
4. 専門基礎科目のうち、「基礎理学科目」としては物理学概説A, Bを履修することが望ましい。「基礎理学科目」の修得単位は専門科目(選択)の単位に振り替えることができない。

化学科専門的教育科目受講基準

1. 化学実験(5, 6期)を履修するためには、次に示す単位数以上を修得していなければならない。(括弧内の数字は、その時点までに修得可能な単位数を表す。)

教養ゼミ	2単位(2)	個別科目	16単位*1(18)
外国語科目	9単位(10)	スポーツ実習科目	2単位(2)
情報科目	2単位(2)	専門基礎科目	10単位(14)
パッケージ別科目	6単位(8)	専門科目(必修)	16単位(22)

*1 物理学実験、化学実験法・同実験、および生物学実験または地学実験はすべて修得していること。

2. 卒業研究(7, 8期)を履修するためには、次に示す単位数以上を修得していなければならない。(括弧内の数字は、その時点までに修得可能な単位数を表す。)

教養ゼミ	2単位(2)	個別科目	18単位(19)
外国語科目	10単位(10)	スポーツ実習科目	2単位(2)
情報科目	2単位(2)	専門基礎科目	14単位(14)
総合科目	2単位(2)	専門科目(必修)	32単位(34)
パッケージ別科目	8単位(8)	専門科目(選択)	21単位(27)

上記受講基準1および2について、『広島大学理学部における早期卒業認定に関する内規』第3条第2項により適格の認定を受けた学生(早期卒業希望者)はこの限りではない。詳細についてはチューターと相談のこと。

3. 授業担当教員の下承が得られれば、化学科で開講する上位セメスターの講義を履修することができる。
4. 特別講義(一定期間に集中的に開講される講義)で修得した単位のうち、化学特別講義の2単位までを専門科目(選択)の要修得単位とすることができる。
5. 理学部他学科の授業および他学部で開講される自然科学系専門的教育科目の授業の単位は、8単位までを専門科目(選択)の要修得単位とすることができる。ただしその場合は、化学科の承認が必要となる。受講に先立って、チューターに相談すること。

付記 この受講基準は、平成16年度以降の入学生に適用する。

2-2-6. 平成16年度新入生用化学科授業科目履修表



この表に掲げる授業科目の他、他学部又は他大学等で開講される授業科目を履修することができ、化学科が認めるものについては、修得した単位を卒業要件の単位に算入することができる。

注1. 英語の履修については、上記の他、短期語学留学等による「英語圏フィールドリサーチ」、自学自習による「マルチメディア 英語演習」を履修することも可能である。また、外国語技能検定試験による単位認定制度もある。詳細は、学生便覧に掲載の教養的教育の英語に関する項を参照のこと。

注2. 専門的教育科目の要修得単位数83を充たすためには、必修科目56単位に加えて、選択科目のうちから27単位以上を修得することが必要である。

このうち、21単位は、この表に掲げる化学科開講の専門的教育科目の選択科目のうちから修得することが必要である。

注3. 基礎理学科目の授業科目及び履修方法、先端理学科目については別表に示す。

注4. 専門科目の「化学特別講義」は、一定期間中に集中的に開講される。2単位までを専門科目（選択）の要修得単位とすることができる。

注5. 8単位までを専門科目（選択）の要修得単位とすることができる。

別表

基礎理学科目

【基礎理学科目】は、下記の授業科目から2科目を選択履修し、4単位を修得すること。ただし、学科により科目の選択方法が違うので注意すること。												
数学概説、物理学概説A、物理学概説B、化学概説A、化学概説B、生物科学概説A、 生物科学概説B、地球惑星科学概説A、地球惑星科学概説B												
【履修方法】は、下記のとおりとする。												
数	—	学	—	—	科	1	数学概説と、他の1科目を選択履修					
物	—	理	—	学	—	科	1	物理学概説A及び物理学概説B以外の2科目を選択履修				
化	—	学	—	—	科	1	化学概説A及び化学概説B以外の2科目を選択履修					
生	—	物	—	学	—	科	1	全科目から2科目を選択履修				
地	球	惑	星	シ	ス	テ	ム	学	科	1	全科目から2科目を選択履修	

先端理学科目

【先端理学科目】は、下記の授業科目から1科目を選択履修し、2単位を修得すること。	
先端数学、先端物理科学、先端化学、先端生物学、先端地球惑星科学	

2-2-7. 卒業研究

【1】平成16年度卒業研究生の各研究グループ配属者数

研究グループ名	卒研究生数
化学専攻分子構造化学講座	
構造物理化学研究グループ	4
固体物性化学研究グループ	5
錯体化学研究グループ	3
分析化学研究グループ	4
構造有機化学研究グループ	6
化学専攻分子反応化学講座	
反応物理化学研究グループ	2
反応有機化学研究グループ	5
天然物有機化学研究グループ	6
集積化学研究グループ	6
量子化学研究グループ	4
数理分子生命理学専攻	
物理環境化学研究グループ	5
生物化学研究グループ	4
分子生物物理学研究グループ	5
計	59

