

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17年度
(2005年度)

平成18年7月

目 次

はじめに.....	1
1 化学専攻.....	2
1-1 専攻の理念と目標.....	2
1-2 専攻の組織と運営.....	2
1-2-1 教職員.....	5
1-2-2 教職員の異動.....	6
1-3 専攻の大学院教育.....	7
1-3-1 大学院教育の目標とアドミッション・ポリシー.....	7
1-3-2 大学院教育の成果とその検証.....	8
1-3-3 大学院生の国内学会発表実績.....	12
1-3-4 大学院生の国際学会発表実績.....	12
1-3-5 修士論文発表実績.....	13
1-3-6 博士学位.....	14
1-3-7 TA の実績.....	15
1-3-8 大学院教育の国際化.....	15
1-4 専攻の研究活動.....	16
1-4-1 研究活動の概要.....	16
1-4-2 研究グループ別の研究活動の概要，発表論文，講演等.....	22
分子構造化学講座.....	22
構造物理化学研究グループ.....	22
固体物性化学研究グループ.....	25
錯体化学研究グループ.....	30
分析化学研究グループ.....	33
構造有機化学研究グループ.....	37
分子反応化学講座.....	40
反応物理化学研究グループ.....	40
反応有機化学研究グループ.....	44
天然物有機化学研究グループ.....	49
集積化学研究グループ.....	53

量子化学研究グループ	58
1-4-3 各種研究員と外国人留学生の受入状況	62
1-4-4 研究助成金の受入状況	63
1-4-5 学界ならびに社会での活動	64
1-5 その他特記事項.....	68
1-5-1 量子生命科学プロジェクト研究センター Center for Quantum Life Sciences (QuLiS).....	68
2 化学科.....	73
2-1 学科の理念と目標.....	73
2-2 学科の組織.....	74
2-3 学科の学士課程教育.....	76
2-3-1 アドミッション・ポリシーとその目標	76
2-3-2 学士課程教育の理念と達成のための具体策.....	76
2-3-3 学士課程教育の成果とその検証	77
2-3-4 卒業論文発表実績	84
2-4 その他特記事項.....	86
2-4-1 学生の表彰	86
報告書作成ワーキンググループ	87

はじめに

平成 17 年度化学専攻長

藤原 照文

平成 17 年度は広島大学も独立行政法人となって 2 年目ということですが、その法人化に伴う色々な混乱はまだ収まっていないように思えます。しかし、化学専攻においては、それ乗り越え、教育・研究を着実に推し進めています。「分子認識と分子設計」および「量子生命科学」に関する研究の推進を、平成 16～21 年度の 6 年間の中期目標としており、平成 17 年度には新たに 3 人の教員が着任してメンバーに加わり、これらの研究を進展させています。

いま、産業界からの指摘として、大学・大学院を卒業・修了した技術系の新人の特徴について、基礎学力の不足、問題設定能力及びオリジナリティの不足（指示待ち体質）、目的意識の欠如と意欲の低下傾向、コミュニケーション力の不足、専門の周辺の知識における幅の狭さなどの意見が出ています。この人材問題の原因がすべて大学・大学院の教育・研究にあるとは言えないかもしれませんが、大学は人材育成の主役であるとして要望と期待が述べられています。広島大学では、教育改革として、到達目標型教育の実現を目標とした学部の教育プログラムの平成 18 年度実施を目指して、その整備が進められてきました。化学科においては、以前から教育の仕組みの改良を重ねてきており、平成 17 年度に主専攻の化学プログラム及び化学と生命副専攻プログラムを完成させました。化学専攻においても従来から基盤教育の改善を進め、学生に幅広い基礎力を身につけさせるために、物理化学・有機化学・無機化学分野における必修科目や英語ヒヤリング科目を設けています。また、狭い領域での研究指導に偏らないように、主・副指導教員制を実施し、さらに学生の海外大学院への短期滞在も進めています。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推進している『ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム』（NaBiT プログラム）では、複数の異なる専門領域の組み合わせにより、新しい価値を創造する融合的素養を身につけさせる大学院教育を行っています。平成 17 年度からは日本学術振興会先端研究拠点事業「新規典型元素化合物の創製とその応用」もスタートし、目的意識と意欲を持ち、自立して研究活動を行う能力を組織的かつ体系的に修得させるための大学院教育も推進しています。国際的活動の 1 つとしては、優秀な外国人留学生を募集することを平成 16 年度から計画し、平成 17 年度に本学の北京研究センターを利用して大学院入試を試行しました。

この報告書は、平成 17 年度における化学科・化学専攻の教育研究活動の成果をまとめたものです。平成 12 年度から毎年行ってきた成果報告書の発行を今回も引き継ぐというものではありませんが、外部からの評価を受け、また自らの点検・評価を踏まえて、今後の教育・研究のさらなる発展につないでいくのに役立つことを願っています。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/>

先端研究拠点事業

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

1. 化 学 専 攻

1－1 専攻の理念と目標

化学専攻の理念・目標は、学部教育を土台として、さらに高度な専門的研究活動に参加することによって現代科学のフロンティアを切り開く実力をもった研究者を養成し、社会の各方面で活躍できる人材を輩出することである。

1－2 専攻の組織と運営

【1】化学専攻の組織

化学専攻では分子構造化学と分子反応化学の二つの大講座において、化学の柱である構造と反応、特にその基礎的研究・教育に重点を置き活動している。分子構造化学講座は構造物理化学、固体物性化学、錯体化学、分析化学、構造有機化学および光機能化学の6つの研究グループ、分子反応化学講座は反応物理化学、反応有機化学、天然物有機化学、集積化学、量子化学および放射線反応化学の6つの研究グループから構成され、お互いに連携を保ちつつ独自の研究を推進している。さらに、理学研究科の数理分子生命理学専攻の生命理学講座は化学系として位置づけられ、化学専攻の研究グループとは学部教育だけでなく、大学院における研究・教育活動においても相補的に活動している。したがって、本理学研究科には15の化学研究のグループが存在し、基礎科学としての化学研究・教育を総合的に行っている。

【2】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17年度化学専攻長	藤原 照文
化学副専攻長	江幡 孝之
化学専攻長補佐	河内 敦

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17年度の各種委員会の委員一覧を次にあげる。

・化学専攻内の各種委員会

エックス線	◎ 水田	山田	河内
障害防止委員	岡田	岩本	平賀

・ 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	相田 藤原（照）
人事交流委員会	藤原（照）
教務委員＊	小島
評価委員	三吉 大野
安全衛生委員	◎● 相田
広報委員＊＊	高橋
大学院委員	相田 藤原（照）
入学者選抜方法検討委員会＊	泉
計算機利用委員	勝本
エックス線障害防止委員	水田
地区防災対策委員	藤原（照）
教育交流委員	石橋
ホームページ委員	岡田
情報セキュリティ委員	高橋
中央廃液処理施設運営委員＊	● 大方

◎は委員長 ●全学委員

＊は 任期２年（H16年度～）

＊＊は任期２年（H17年度～）

・ 化学専攻教員の理学研究科および全学での活動

相田 美砂子	理学部安全衛生委員会委員長	2005
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-
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）	2005
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-
山本 陽介	先端機能物質研究センター運営委員会委員	2005-
大方 勝男	環境安全センター運営委員会委員	2003-
大方 勝男	入学センター会議委員	2004-
小島 聡志	留学生センター運営委員会委員	2004-
小島 聡志	作業環境測定専門委員会委員	2004-
岡田 和正	平和科学研究センター運営委員会委員	2004-
高橋 修	情報メディア教育研究センター 高度科学計算機運用専門委員会委員	2005-
井上 克也	先端機能物質研究センター運営委員会委員	2005-
灰野 岳晴	全学薬品管理システム専門委員会委員	2004-

1－2－1 教職員

平成 18 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	井口	佳哉
助教授	齋藤	健一（併任）
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
助手	秋田	素子
助手	岩本	啓
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	山崎	勝義
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
助教授	中島	覚（併任）
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

事務員	伊野木	真由美
事務補佐員	加藤	道子
事務補佐員	中岡	真梨子

平成17年度の非常勤講師

- 小熊 幸一 (千葉大学工学部教授)
 授業科目名：微量金属の分離濃縮法の進歩と環境・金属分析への応用
 担当：分析化学研究グループ
- 岩田 耕一 (東京大学大学院理学研究科助教授)
 授業科目名：量子化学特論－光と物質の相互作用
 担当：量子化学研究グループ
- 友田 修司 (東京大学大学院総合文化研究科教授)
 授業科目名：量子有機化学「有機反応の選択性を量子化学で考える」
 担当：天然物有機化学研究グループ

1－2－2 教職員の異動

平成17年

- 4月 1日 山崎 勝義 (分子反応化学講座教授)
 新潟大学教育研究院助教授より採用
- 10月 1日 秋田 素子 (分子構造化学講座助手)
 岡崎国立共同研究機構分子科学研究所助手より採用

平成18年

- 2月 1日 井口 佳哉 (分子構造化学講座助教授)
 東京大学大学院総合文化研究科助手より採用
- 3月 31日 山田 康治 (分子構造化学講座助教授)
 日本大学生産工学部教授として転出

1－3 専攻の大学院教育

1－3－1 大学院教育の目標とアドミッション・ポリシー

【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。

1-3-2 大学院教育の成果とその検証

・平成 17 年度化学専攻在籍学生数

(平成 17 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 17 年度	32 (6)	12 (1) [1] <2>
平成 16 年度	31 (10)	4 {1} <1>
平成 15 年度	1	11 (3) [1] {1} <1>
平成 14 年度		3 {1} <1>
合計	64 (16)	30 (4) [2] {3} <5>

() 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

・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 17 年度生	灰野	三吉
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	山田

・平成17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	時	単	時	単	時	単	時	
必修	物理化学概論	2	2							大野、岡田
	無機化学概論	2	2							井上、藤原(照)
	有機化学概論	2	2							大方
	化学特別研究	2	6	2	6	2	6	2	6	各教員
選択	現代英語			2	2					小島
	構造物理化学Ⅰ	2	2							江幡
	構造物理化学Ⅱ			2	2					開講しない
	固体物性化学Ⅰ	2	2							開講しない
	固体物性化学Ⅱ			2	2					開講しない
	錯体化学Ⅰ	2	2							三吉、水田
	錯体化学Ⅱ			2	2					三吉、水田
	分析化学Ⅰ	2	2							藤原(照)、塚原
	分析化学Ⅱ			2	2					藤原(照)、塚原
	構造有機化学Ⅰ	2	2							開講しない
	構造有機化学Ⅱ			2	2					開講しない
	光機能化学			2	2					開講しない
	放射線反応化学	2	2							中島
	量子化学			2	2					相田、石橋
	集積化学	2	2							開講しない
	反応物理化学Ⅰ	2	2							山崎、田林
	反応物理化学Ⅱ			2	2					山崎、田林
	反応有機化学Ⅰ	2	2							開講しない
	反応有機化学Ⅱ			2	2					開講しない
	天然物有機化学Ⅰ	2	2							小島
	天然物有機化学Ⅱ			2	2					大方
	計算情報化学			2	2					松原(特任助教授)
	計算化学演習			2	2					松原(特任助教授)
	物質科学特論			2	2					岩田(特任教授)
	量子情報科学	2	2							神沼(特任教授)
	計算機活用特論	2	2							相田、森本(総合科学部)
	計算機活用演習	2	2							相田、森本(総合科学部)
	構造物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	江幡
	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
	量子化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	相田、石橋
	反応物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	山崎、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、岡田
	量子生命科学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	相田、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17年度は開講しない。

・平成17年度化学専攻開講授業科目

	担当教員	授業のキーワード
物理化学概論	大野, 岡田	振動分光法, 反応速度論
無機化学概論	井上, 藤原 (照)	溶液化学, 溶媒和イオンの構造, 固体化学, 無機固体の構造と物性
有機化学概論	大方	立体化学, 有機反応機構, 分子軌道, 求核置換
現代英語	小島	英語, ヒアリング, 熟語
構造物理化学 I	江幡	レーザー分子分光, 線形, 非線型分光
錯体化学 I	三吉, 水田	角重なり模型による d 軌道のエネルギー評価
錯体化学 II	三吉, 水田	有機金属錯体
分析化学 I	藤原 (照), 塚原	水溶液, ミセル溶液, 非水溶液, 溶媒和, ソルバトクロミズム
分析化学 II	藤原 (照), 塚原	溶液内反応, 溶媒和, 溶媒効果, 表面・界面, 蛍光分光分析法
放射線反応化学	中島	放射線, 放射線利用
量子化学	相田, 石橋	量子力学, 量子化学, 分子軌道法, 分光法
反応物理化学 I	山崎, 田林	素反応速度論, ポテンシャル障壁, 反応座標
反応物理化学 II	山崎, 田林	反応ダイナミックス, ポテンシャルエネルギー, 励起分子
天然物有機化学 I	小島	立体選択性, 不斉合成反応
天然物有機化学 II	大方	天然物, 有機合成, 生理活性, 全合成
計算情報化学	松原	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	松原	量子化学, 計算化学
物質化学特論	岩田	原子間力, 分子間力, 水素結合, 分子クラスター, 金属クラスター, 励起クラスター, イオンクラスター
量子情報科学	神沼	物理学と情報, 量子計算, 情報と生命
計算機活用論	相田, 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	相田, 森本	計算機言語, Java, C, Fortran

・各研究グループの在籍学生数

(平成17年10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	1	2	0	0	0	0
固体物性化学研究グループ	2	3	4	0	1	1
錯体化学研究グループ	2	4	0	0	1	0
分析化学研究グループ	3	2	1	0	0	1
構造有機化学研究グループ	5	6	1	0	1	1
化学専攻分子反応化学講座						
反応物理化学研究グループ	1	3	1	0	0	0
反応有機化学研究グループ	5	7	2	1	0	0
天然物有機化学研究グループ	6	3	2	1	3	0
集積化学研究グループ	3	1	0	1	2	0
量子化学研究グループ	4	1	1	1	3	0
計	32	32	12	4	11	3

・博士課程修了者の進路

(平成18年5月現在)

	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	30(9)	21(9)	0	1(0)	0	4	26(9)	1(0)	0	1(0)	3(0)	0	0
後期修了*	9(2)	3(0)	0	0	0	4(1)	7(1)	1(0)	0	1(0)	—	0	1(1)

() 内は女子で内数

*単位取得退学者を含む。

1－3－3 大学院生の国内学会発表実績

	国内学会 件数
博士課程前期 ⁽¹⁾	8 0
博士課程後期 ⁽²⁾	3 2
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	9

(2005 年度の発表について記載：2005 年 4 月から 2006 年 3 月まで)

⁽¹⁾ 博士課程前期の学生が共同研究者の発表件数

⁽²⁾ 博士課程後期の学生が共同研究者の発表件数

⁽³⁾ 博士課程前期・後期の学生が共に共同研究者の発表件数

1－3－4 大学院生の国際学会発表実績

	国際学会 件数
博士課程前期 ⁽¹⁾	2 3
博士課程後期 ⁽²⁾	1 2
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	6

(2005 年度の発表について記載：2005 年 4 月から 2006 年 3 月まで)

⁽¹⁾ 博士課程前期の学生が共同研究者の発表件数

⁽²⁾ 博士課程後期の学生が共同研究者の発表件数

⁽³⁾ 博士課程前期・後期の学生が共に共同研究者の発表件数

1-3-5 修士論文発表実績

括弧内は所属研究グループ名である。

- 金属配位を用いたコンビナトリアルライブラリーの構築 (構造有機化学)
 逆ミセル吸着界面場を用いて合成したポリアミドを固定相とする新規なLC分離法の開発 (分析化学)
 [3]ロタキサン生成過程における環状分子に導入した相補的な多点水素結合部位の効果 (構造有機化学)
 7-シラベンゾノルボルナジエン誘導体の合成と反応 (反応有機化学)
 スフェランドの新規合成法の開発および超原子価化合物合成の試み (反応有機化学)
 欠陥スピネル型イオン伝導体 LiInBr_4 の動的構造 (固体物性化学)
 16π 骨格を有するオクタアルキルテトラフェニルポルフィリンの合成と構造 (反応有機化学)
 新規不斉補助試薬と化学シフト計算法を用いた二級アルコールの絶対配置決定法の開発 (構造有機化学)
 硫黄原子を配位原子とする新規三座配位子前駆体の合成と超原子価典型元素化合物合成への応用 (反応有機化学)
 Direct ab initio MD 法によるエチレングリコールの構造異性化の経路についての研究 (量子化学)
 $\text{CH}_3\text{I}-(\text{C}_6\text{H}_5\text{F})_n$ クラスターの多光子解離 (反応物理化学)
 ホウ素およびケイ素原子置換基によって安定化されたジメタラ有機金属化合物の合成研究 (反応有機化学)
 鉄-カルボニル-ホスホネート並びに-ホスフィンイミド錯体の CO 還元による籠型ホルミル錯体の合成 (錯体化学)
 リン架橋[1.1]フェロセノファンを配位子とする Pd 錯体を触媒とした Heck 反応 (錯体化学)
 ホスフィンイミド配位子の遷移金属-Cp 間での転位・逆転位反応 (錯体化学)
 Diphospha[2]ferrocenophane の熱による開環反応およびリンの立体反転に対する置換基効果 (錯体化学)
 天然物 Scyphostatin の立体選択的合成研究 (天然物有機化学)
 交流および直流電場内における単一 DNA の動的挙動の顕微蛍光測定と分離への応用 (分析化学)
 ギ酸の単分子熱分解反応における動力学的研究 (反応物理化学)
 アルキル/オキシエチレン/アルキルトリブロック化合物の超高压相転移 (構造物理化学)
 メチルトリフルオロアセテートの酸素内殻励起光化学 (反応物理化学)
 カリックスアレーンでキャップした複数の金属ポルフィリンホスト分子の合成と軸配位子との錯形成挙動 (構造有機化学)
 カリックス[5]アレーンホスト分子による高次フラーレンの高選択的抽出 (構造有機化学)
 連続的 Michael 反応によるビシクロ[3.3.1]ノネノン骨格の構築とその立体選択性に関する研究 (天然物有機化学)
 ゼロ磁場 NMR 測定装置の開発と磁性錯体への応用 (固体物性化学)
 8-Phenylmenthylamine を有するピリジニウム塩によるジアステレオ選択的シクロプロパン化反応の研究 (天然物有機化学)
 $[\text{Fe}(\text{NCX})_2\text{bpa}_2 \cdot \text{guest}](\text{X}=\text{S}, \text{Se}, \text{BH}_3, \text{bpa}=1,2\text{-bis (4-pyridyl) ethane})$ の多様な構造とスピントロニクス現象 (固体物性化学)
 アルコール/水系のラマンスペクトルと noncoincidence 効果 (構造物理化学)
 Berry の擬回転の凍結を目指した新規三座配位子の合成とリン化合物への応用 (反応有機化学)
 分子内にイリド配位子を有する新規高配位ケイ素化合物の合成と構造 (反応有機化学)