【2】平成16年度の卒業研究生と卒業研究題目

(括弧内は所属研究グループ名)

生藤 有希子	1-ヘキサノール-シクロヘキサン中の逆ミセルを吸着させたシリカゲルを HPLC 固定相とする有機化合物の分離挙動 (分析化学)
池田 綾	ピンサー型カルボジホスホラン配位子を持つ白金錯体とアルキンならびにイオウとの反応 (錯体化学)
石倉 正志	シチジンデアミナーゼの反応機構についての理論化学的研究 (量子化学)
伊藤 泰宏	ゾウリムシの泳動に対する強磁場効果 (物理環境化学)
梅田 康広	(2S,6S)-2,4,6-トリベンジルピペラジンの合成と不斉源としての検討 (天然物有機化学)
大塚 美樹	生体触媒による不斉反応-エノン還元酵素の発現と構造解析 (生物化学)
大山 隆志	コインシデンス法を用いた Kr 2 p イオン化状態からの多価イオン生成過程の研究 (集積化学)
沖村 真理	マトリックス単離赤外分光法による酸化チタン光触媒反応の解析 (集積化学)
越智 康博	2次元キラル磁性体 $[\text{Mn}\{(\text{S})\text{-pn}\}(\text{H}_2\text{O})][\text{Cr}(\text{CN})_6](\text{H}_2\text{O})$ の光学的性質 (固体物性化学)
尾野上康裕	ホウ素原子置換芳香族化合物のオルトメタル化に関する研究 (反応有機化学)
金子 将明	混合原子価錯体 (メタロセン) $[\text{M}^{\text{II}}\text{M}^{\text{III}}(\text{dto})_3]$ ($\text{M}^{\text{II}}=\text{Co}, \text{Cu}, \text{Fe}, \text{Mn}, \text{Zn}; \text{M}^{\text{III}}=\text{Cr}, \text{Fe}; \text{dto}=\text{C}_2\text{O}_2\text{S}_2$) の合成と性質 (固体物性化学)
神谷 幸男	液液界面に形成するテトラフェニルポルフィン会合体の偏光特性による顕微イメージングと解析 (分析化学)
北島 幸太郎	質量分析法による核内タンパク質のプロテオミクス-イオントラップ・TOF 型質量分析法を用いたヒストンの翻訳後修飾の解明 (生物化学)
木村 通	オキサアルカンチオール関連化合物の熱物性 (構造物理化学)
桑田 知香	生体触媒による不斉反応-植物培養細胞を用いたエノン類の生物変換 (生物化学)
小松 裕之	2-Butoxyethanol の水和に伴う CH 伸縮バンド変化の解析 (集積化学)
小山 ふみ	光反応を用いた磁場中の溶液対流のその場観察 (物理環境化学)
小山 美沙緒	Poly(<i>N</i> -isopropylacrylamide) の立体規則性によるアミドバンドの変化 (集積化学)
近藤 あさ子	水素結合による交差共役シクロヘキサジエノンの Diels-Alder 反応における加速効果に関する研究 (天然物有機化学)
坂井 舞子	イミダゾリウム塩におけるプロトン伝導性と伝導機構 (固体物性化学)
迫 亜由美	アルキル鎖で結ばれた発色団間の振動エネルギー移動の直接観測 (構造物理化学)
末原 道教	溶液内における巨大な単一 DNA 分子の動的挙動の顕微蛍光測定 (分析化学)