1-3-6 博士学位

授与年月日を〔 〕内に記す。

Md. Ruhul Matin 〔平成17年12月5日〕(甲)

Infrared Spectroscopic Studies on Hydration of Short-Chain Poly(oxyethylene) and Salt Effects on the Conformation

(短鎖ポリオキシエチレンの水和とコンホメーションへの塩効果に関する赤外分光学的研究)

主査：大野 啓一 教授

副査：相田 美砂子 教授，江幡 孝之 教授，松浦 博厚 名誉教授

板垣 誠 〔平成18年3月6日〕(甲)

Development of Highly Efficient Catalysts for Asymmetric Cyclopropanation

(高性能な不斉シクロプロパン化反応用触媒の開発)

主査：山本 陽介 教授

副査：深沢 義正 教授，大方 勝男 教授

今村 友紀 〔平成18年3月6日〕(甲)

Syntheses, Structures, and Metal-Coordination Behavior of Phosphorus-Bridged [1.1]Ferrocenophanes

(リン架橋[1.1]フェロセノファンの合成，構造，および配位挙動)

主査：三吉 克彦 教授

副査：山本 陽介 教授，井上 克也 教授

Kubota Kubota Natsuki 〔平成18年3月6日〕(甲)

Structural Study on Some New Secondary Metabolites from Marine Organisms

(海洋生物由来の数種の新規二次代謝産物の構造研究)

主査：深沢 義正 教授

副査：大方 勝男 教授，山本 陽介 教授，内尾 康人 教授(鹿児島大学医学部)

田中 雅人 〔平成18年3月6日〕(甲)

Theoretical Approach to Real System Simulation: Combination of *ab initio* Molecular Orbital Method with Molecular Mechanics, Monte Carlo Method and Molecular Dynamics

(現実系のシミュレーションを目指した理論アプローチ：

非経験的分子軌道法と分子力場法，モンテカルロ法および分子動力学法の結合)

主査：相田 美砂子 教授

副査：大野 啓一 教授，藤原 照文 教授

蘭 春蕾 〔平成18年3月6日〕(甲)

Studies on Esterification of 1,3-Propanediols by a Novel Lipase Isolated from the Yeast *Cryptococcus* spp. S-2

(*Cryptococcus* spp. S-2 酵母菌から単離された新規なリパーゼによる1,3-プロパンジオール類のエステル化反応に関する研究)

主査：大方 勝男 教授

副査：深沢 義正 教授，山本 陽介 教授

1-3-7 TAの実績

化学専攻大学院博士課程後期在学生（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17年度のTA

氏名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
今村 友紀	化学実験	錯体化学	D 3
河口 誉元	化学実験	固体物性化学	D 3
末田 学	化学実験	物理環境化学	D 3
田中 雅人	化学実験	量子化学	D 3
田邊 和久	化学実験	天然物有機化学	D 3
堀内 裕司	化学実験	分子生物物理学	D 2
吉田 祐輔	化学実験	固体物性化学	D 1
増原 直治	化学実験	固体物性化学	D 1
片岡 紘子	化学実験	分析化学	D 1
大久 真幸	化学実験	量子化学	D 1
山口 虎彦	化学実験	反応有機化学	D 1
田中 正洋	化学実験	構造有機化学	D 1
水野 初	化学実験	生物化学	D 1
吉田 智喜	情報活用演習	量子化学	D 3

1-3-8 大学院教育の国際化

化学専攻では国際化に対応するため、ヒアリングを中心とした“現代英語”の講義を開講している。また、さまざまな国際共同研究が行われており、学生が国際学会に参加したり、海外に短期留学している。

1-4 専攻の研究活動

1-4-1 研究活動の概要

・講演会開催実績

日時： 平成17年 4月21日 15:00

場所： 理学部 B305号

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

演題： Magnetism from Molecular Materials, Minerals and Cosmetics

担当： 固体物性化学研究グループ

日時： 平成17年 6月13日 15:00

場所： 理学部 B101号

講師： Zhang BIN 博士 (中国科学アカデミー)

演題： Construction Dual-functional Molecular Crystal from Chain Anion

担当： 固体物性化学研究グループ

日時： 平成17年 6月21日 13:30

場所： 理学部 E002号室

講師： 小熊 幸一 教授 (千葉大学工学部)

演題： 「もの作り社会の環境保全と分析化学の役割」

担当： 分析化学研究グループ

日時： 平成17年 7月22日 16:15

場所： 理学部 E002号室

講師： Prof. Dr. Konrad Seppelt (ベルリン自由大学, ドイツ)

演題： Novel Development in Xenon Chemistry

担当： 反応有機化学研究グループ

日時： 平成17年11月29日 13:30

場所： 理学部 E002号室

講師： 渋谷 一彦 教授 (東京工業大学大学院理工学研究科)

演題： フリーラジカルから見た分子分光, 化学反応

担当： 集積化学研究グループ

日時： 平成17年12月 1日 15:00

場所： 理学部 B301号室

講師： Prof. Matthias Driess (ベルリン工科大学, ドイツ)

演題： From Metal-Oxo-Clusters to Challenges in Catalysis

担当： 反応有機化学研究グループ

日時： 平成17年12月13日 15:00
場所： 理学部 E002号室
講師： 友田 修司 教授（東京大学大学院総合文化研究科）
演題： 面選択性の起源
担当： 天然物有機化学研究グループ

日時： 平成18年 1月20日 15:00
場所： 理学部 B301号室
講師： Seong Keun Kim 教授 (Seoul National University)
演題： Frequency- and time-domain spectroscopy of biomolecules in the gas phase
担当： 構造物理化学研究グループ

日時： 平成18年 2月13日 15:00
場所： 理学部 B301号室
講師： Prasanna S. Ghalsasi 博士 (MS University of Baroda)
演題： New Organic-Inorganic Hybrid Multiferroic Compounds Based on Layered
Structure:[alkyl-amine]₂FeCl₄
担当： 固体物性化学研究グループ

日時： 平成18年 3月 3日 14:00
場所： 理学部 B301号室
講師： Elliot R. Bernstein 教授 (Colorado State University)
演題： Toward and atomic levels understanding of heterogeneous reaction rate enhancement employing
gas phase metal and metal oxide clusters
担当： 構造物理化学研究グループ

日時： 平成18年 3月 7日 15:00
場所： 理学部 E102号室
講師： ミッシェル ベルダゲ 名誉教授（ピエール・マリーキュリー大学）
演題： 分子磁石が拓く未来のワンダーランド
担当： 固体物性化学研究グループ

日時： 平成18年 3月13日 15:00
場所： 理学部 B301号室
講師： 岸根順一郎助教授（九州工業大学助教授）
演題： Domain walls and solitons in molecular-based magnets: two topics from recent progress
担当： 固体物性化学研究グループ

日時： 平成18年 3月13日 16:00

場所： 理学部 B301号室

講師： Nikolai Baranov 教授（ロシア・ウラル州立大学教授）

演題： Field-induced magnetic phase transitions in the compounds based on rare earth and d-transition metals

担当： 固体物性化学研究グループ

・ 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。数理分子生命理学研究科（化学系）と共催で開催している。平成17年度の世話人は河内敦助教授である。

平成17年度の講師と題目を次にあげる。

第69回 2005年7月25日

『光と超臨界流体—その構造からナノ材料の創製・開拓まで—』

齋藤 健一 （自然科学研究支援開発センター）

第70回 2005年10月17日

『in situ 顕微法で見た液液界面反応』

塚原 聡 （化学専攻分子構造化学講座）

・ 物化系セミナー

物化系セミナーは、物化系研究者による研究活動を紹介し、化学関係教員・学生などによる研究についての専門的な意見交換の場として平成17年度より開始した。

物化系セミナー(第1回)

日時: 平成17年5月30日(月) 16:50

場所: 理学部 E002号

担当: 山崎勝義

演題: 多段階振動緩和速度定数の決定法と光解離ダイナミクス研究への応用

物化系セミナー(第2回)

日時: 平成17年6月17日(金) 16:50

場所: 理学部 E002号

担当: 勝本 之晶

演題: 振動分光法を用いて組織体溶液を研究すること

物化系セミナー(第3回)

日時: 平成17年7月15日(金) 16:50

場所: 理学部 E002号

担当: 江幡 孝之

演題: 超音速分子線レーザー分子分光

-分子クラスターを用いた溶質-溶媒相互作用の分子レベルモデリング-

物化系セミナー(第4回)

日時: 平成17年10月28日(金) 16:50

場所: 理学部 E104 号

担当: 相田 美砂子

演題: 量子生命化学と大量計算

物化系セミナー(第5回)

日時: 平成17年11月18日(金) 16:50

場所: 理学部 E002 号

担当: 高橋 修

演題: 軟 X 線光化学と理論計算

物化系セミナー(第6回)

日時: 平成18年2月10日(金) 16:50

場所: 理学部 E002 号

担当: 大野 啓一

演題: 水およびアルコールの水素結合と OH 伸縮振動

・セミナー等開催実績

第17回生体機能関連化学若手の会サマースクール

日時: 平成17年 8月

場所: 宮島グランドホテル有もと

担当: 岩本 啓

有機合成化学協会中国四国支部支部奨励賞受賞講演並びに特別招待講演会

日時: 平成17年11月

場所: 理学部

担当: 大方勝男・小島聡志

第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム

日時: 平成17年11月

場所: 理学部

担当: 相田美砂子

・ 研究論文・招待講演・特許出願等の総数

化学専攻の教員による研究論文・著書・総説・特許（2005 年 1 月～12 月）と国際会議・国内学会（2005 年 4 月～2006 年 3 月）の総数を示す。

項 目	数
論文	9 1
著書	5
総説	6
国際会議	7 7
国内学会（招待・依頼・特別講演）	1 5
特許出願	0

・ 受賞実績

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 2 7 回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞	灰野 岳晴

・ RAの実績

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17年度のRA

大学院生氏名	今村 友紀	所属研究グループ	錯体化学
学年	D 3	指導教員	三吉 克彦 教授
研究プロジェクト名	機能性リン配位子の開発に基づいた有機金属錯体の合成		
研究の内容	2 個のキレート鎖で二重架橋され、P 上に嵩高いフェロセンユニットを置換基としてもつジホスフィン配位子の新規合成法の開発と遷移金属金属に対する配位挙動 NMR や X 線構造解析による解明。		

大学院生氏名	三宅 敏子	所属研究グループ	量子化学
学年	D 3	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	水クラスターの数え上げと安定性に関する理論的研究		
研究の内容	トポロジ的に区別できる水クラスターの構造（水素結合パターン）を、オクタマー(H ₂ O) ₈ までについて数え上げによってすべて網羅した。さらに、それらの水素結合パターンに相当する構造のモルあたりのヘルムホルツ自由エネルギー、内部エネルギーおよびエントロピーを、モンテカルロ法を適用することによって見積もった。		

1-4-2 研究グループ別の研究活動の概要、発表論文、講演等

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），井口 佳哉（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、気相孤立分子やその水素結合クラスターの構造、化学反応、振動エネルギー緩和の研究を行っている。対象としている分子は芳香族分子やアミノ酸である。また、振動分光法と熱分析を併用して、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研究している。実験と併行して、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。2006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-プローブ法を用い、超音速分子線中の気相孤立フェノール、アニリン、長鎖フェニルアルカノールの OH, NH₂ 伸縮振動緩和の実時間測定を行った。その結果、どの分子においても、これら高振動数の振動からは2段階の過程で分子全体にエネルギーが散逸することを突きとめた。また、緩和の中間状態であるドアウエイ状態は分子によって異なることが分かった。さらに、フェノール水素結合体クラスターについて緩和の研究を行った結果、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。また、この第1段階の分子内エネルギー再分配過程は励起振動モードやサイトで大きく異なるが、引き続きおこる解離過程速度はエネルギーのみに依存することも明らかになった。

超音速分子線中の孤立冷却したL-フェニルアラニンのコンフォメーションの研究、また光化学初期過程のコンフォマー依存を行った。コンフォマーの分離はレーザー誘起蛍光分光を用い、各コンフォマーの構造決定は赤外-紫外二重共鳴分光による赤外スペクトル観測および密度汎関数法による計算との対応で行った。その結果、6つの異なったコンフォマーを帰属することができ、それらは分子内水素結合するものと、しないものとに分類することができた。また、励起状態寿命が、異なったコンフォマーで著しく異なることを見いだした。この結果から、アミノ酸の光化学初期過程が、環境だけではなく、コンフォメーションの違いでも大きく異なることが明らかになった。

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フォ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フォメーション安定性、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

E. A. Abou EL-Nasr, A. Fujii, T. Yahagi, T. Ebata, and N. Mikami (2005) "Laser spectroscopic investigation of salicylic acids hydrogen bonded with water in supersonic jets : Microsolvation effects for excited state proton dislocation. ", *J. Phys. Chem. A* **109**, 2498–2504.

- V. Venkatesan, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami (2005) "Infrared and ab initio studies on 1,2,4,5-tetrafluorobenzene clusters with methanol and 2,2,2-trifluoroethanol : Presence and absence of an aromatic C-H -- O hydrogen bond.", *J. Phys. Chem. A* **109**, 915–221.
- E. A. Abou EL-Nasr, A. Fujii, T. Ebata, and N. Mikami (2005) "Infrared and ultraviolet laser spectroscopy of jet-cooled substituted salicylic acids ; substitution effects on the excited state intramolecular proton transfer in salicylic acid.", *Mol. Phys.* **103**, 1561–1572.
- Y. Yamada, J. Okanao, N. Mikami, and T. Ebata (2005) "Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study on the intramolecular vibrational energy redistribution of NH₂ and CH stretching vibrations of jet-cooled aniline. ", *J. Chem. Phys.* **123**, 124316–124324.
- K. Fukuhara, T. Mizawa, T. Inoue, H. Kumamoto, Y. Terai, H. Matsuura, and K. Viras (2005) "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.
- A. Muraoka, Y. Inokuchi, N. Nishi and T. Nagata (2005) "Structures of $[(\text{CO}_2)_n(\text{H}_2\text{O})_m]^-$ ($n = 1-4, m = 1, 2$) Cluster Anions. I. Infrared Photodissociation Spectroscopy", *J. Chem. Phys.* **122**, 094303-1–094303-7.
- K. Watanabe, A. Kokalj, Y. Inokuchi, I. Rzeznicka, K. Ohshimo, N. Nishi and T. Matsushima (2005) "Orientation of Nitrous Oxide on Palladium(1 1 0) by STM", *Chem. Phys. Lett.* **406**, 474–478.

○著書

江幡孝之 (2005) 実験化学講座 9 物質の構造 I 分光 上, 日本化学会編, 丸善株式会社

○国際学会での講演

江幡孝之, "Study on IVR of X-H stretching vibrations of aromatic molecules and their H-bonded clusters by IR-UV pump probe spectroscopy in a supersonic beam. ", 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Dec. 15-20, 2005, Honolulu, Hawaii, USA) (招待講演)

江幡孝之, "IVR dynamics of the X-H stretching vibrations studied by picosecond IR-UV pump-probe spectroscopy. ", Gordon Research Conference on Molecular and Ionic Clusters (Feb. 19-26, 2006, Ventura, California, USA) (招待講演)

井口佳哉, "Isomer-Specific Photodissociation of $(\text{CS}_2)_2^{--}$ ", XXII International Conference on Photochemistry (24-29 July 2005, Cairns, Australia) (ポスター)

井口佳哉, "Photodissociation of $(\text{CS}_2)_2^-$: $\text{CS}_2 \cdot \text{CS}_2$ process vs. C_2S_4^- process", The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) (15-20 December 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

○国内学会 (特別講演・招待・依頼・一般講演・ポスター, 左記の順に記載)

江幡孝之, 「水素結合クラスターのX-H伸縮振動の緩和ダイナミックス」。分子研研究会「多様な水素結合系と量子効果」(2005年7月, 岡崎) (招待講演)

井口佳哉, 「 $(\text{CS}_2)_2$ 構造異性体の光解離過程」第21回化学反応討論会 (2005年6月, 大阪) (一般講演)

江幡孝之, 「長鎖フェニルアルコールのOH伸縮振動のエネルギー緩和-構造と緩和速度との相関-」2005分子構造討論会 (2005年9月, 東京) (ポスター)

福原幸一, 「全トランスオキサアルカンの構造と熱物性の相関」第41回熱測定討論会 (2005年10月, 福岡) (ポスター)

橋本貴世, 高須雄一, 江幡孝之, 「アミノ酸の超音速ジェット赤外レーザー分光」分子構造総合討

論会 2005 (2005 年 9 月, 東京)

萩原辰徳, 福原幸一, 江幡孝之, 「 $C_nE_mE_n$ 系トリブロック化合物の超高压相転移」分子構造総合
討論会2005 (2005年月, 東京) (一般講演)

柳井雄樹, 高須雄一, 江幡孝之, 「アルコール／水系のC-O伸縮振動におけるnoncoincidence 効
果」分子構造総合討論会2005 (2005年9月, 東京) (ポスター)

橋本貴世, 高須雄一, 江幡孝之, 「アミノ酸の超音速ジェット赤外レーザー分光」第2回ナノ・バ
イオ・インフォ・化学シンポジウム (2005 年 11 月, 広島大学) (一般講演)

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），秋田 素子（助手）*
 *(平成 17 年 10 月より)

○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：新規イオン伝導体探索とその伝導機構の解明：欠陥スピネル型構造をもつ新規なりチウムイオン伝導体 LiInBr_4 を見出した。この結晶におけるリチウムイオン伝導性は Li だけでなく In のサイトの乱れ（無秩序状態）に大きく関与していることを ^{115}In NMR から明らかにした。

○発表原著論文

- Y. Yoshida, N. Tateiwa, M. Mito, T. Kawae, K. Takeda, Y. Hosokoshi, K. Inoue (2005) Specific heat study of an $S=1/2$ alternating heisenberg chain system: F5PNN in a magnetic field, *Phys. Rev. Lett.*, **94**, 37203.
- S. Boyarchenkov, A. S. Ovchinnikov, I. G. Bostrem, N. V. Baranov, Y. Hosokoshi, K. Inoue (2005) Real-space renormalization group study of the anisotropic antiferromagnetic Heisenberg model of spin $S=1$ on a honeycomb lattice, *Journal of Physics-Condensed Matter*, **17**, 1769–1780.
- Y. Fujii, H. Hashimoto, A. Mori, A. Tanaka, M. Chiba, Y. Hosokoshi, K. Inoue, Y. Yamamoto, H. Hori (2005) Nuclear magnetic relaxation of proton in organic radical antiferromagnet BIPNNBNO around critical field region, *Progress of Theoretical Physics Supplement*, **159**, 118–122.
- J. Kishine, K. Inoue, Y. Yoshida (2005) Synthesis, Structure and Magnetic Properties of Chiral Molecule-based Magnets, *Progress of Theoretical Physics Supplement*, **159**, 82–95.
- H. Imai, K. Inoue, K. Kikuchi (2005) Crystal structures and magnetic properties of chiral and achiral cyanide-bridged bimetallic layered compounds, *Polyhedron*, **24**, 2808–2812.
- I. V. Blokhin, A. S. Markosyan, R. B. Morgunov, K. Inoue, Y. Tanimoto, Y. Yoshida (2005) Magnetic resonance in a $[\{\text{Cr}(\text{CN})_6\}\{\text{Mn}(\text{S})\text{-pnH}(\text{H}_2\text{O})\}]\cdot\text{H}_2\text{O}$ single-crystal molecular ferrimagnet, *Physics of the Solid State*, **47**, 2106–2113.
- S. Hayami, K. Danjbara, S. Miyazaki, K. Inoue, Y. Ogawa, Y. Maeda (2005) Photo-Induced Spin Transition Iron(II) Compounds with Liquid-Crystal Properties, *Polyhedron*, **24**, 2821–2827.
- S. Hayami, Y. Shigeyoshi, M. Akita, K. Inoue, K. Kato, K. Osaka, M. Takata, R. Kawajiri, T. Mitani, Y. Maeda (2005) Reverse Spin Transition Phenomenon Triggered by Structural Phase Transition, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **44**, 4899–4903.
- S. Hayami, K. Danjbara, Y. Shigeyoshi, K. Inoue, Y. Ogawa, Y. Maeda (2005) Crystal Structure and Mesogenic Property of an Iron(II) Complex with a Terpyridine Derivative Ligand, *Inorg. Chem. Comm.*, **8**, 506–509.