末益 匠	シランカップリング法による芳香族有機単分子膜の作製と分光学的研究（量子化学）
鈴木 麻希	シンコニジンを触媒とした不斉シクロプロパン化反応の検討（天然物有機化学）
高野 竜士	カテコールを2つ持つカリックス〔4〕アレーンの金属による集合挙動（構造有機化学）
高橋 紅奈	植物の生体防御機能ーペルオキシダーゼ関連遺伝子群のクローニングと発現解析（生物化学）
田中 宣志	5 価のリンをもつパラダサイクルを触媒としたH e c k 反応と不斉反応への展開（錯体化学）
田中 裕子	オキサアルカン位置異性体の構造と熱物性との相関（構造物理化学）
谷 厚志	ホウ素およびケイ素を中心原子とした多中心型アート錯体の合成と構造（反応有機化学）
田谷 幸一	リパーゼを用いた 1,3-プロパンジオール類の非対称化及び不斉アセチル化反応に関する研究（天然物有機化学）
堤 大輔	パーキンソン病原因タンパク質シンフィリンー 1 の結晶解析に向けた大量調製（分子生物物理学）
土居 英男	オレフィンメタセシスを用いた〔5〕カテナンの合成の試み（構造有機化学）
中辻 惇也	カルボキシラートアニオンを配位子とする超原子価 5 配位炭素化合物の合成の試み（反応有機化学）
中村 千穂	深海微生物 <i>Moritella japonica</i> DSK1 のジヒドロ葉酸還元酵素に関する研究（分子生物物理学）
夏川 ゆかり	トレハロースによるタンパク質の構造安定化に関する熱力学的研究（分子生物物理学）
橋本 貴世	生体関連分子のジェット分光のための新規高温ノズルの開発（構造物理化学）
長谷川 傑	チオシアン酸メチルの内殻励起・光解離ダイナミクスの研究（集積化学）
馬場 敬之	アセトニトリルのとりこみによる鉄ーホスフィンイミド錯体のメタラサイクル化（錯体化学）
東川 大志	[Mo ^v (CN) ₈] ³⁻ を用いた新規キラル磁性体の合成と物性（固体物性化学）
日高 裕輔	〔2, 2〕オルトシクロファン骨格を有する分子ピンセットにおける分子内 C H / π 相互作用に関する研究（構造有機化学）
福岡 博之	光学活性な環状アミドでキャップしたカリックス〔5〕アレーンホストの合成（構造有機化学）
福重 隆之	二次構造パーツを丸ごと並べ換えた変異体タンパク質における基質複合体の結晶構造（分子生物物理学）
福田 克哲	4つのビピリジン配位子をもつカリックスレゾルシン〔4〕アレーンキャビタンドの合成（構造有機化学）

- 藤井 絵美 シンコナルカロイドから誘導される四級アミンを用いた不斉Michael反応に関する研究 (天然物有機化学)
- 前田 俊樹 赤外紫外和周波発生分光装置の開発 (量子化学)
- 前原 淳之 イリド配位子を用いた16族および17族元素アート錯体の合成研究 (反応有機化学)
- 松下 孝也 メタル炉加熱気化導入法を用いたICP-AESによる鉄鋼試料中の微量亜鉛の直接定量 (分析化学)
- 松村 展孝 テトラフェニルポルフィリン(TPP)の磁気配向 (物理環境化学)
- 山田 朋範 Direct ab initio MD法を用いた分子内振動の非調和性についての研究: 三原子分子 (量子化学)
- 山田 浩綱 アントラセン骨格を有する遷移金属化合物の合成と応用 (反応有機化学)
- 山根 沙織 1,2-Dibutoxyethane($C_4E_1C_4$)が側鎖に導入された新規アクリル系高分子の合成 (集積化学)
- 山之内彩子 ギ酸クラスターの構造と内殻励起吸収スペクトル-密度汎関数法による検討- (反応物理化学)
- 山平 和也 赤潮プランクトン *Heterocapsa circularisquama* のカキに対する生理活性物質の単離と構造解析 (天然物有機化学)
- 山本 恵輔 ギ酸クラスターの内殻励起光化学過程 (反応物理化学)
- 山本 昌史 ペンタセンの真空蒸着の強磁場効果 (物理環境化学)
- 八和田雪美 分子ピンセット骨格を有するロタキサンの合成研究 (構造有機化学)
- 由利 敬亮 磁場による二クロム酸カリウム結晶の3次元形態的キラリティー制御 (物理環境化学)
- 脇本 直樹 層状化合物 $RTiNbO_5$ ($R=NH_4, CH_3NH_3$) における層間分子の動的挙動 (固体物性化学)
- 渡部 浩史 質量分析法によるジヒドロ葉酸還元酵素ループ部位欠失変異体のH/D交換の研究 (分子生物物理学)

2-2-8. 卒業生の進路

平成16年度化学科卒業生進路状況

(平成16年4月現在)

卒業 者 総 数	就 職 者							進 学	そ の 他	
	一 般 職					教 職			研 究 生	そ の 他
	製 造 業	小 売 業	サ ー ビ ス 業	公 務 員	小 計	高 等 学 校 教 諭	小 計			
59(20)	4(0)	2(0)	3(2)	1(0)	10(2)	1(1)	1(1)	42(15)	0	6(2)

() 内は女子で内数

報告書作成ワーキンググループ

三吉 克彦	(平成16年度化学科自己点検・評価委員)
岩本 啓	(化学専攻分子構造化学講座)
岡本 泰明	(化学専攻分子構造化学講座)
勝本 之晶	(化学専攻分子反応化学講座)