- Y. Maeda, K. Danjobara, S. Hayami, K. Inoue, Y. Ogawa, N. Matsumoto (2005) Metallomesogens with Spin-Transition Phenomena, *AIP Conference Proceedings*, **765**, 263–268.
- S. Hayami, R. Moriyama, Y. Shigeyoshi, R. Kawajiri, T. Mitani, M. Akita, K. Inoue, Y. Maeda (2005) Spin-crossover cobalt(II) compound with banana-shaped structure, *Inorganic Chemistry*, **44**, 7295–7297.
- S. Hayami, T. Kawahara, Y. Maeda, K. Inoue, O. Sato (2005) Influence of the intermolecular interaction on photo-induced spin-transition of $[\text{Fe}(\text{R-pap})_2]\text{X}$, *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, **2663**, 521–525.
- S. Onaka, M. Yaguchi, R. Yamagichi, T. Ozeki, M. Ito, T. Sunahara, Y. Sugiura, M. Shiotsuka, K. Nunokawa, M. Horibe, K. Okazaki, A. Iida, H. Chiba, K. Inoue, H. Imai, K. Sako (2005) The effect of carbon chain length of the diphosphine ligand on the aurophilic interaction. Synthesis and X-ray Structural study for a series of Au (I) copounds with $\text{Ph}_2\text{P-R-PPh}_2$ and $\text{S-(CH}_2)_n\text{-py}$ Ligands, *J. Organometallic Chem.*, **690**, 57–68.
- K. Nunokawa, S. Onaka, Y. Mizuno, K. Okazaki, T. Sunahara, M. Ito, M. Yaguchi, H. Imai, K. Inoue, T. Ozeki, Hi. Chiba, T. Yoshida (2005) Exploration on $\text{Au}(\text{S-4-py})\text{PR}_3$ complexes as a viable building block for constructing hetero-nuclear supramolecules: synthesis and X-ray study on $\text{M}(\text{acac}')_2[\text{Au}(\text{S-4-py})\text{PR}_3]_2(\text{ClO}_4)_x$ ($\text{M} = \text{Cr, Cu}$; $\text{acac}' = \text{acetylacetonate, hexafluoro-acetylacetonate}$; $x = 0 \text{ or } 1$), *J. Organometallic Chem.*, **690**, 48–56.
- K. Nunokawa, K. Okazaki, S. Onaka, M. Ito, T. Sunahara, T. Ozeki, H. Imai, K. Inoue (2005) Synthesis and X-ray structure study on new An(I) polymer architectures based on multi-sulfur tentacles, *J. Organomet. Chem.*, **690**, 1332–1339.
- H. Kumagai, M. Akita-Tanaka, S. Kawata and K. Inoue (2005) Hydrothermal Synthesis and Structural Characterization of a Manganese (II) Wire Made Up of Octahedral and Square Mn(II) Ions, *Chem. Lett.*, **34**, 526–527.
- T. Akutagawa, K. Shitagami, S. Nishihara, S. Takeda, T. Hasegawa, T. Nakamura, Y. Hosokoshi, K. Inoue, S. Ikeuchi, Y. Miyazaki, K. Saito (2005) Molecular rotor of $\text{Cs-2}([\text{18}] \text{crown-6})(3)$ in the solid state coupled with the magnetism of $[\text{Ni}(\text{dmit})_2]$, *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 4397–4402.
- Y. Tanimoto, M. Fujiwara, M. Sueda, K. Inoue, M. Akita (2005) Magnetic levitation of plastic chips: Applications for magnetic susceptibility measurement and magnetic separation, *Japanese Journal of Applied Physics Part 1-Regular Papers Brief Communications & Review Papers*, **449**, 6801–6803.
- S. Onaka, L. Hong, M. Ito, T. Sunahara, H. Imai, K. Inoue (2005) Rational synthesis and X-ray structural study of manganese-pyridine-alcohol derivatives, *Journal of Coordination Chemistry*, **58**, 1523–1530.
- K. Yamada, K. Kumano and T. Okuda (2005) 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.
- T. Okuda and K. Yamada (2005) Structure and Ionic Conductivity of Halocomplexes of Main Group Metallic Elements Studied by NMR and NQR, *Hyperfine Interactions*, **159**, 95–102.

○著書

K. INOUE, S. OHKOSHI and H. IMAI: Chiral Molecule-based Magnets, (eds. by J. S. Miller & M. Drillon, Magnetism: Molecules to Materials V, Molecule-Based Materials), Wiley-VCH, Weinheim, pp. 41–70, 2005.

○国際会議

Katsuya INOUE: Structure and Physical Properties of Chiral Molecule Based Magnet, 学術創成研究費国際シンポジウム, (Mar., 2005, Himeji, Japan) (招待講演)

Katsuya INOUE: Structure and properties chiral molecule-based magnets, (PacifiChem2005, Dec., 2005, Honolulu, USA) (招待講演)

K. Ohishi, W. Higemoto, A. Koda, S. R. Saha, R. Kadono, K. Inoue, H. Higashikawa, and Y. Yoshida: MAGNETISM IN MOLECULAR MAGNET $[\text{Cr}(\text{CN})_6][\text{Mn}(\text{S})\text{-pnH}(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})$ PROBED BY MUON SPIN RELAXATION AND ROTATION, 学術創成研究費国際シンポジウム, (Mar., 2005, Himeji, Japan) (ポスター)

H. Higashikawa K. Okuda K. Yamada Y. Yoshida N. Masuhara A. Kusano K. Inoue: Synthesis and Properties of Novel Chiral Molecule-based Magnet based on Molybdenum Ions. (PacifiChem2005, Dec. 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

M. Akita, and K. Inoue: Bergman Cyclization promoted by Acetylene-bridged Metalloporphyrin. (PacifiChem2005, Dec. 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

K. Yamada, K. Kumano and T. Okuda: Lithium superionic conductors Li_3InBr_6 and LiInBr_4 studied by ^7Li , ^{115}In NMR. The 15th International Symposium on Solid State Ionics (July, 2005, Baden-Baden, Germany) (ポスター)

K. Yamada and A. Miwatari: Structure and Reactivity of Fluoride Ion Conductor KMF_4 (M:Sb, Bi), The 15th International Symposium on Solid State Ionics (July, 2005, Baden-Baden, Germany) (ポスター)

○国内学会

井上克也: キラル磁性体の磁気光学効果と磁気キラリティ。日本化学会春季年会シンポジウム, (2006年3月, 日本大学) (特別講演)

井上克也: カイラル分子磁性体の化学。菅野シンポジウム, (2006年3月, 東大) (特別講演)

吉田祐輔, 菊地耕一, 井上克也: 5配位Mnを含む新規3次元磁性体の構造と磁性。第86回春期年会, (2006年3月, 日本大学) (一般講演)

吉田祐輔, 増原直治, 東川大志, 草野愛, 菊地耕一, 井上克也: らせん構造を有する新規キラル磁性体の構造と磁性。第86回春期年会, (2006年3月, 日本大学) (一般講演)

井上克也, 吉田祐輔, 岸根順一郎, 菊地耕一, 美藤正樹: キラル磁性体の物性, 構造, 磁性。日本物理学会, (2006年3月, 松山) (一般講演)

岸根順一郎, 井上克也, 菊地耕一, 美藤正樹, 高阪勇輔, 秋光純: 分子性および無機系 chiral 磁性体の磁気物性。日本物理学会, (2006年3月, 松山) (一般講演)

高阪勇輔, 矢野真一郎, 東川大志, 吉田祐輔, 井上克也, 岸根順一郎, 秋光純: CuB_2O_4 の磁気光学効果。日本物理学会, (2006年3月, 松山) (一般講演)

美藤正樹, 小森田裕貴, 秋山格, 岸根順一郎, 出口博之, 高木精志, 吉田祐輔, 井上克也, 菊地耕一: キラル分子磁性体 $[\text{Cr}(\text{CN})_6][\text{Mn}(\text{R})\text{-pnH}(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})$ の高圧力下非線形磁化率。日本物理学会, (2006年3月, 松山) (一般講演)

東川大志, 吉田祐輔, 山田公一, 増原直治, 井上克也: モリブデンイオンを含むキラル磁性体の構造と物性。分子構造討論会2005, (2005年9月, 東京) (一般講演)

大石一城, 髭本亘, 幸田章宏, S. R. Saha, 門野良典, 井上克也, 東川大志, 吉田祐輔: mSR から眺めた chirality を有する分子磁性体の磁気秩序 III。日本物理学会春季年会, (2005年3月, 野田 千葉) (一般講演)

東川大志, 山田公一, 吉田祐輔, 奥田一樹, 井上克也: $[\text{Mo}(\text{V})(\text{CN})_8]^{3-}$ を用いた新規キラル磁性体の合成と物性。第85回春期年会, (2005年3月, 神奈川大学) (一般講演)

沼田陽平, 井上克也: キラル磁性体 $[\text{Mn}(\text{hfac})_2] \cdot \text{BN}0^*$ の磁気異方性に関する研究。構造有機化学討論会, (2005年10月, 大阪市立大学) (一般講演)

沼田陽平, 井上克也: キラルな配位子を有する新規錯体の合成と物性に関する研究。分子構造討

論会, (2005 年 9 月, 東京) (ポスター講演)

秋田素子, 熊谷等, 井上克也: 新規キラル有機ラジカルの合成・構造と磁氣的挙動。構造有機化学討論会, (2005 年 10 月, 大阪市立大学) (ポスター発表)

脇本直樹, 河口誉元, 大木 寛, 山田康治, 井上克也: 層状化合物 RTiNbO_5 ($\text{R}=\text{NH}_3, \text{CH}_3\text{NH}_3$) 中のゲスト分子の動的挙動。分子構造総合討論会 2005, (2005 年 9 月東京) (ポスター)

熊野圭司, 山田康治: スピネル構造をもつ新規カチオン伝導体 LiInBr_4 の ^7Li , ^{115}In NMR による研究。分子構造総合討論会 2005, (2005 年 9 月東京) (一般講演)

河口誉元, 脇本直樹, 大木寛, 山田康治, 井上克也: 二価金属イオンを挿入した層間化合物における層間分子・イオンの挙動。分子構造総合討論会 2005, (2005 年 9 月東京) (ポスター)

山田康治, 熊野圭司, 井上克也, 富田靖正: 欠陥スピネル型イオン伝導体 LiInBr_4 の動的構造。

第 3 1 回固体イオニクス討論会, (2005 年 11 月, 新潟) (一般講演)

泉 雅晶, 山根庸平, 山田康治, 井上克也: 欠陥スピネル型化合物 $(\text{LiIn}_5\text{S}_8)_{1-x}(\text{In}_2\text{S}_3)_x$ の結晶構造とイオン伝導性。第 8 6 回春季年会, (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

熊野圭司, 山田康治, 井上克也, 富田靖正: 欠陥スピネル型イオン伝導体 LiInBr_4 の動的構造。

第 8 6 回春季年会, (2006 年 3 月, 船橋) (ポスター)

脇本直樹, 河口誉元, 大木寛, 山田康治, 井上克也: イミダゾールを導入した層状化合物 HTiNbO_5 の物性。第 8 6 回春季年会, (2006 年 3 月, 船橋) (ポスター)

寺尾博光, 甲斐嘉彦, 河口誉元, 山田康治: テトラハロゲノアンチモン(III)酸 4-アミノピリジニウム - d_3 ($\text{X}=\text{Br}, \text{Cl}$) の NQR, ^2H NMR。第 86 回春季年会, (2006 年 3 月, 船橋) (ポスター)

○国際共同研究・国際会議開催実績

キラル磁性体の磁気構造解明国際共同研究: スペイン・Zaragoza 大学, フランス・ラウエーランジェバン研究所, 中性子線回折研究, 2002-

キラル磁性体の磁気ダイナミックス国際共同研究: ロシア・ウラル州立大学, ロシア科学アカデミー・チェルノゴフカ・固体物性研究所, パルス磁場による高速磁化過程研究, 2000-

キラル磁性体の磁気共鳴国際共同研究: ロシア科学アカデミー・チェルノゴフカ・固体物性研究所, 電子スピン共鳴 (ESR) 研究, 2002-

キラル磁性体の超強磁場磁気共鳴, 磁化過程国際共同研究: ドイツ・フンボルト大学, 福井大学, 高等研究所との共同研究, 2003-

キラル磁性体の中間子国際共同研究: カナダ・TRIUMF 中間子実験施設, 高エネルギー物理学研究所, 日本原子力研究所, 中間子研究, 2002-

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内)

キラル磁性体の磁気光学効果共同研究: 高輝度放射光施設 (SPring-8), 東大, 高エネルギー物理学研究所, 東北大, 産総研・CERC・PF グループ, X線磁気円二色性 (XMCD) 研究, 2002-

キラル磁性体の非弾性磁気散乱共同研究: 高輝度放射光施設 (SPring-8), 2002-

キラル磁性体の非線形光学効果共同研究: 東大, 高エネルギー物理学研究所, 東北大, 産総研, 二次非線形光学効果研究, 2001-

キラル磁性体の物性理論: 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, 大阪大学理論グループ, 磁気構造研究, 2002-

キラル磁性体の非線形磁化率: 九工大, 高木教授, 美籐助教授, 九州大学ナノ支援, 自然科学研究機構ナノ支援共同研究, 非線形磁化率研究, 2005-

新規有機ラジカルコバルト一次元錯体の強磁場物性: 東北大, 金属材料研究所, 野尻教授と共同研究, 2005-

○研究助成の受け入れ状況

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

科学研究費補助金基盤研究(C)企画調査 「新磁性分野の創生: キラル磁性体に関する企画調査」,
代表 井上克也

科学研究費補助金特定領域研究(配位空間) 「ナノ内部磁場空間を利用した絶対不斉合成反応に関する研究」, 代表 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 秋田素子

○その他

三渡彰友: 固体電解質のサイクリックボルタンメトリー(CV)測定装置。日本ナショナルインスツルメント(株)アプリケーションコンテスト2005.

山田 康治: LabVIEW による固体 NMR 装置の自動化。日本ナショナルインスツルメント(株)アプリケーションコンテスト2005.

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[1.1]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 (2005) Chelate and Pincer Carbene Complexes of Rhodium and Platinum Derived from Hexaphenylcarbodiphosphorane, $Ph_3P=C=PPh_3$, *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 5314–5315.

T. Mizuta, Y. Imamura, K. Miyoshi, H. Yorimitsu, K. Oshima (2005) Phosphorus-Bridged [1.1]Ferrocenophane with syn and anti Conformations, *Organometallics*, **24**, 990–996.

○国際学会での講演

T. Mizuta, Y. Imamura, K. Miyoshi: Synthesis and Properties of Coordinatively Unsaturated Cobalt-Alkyl Complexes Bearing Phosphorus-Bridged [1.1]Ferrocenophane as a Supporting Ligand. The International Symposium on Dynamic Complexes, ISDC 2005 (Oct., 2005, Sendai, Japan) (ポスター発表)

T. Mizuta, Y. Imamura, T. Aotani, K. Miyoshi: Syntheses, Structures, and Functionalities of Cyclic Poly(phosphinoferrocene). 1st International Conference on Chemistry of Coordination Space (Nov., 2005, Okazaki, Japan) (ポスター発表)

T. Mizuta, H. Murakami, J. Ushio, T. Katayama, C. Miyaji, K. Miyoshi: Addition of Tetraalkyldiphosphine monooxide to Titanocene Carbene, Preparation of Titanadiphosphine Chelate and its Transition Metal Complex. PACIFICHEM2005 (Dec., 2005, Honolulu, USA) (一般講演)

N. Tanaka, T. Nakazono, Y. Iwakuni, T. Mizuta, K. Miyoshi: Formation of a 1-pallada-2-phosphaacenaphthene framework and its catalytic activity for Heck reaction. PACIFICHEM2005 (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター発表)

T. Baba, K. Kubo, T. Miyake, H. Nakazawa, K. Miyoshi: Trapping of Unsaturated Organic Small Molecules by Iron-Phosphineimide Complexes. P PACIFICHEM2005 (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター発表)

○国内学会

水田 勉: 大環状フェロセノホスフィン配位子の合成と構造。名古屋大学21世紀COE無機化学若手研究会 (2006年1月名古屋) (招待講演)

水田 勉: リン架橋[1.1]ferrocenophane 配位子およびその金属錯体の構造と反応。

特定領域研究「動的錯体の自在制御化学」第5回公開シンポジウム(2006年3月京都) (一般講演)

今村友紀, 青谷朋之, 水田 勉, 三吉克彦: 環状ポリフェロセンの合成, 構造, 機能。第55回錯体化学討論会(2005年9月, 新潟) (一般講演)

田中祐介, 久保和幸, 中沢 浩, 三吉克彦: ホスフィンイミド配位子の遷移金属-Cp炭素間転位/逆転位反応。第55回錯体化学討論会(2005年9月, 新潟) (一般講演)

田中宣志, 岩國由紀子, 水田 勉, 三吉克彦: 5 価のリンをもつパラダサイクル錯体の合成とHeck 反応の触媒活性。第55回錯体化学討論会(2005年9月, 新潟) (一般講演)

Yuki Imamura, Tsutomu Mizuta, Katsuhiko Miyoshi, Hideki Yorimitsu, Koichiro Oshima: Synthesis and Properties of Coordinatively Unsaturated Cobalt-Alkyl Complexes Bearing Diphosphine as a Supporting Ligand. 52nd Symposium on Organometallic Chemistry, Japan (2005年9月, 京都) (一般講演)

武涛 航太, 今村 友紀, 水田 勉, 三吉 克彦: Ph-P架橋[1.1]フェロセノファンをもつ10族金属錯体の触媒反応-Heck型反応およびその副反応-。日本化学会西日本大会(2005年10月, 宇部) (一般講演)

青谷朋之, 今村友紀, 水田 勉, 三吉克彦: 溶媒効果を利用した大環状ポリホスフィノフェロセンの合成収率の向上。第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム(2005年11月, 広島) (一般講演)

谷本祥一, 石津優子, 水田 勉, 三吉克彦: Diphospha[2]ferrocenophane配位子およびその金属錯体の立体的歪みと反応性。第55回錯体化学討論会(2005年9月, 新潟) (ポスター)

田川真也, 久保和幸, 飯田恭介, 中沢 浩, 三吉克彦: 水素化ホウ素試薬を用いた鉄上でのCO還元による籠型ホルミル錯体の合成。第55回錯体化学討論会(2005年9月, 新潟) (ポスター)

Takayuki Baba, Kazuyuki Kubo, Tomoyuki Miyake, Hiroshi Nakazawa, Katsuhiko Miyoshi: Trapping of Organic Compounds Having a CC or NC Triple Bond through Cyclization with Iron-Phosphineimide Complexes. 52nd Symposium on Organometallic Chemistry, Japan (2005年9月, 京都) (ポスター)

○研究助成の受け入れ状況

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 特定領域研究 「鎖状および環状ポリフェロセンの合成・構造・機能」 代表 三吉 克彦

科学研究費補助金 基盤研究(C) 「リン架橋フェロセンが創り出す新規な多座配位子」 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

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

種々の異相界面のナノ微小域を対象とする先端的な研究分野において, そのナノ界面場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っている。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ている。そこで, 当研究グループでは, 界面等の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, 分離法及び原子・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及び分離法に関する研究

以下のことが, 平成 17 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 反応に対する活性種である塩化金酸イオンを対イオンとするイオン会合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 法をニトロアニリン化合物の定量に応用した。
- (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与する相互作用について検討した。
- (c) 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. 液液界面に生成する酸型ポルフィリン会合体の偏光特性の解明; 2. 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。
- (d) マイクロ電極を用いた単一 DNA の泳動分離: 自作のマイクロ電極を用いて, 40 kbp(bp:塩基対)を超える巨大な DNA に直流電場および交流電場を同時に印加し, 蛍光顕微鏡を用いて単一 DNA の構造変化と泳動挙動を詳細に測定した。

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17年度は, ICP-AESによる鉄鋼試料の直接定量法を開拓した。通常, 鉄鋼試料などの無機材料中の微量成分を分析する場合, まず試料を正確かつ精密に定量した後, 酸分解して水溶液にする必要があった。より迅速にICP-AESで定量するために, 固体試料を秤量することなく, そのまま加熱気化炉に直接採取し, この試料全量をICPへ導入した。目的元素として亜鉛を例にして定量分析のための基礎検討を行った。その際, 鉄を内標準元素として同時に定量することで試料採取料を見積もった。その結果, 全定量操作のうち最も時間を要する秤量操作を省くことで, 迅速な鉄鋼の定量分析が可能となった。

○発表原著論文

Y. Okamoto, H. Kataoka, S. Tsukahara, and T. Fujiwara (2005) Sequential determination of boric acid and boron nitride by electrothermal vaporisation inductively coupled plasma atomic spectrometry.

J. Anal. At. Spectrom., **20**, 383–384.

西川綾佳, 塚原 聡, 藤原照文 (2005) 種々の添加物存在下における単一 DNA の顕微誘電泳動挙動. *分析化学*, **54**, 459–465.

T. Tokimoto, S. Tsukahara, and H. Watarai (2005) Lactone Cleavage Reaction Kinetics of Rhodamine Dye at Liquid/Liquid Interfaces Studied by Micro-Two-Phase Sheath Flow/Two-Photon Excitation Fluorescence Microscopy. *Langmuir*, **21**, 1299–1304.

I. U. Mohammadzai, T. Ashiuchi, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara (2005) On-line Liquid-liquid Extraction Coupled to a Reversed Micellar-mediated Chemiluminescence Detection System: Application to the Determination of Amino/Nitroaromatic Compounds. *J. Chin. Chem. Soc.*, **52**, 1037–1042.

○著書

H. Watarai, and S. Tsukahara: Single Molecule Diffusion and Metal Complex Formation at Liquid/Liquid Interface. In *Interfacial Nanochemistry -Molecular Science and Engineering at Liquid-Liquid Interfaces-* (ed. by H. Watarai, N. Teramae, and T. Sawada), Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, Chap. 10, pp. 205–231 2005.

○総説

S. Tsukahara (2005) *In Situ* Fluorescence Microscopic Measurements of Complexation Reactions at Liquid/Liquid Interface. *Int. J. Soc. Mater. Eng. Res.*, **13**, 1–8.

塚原 聡 (2005) 液液界面分析法, *ぶんせき*, 186–191.

○国際会議

K. Nakada, I. U. Mohammadzai, Y. Okamoto, S. Tsukahara, T. Fujiwara: Reversed Micellar Adsorption Behavior of Cetyltrimethylammonium Chloride and Water onto Porous Silica Gel, 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005), (Dec., 2005, Honolulu, Hawaii, USA) 一般講演

S. Tsukahara, Y. Shishino, Y. Okamoto, T. Fujiwara: *In situ* microscopic measurement for extraction of rhodamine-labeled α -chymotrypsinogen by aerosol OT reverse micelle in alkane/water interfacial region, 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005), (Dec., 2005, Honolulu, Hawaii, USA) 一般講演.

K. Nakada, A. Tanaka, M. Nishihara, I. U. Mohammadzai, Y. Okamoto, S. Tsukahara, T. Fujiwara: Silica Gel-Adsorbed Cetyltrimethylammonium Chloride Surfactant; A New Type of Reversed Admicellar Stationary Phase for the LC Separation of Positional Isomers, 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005), (Dec., 2005, Honolulu, Hawaii, USA) ポスター

H. Kataoka, Y. Okamoto, S. Tsukahara, T. Fujiwara, E. Iwamoto: Sensitive determination of halogens by tungsten boat furnace vaporization with inductively coupled plasma mass spectrometry using tetramethylammonium hydroxide as a chemical modifier, 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005), (Dec., 2005, Honolulu, Hawaii, USA) ポスター

M. Ueda, T. Tanaka, K. Nakada, Y. Okamoto, S. Tsukahara, T. Fujiwara: Silica Gel-Immobilized Nylon and Its Application to a Stationary Phase for LC Separation of Saccharides, 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005), (Dec., 2005, Honolulu, Hawaii, USA) ポスター

M. Suehara, S. Tsukahara, Y. Okamoto, T. Fujiwara: *In situ* Observation for Adsorption of Single DNA Molecules at Liquid/Liquid Interface by Fluorescence Microscopy, 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005), (Dec., 2005, Honolulu, Hawaii, USA) ポスター

S. Tsukahara, Y. Kamiya, T. Fujiwara: Measurement of ordered associate of protonated tetraphenylporphine formed at toluene/aqueous H₂SO₄ interface by attenuated total internal reflection spectroscopy with polarized light, 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies

(Pacifichem 2005), (Dec., 2005, Honolulu, Hawaii, USA) ポスター.

○国内学会

藤原照文：前処理操作を組み合わせたフローインジェクション化学発光分析法，平成 17 年度第 2 回「フローシステムによる新規鉄鋼化学分析法の開発」フォーラム会議，（2006 年 2 月，東京）依頼講演

塚原 聡：直流および交流電場内における単一微粒子の動的挙動の顕微測定，分析科学討論セミナー（微小作用力の設計・制御と分析科学），（2005 年 9 月，大阪大学，豊中市）依頼講演

塚原 聡：油水界面に生成する分子集積体の in situ 顕微分光計測，第 4 回環境と分析化学のセミナー「みちのくセミナー」，（2006 年 3 月，東北大学，仙台市）依頼講演

上田真理子，田中俊考，中田功太，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：吸着逆ミセルを用いて合成したナイロン固定相によるニトロアニソール異性体の LC 分離挙動，日本分析化学会第 66 回分析化学討論会，（2005 年 5 月，北見）一般講演

片岡紘子，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：メタル炉加熱気化導入法によるホウ素の ICP 質量分析，日本分析化学会第 66 回分析化学討論会，（2005 年 5 月，北見）一般講演

片岡紘子，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：メタル炉加熱気化導入－ICP 原子スペクトル分析法による種々のホウ素化合物の気化挙動，日本分析化学会第 54 年会，（2005 年 9 月，名古屋大学，名古屋）一般講演

西川綾佳，末原道教，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：直流および交流電場内における単一 DNA の動的挙動の顕微蛍光測定，日本分析化学会第 54 年会，（2005 年 9 月，名古屋大学，名古屋）一般講演

神谷幸男，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：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顕微吸収分光測定による遷移モーメント解析，日本分析化学会第 54 年会，（2005 年 9 月，名古屋大学，名古屋）一般講演

松下孝也，片岡紘子，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：オキシ錯体を利用したメタル炉加熱気化導入－ICP－AES による鉄鋼試料中の微量金属の直接定量，日本分析化学会第 54 年会，（2005 年 9 月，名古屋大学，名古屋）一般講演

松下孝也，片岡紘子，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：ETV-ICP 原子スペクトル分析法によるホウ酸と窒化ホウ素の定量(Determination of borate and boron nitride by ETV-ICP atomic spectrometry)，日本鉄鋼協会第 150 回秋季講演大会，（2005 年 9 月，広島大学，東広島）一般講演

神谷幸男，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：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顕微分光解析，第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム，（2005 年 11 月，広島大学，東広島）一般講演

塚原 聡，獅野裕一，岡本泰明，藤原照文：液液界面における巨大 AOT 逆ミセルの生成と親水性蛍光分子抽出の in situ 顕微測定，日本溶媒抽出学会 第 24 回溶媒抽出討論会，（2005 年 11 月，関西大学，吹田市）一般講演.

岡本泰明，松下孝也，片岡紘子，塚原 聡，藤原照文：メタル炉加熱気化導入－ICP 原子発光分析法による鉄鋼試料中の亜鉛の直接定量，日本鉄鋼協会第 151 春季講演大会 次世代鉄鋼迅速オンサイト分析の実用化シンポジウム，（2006 年 3 月，早稲田大学，新宿区）一般講演.

○共同プロジェクトへの参加状況（国内）

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～）

○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)「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

日本学術振興会科学研究費補助金 基盤研究(B)「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

理学部学術研究助成金（委任経理金）三豊科学技術振興協会「液液界面反応の in situ 顕微分光計測システムの開発」 代表者 塚原 聡

理学部学術研究助成金（委任経理金）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

理学部学術研究助成金（委任経理金）日本鉄鋼協会「鉄鋼研究振興資金による助成」 代表者 岡本 泰明

○受賞状況

K. Nakada, A. Tanaka, M. Nishihara, I. U. Mohammadzai, Y. Okamoto, S. Tsukahara, and T. Fujiwara, “Silica gel-adsorbed cetyltrimethylammonium chloride surfactant: A new type of reversed admicellar stationary phase for the LC separation of positional isomers”, Symposium #16, The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 「Best Poster Award」 (2005).

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。

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。

フラーレンとカリックス [5] アレーンの包接を利用した超分子ポリマーの合成に成功した。

○発表原著論文

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

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

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

H. Iwamoto, and Y. Fukazawa (2005) Conformational Analysis of Dinaphthalene-1-carboxylate Complex of Sn^{IV}(tetraphenylporphyrin). *HETEROCYCLES*, **65**, 523–530.

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

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

Y. Mouri, Y. Fujiwara, T. Aoki, H. Yoshida, K. Naka, Y. Aoki, H. Yonemura, S. Yamada, T. Haino, Y. Fukazawa, and Y. Tanimoto (2005) 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.

- H. Iwamoto, T. Kawatani, and Y. Fukazawa (2005) Shielding effect of thioether C-S bond from proton chemical shifts of 4-thia-5 α - and 4-thia-5 β -androstane-17-ones. *Tetrahedron*, **61**, 3691–3696.
- T. Haino, Y. Matsumoto, and Y. Fukazawa (2005) Supramolecular Nano Networks Formed by Molecular-Recognition-Directed Self-Assembly of Ditopic Calix[5]arene and Dumbbell [60]Fullerene. *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 8936–8937.
- H. Iwamoto, N. Takahashi, T. Maeda, Y. Hidaka, and Y. Fukazawa (2005) Conformational Control of Flexible Molecular Tweezers by Intramolecular CH/ π Interaction. *Tetrahedron Lett.*, **46**, 6839–6842.
- N. K. Kubota, H. Iwamoto, Y. Fukazawa, and Y. Uchio (2005) Five New Sulfur-containing Polybrominated Bisindoles from the Red Alga *Laurencia brongniartii*. *HETEROCYCLES*, **65**, 2675–2682.

○総説

- H. Iwamoto, and Y. Fukazawa (2005) Conformational Analysis of Flexible Compounds with Chemical Shift Simulation. *Journal of Synthetic Organic Chemistry, Japan*, **63**, 1080–1089.

○国際会議

- T. Haino: Fullerene Containers Based on Calix[5]arene. The 207th ECS Meeting (May, 2005, Quebec City, Canada) (招待講演)

○国内学会

- 灰野岳晴：カリックス [5] アレーンとフラーレンのホストゲスト相互作用による超分子ナノネットワークの構築。2005 年日本化学会西日本大会（2005 年 10 月，山口宇部）（依頼講演）
- 灰野岳晴，小林睦美，深澤義正：配位結合を基盤とした自己集合カプセルの合成とゲスト包接挙動。第 35 回構造有機化学討論会（2005 年 9 月，大阪）（一般講演）
- 石津嘉子，三橋尚志，灰野岳晴，深澤義正：銀とフェナントロリンの配位結合を利用した自己集合フラーレンホストの合成。2005 年日本化学会西日本大会（2005 年 10 月，山口）（一般講演）
- Kubota K. Natsuki，岩本啓，深澤義正，内尾康人：パプアニューギニア産海面からの数種の新トリテルペン配当体。第 49 回香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会（2005 年 11 月，福井）（一般講演）
- 小林憂佳，岩本啓，深澤義正：ナフタレンを持つ新規不斉補助試薬と化学シフト計算法を組み合わせた第二級アルコールの絶対配置決定法の開発。第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2005 年 11 月，広島）（一般講演）
- 福永千種，灰野岳晴，深澤義正：ダブルカリックス [5] アレーンホスト分子によるフラーレンの包接。第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2005 年 11 月，広島）（一般講演）
- 小林憂佳，岩本啓，深澤義正：化学シフト計算法を用いる二級アルコールの絶対配置決定法の開発。第 86 春季年会（2006 年 3 月，船橋）（一般講演）
- 日浦紗喜，山口泰生，岩本啓，深澤義正：架橋位置の異なるカリックスアレーン-金属ポルフィリンホスト分子と軸配位子との錯形成挙動。第 86 春季年会（2006 年 3 月，船橋）（一般講演）
- 岩本啓，深澤義正：ポルフィリン環電流計算法を用いたスズポルフィリン-カルボン酸錯体の配座解析。第 86 春季年会（2006 年 3 月，船橋）（一般講演）
- 福永千種，灰野岳晴，深澤義正：カリックス [5] アレーンを基本骨格としたホスト分子による高次フラーレンの包接挙動。第 86 春季年会（2006 年 3 月，船橋）（一般講演）

福永千種, 灰野岳晴, 深澤義正: ジアセチレンで二カ所を架橋したダブルカリックス [5] アレーンホスト分子の合成とゲスト包接能。第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

福田克哲, 小林睦美, 灰野岳晴, 深澤義正: キャビタンドを基盤とした自己集合カプセルのゲスト包接挙動。第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

大宅徹, 岩本啓, 深澤義正: 多点水素結合部位を有する [3] ロタキサンの選択的合成。第 11 回機能性ホストゲスト化学研究会サマーセミナー (2005 年 7 月, 富山) (ポスター)

福永千種, 灰野岳晴, 深澤義正: 架橋にアセチレンを持つダブルカリックス [5] アレーンホスト分子の合成と高次フラーレンの会合。第 11 回機能性ホストゲスト化学研究会サマーセミナー (2005 年 7 月, 富山) (ポスター)

岩本啓, 堀憲二, 深澤義正: 線電流近似によるポルフィリンの環電流効果の定量化。第 35 回構造有機化学討論会 (2005 年 9 月, 大阪) (ポスター)

大宅徹, 岩本啓, 深澤義正: [3] ロタキサン生成過程における環状分子に導入した相補的な多点水素結合部位の効果。第 35 回構造有機化学討論会 (2005 年 9 月, 大阪) (ポスター)

日高裕輔, 前田琢磨, 高橋伸明, 岩本啓, 深澤義正: 分子内アルキル-芳香環相互作用による分子ピンセットのコンフォメーション制御。第 35 回構造有機化学討論会 (2005 年 9 月, 大阪) (ポスター)

福永千種, 灰野岳晴, 深澤義正: 二つのカリックス [5] アレーンのアップパーリムを二箇所で架橋したホスト分子の合成。第 35 回構造有機化学討論会 (2005 年 9 月, 大阪) (ポスター)

灰野岳晴, 松本陽子, 深澤義正: 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。第 35 回構造有機化学討論会 (2005 年 9 月, 大阪) (ポスター)

福岡博之, 片山正和, 灰野岳晴, 深澤義正: 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。第 35 回構造有機化学討論会 (2005 年 9 月, 大阪) (ポスター)

日浦紗喜, 岩本啓, 深澤義正: 架橋位置の異なるカリックスアレーン-金属ポルフィリンホスト分子の合成と性質。第 20 回シクロファン研究会 (2005 年 12 月, 奈良) (ポスター)

八和田雪美, 岩本啓, 深澤義正: クラウンエーテルを導入した分子ピンセットの合成研究。第 20 回シクロファン研究会 (2005 年 12 月, 奈良) (ポスター)

福永千種, 灰野岳晴, 深澤義正: 二箇所で架橋したダブルカリックス [5] アレーンホスト分子によるフラーレンの包接挙動。第 20 回シクロファン研究会 (2005 年 12 月, 奈良) (ポスター)

福田克哲, 灰野岳晴, 深澤義正: 四つのビピリジン配位子を持つカリックス [4] レゾルシンアレーンカプセルの型分子の合成。第 20 回シクロファン研究会 (2005 年 12 月, 奈良) (ポスター)

○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

研究助成金 住友財団 基礎化学研究助成 (助成番号: 050033)

「フラーレンの超分子形成を基盤とした自己組織化による超分子ナノ構造の制御」灰野岳晴

分子反応化学講座

反応物理化学研究グループ

スタッフ 山崎 勝義（教授）， 田林 清彦（助教授）， 高橋 修（助手）

○研究活動の概要

1. 高振動励起分子の反応素過程の研究

平成4月1日付で山崎が新潟大学理学部より転任し、大気化学および燃焼化学において重要視され始めている振動励起分子の化学反応素過程の解明を目指して新たに研究を開始した。平成17年9月にレーザ等装置一式を前任地より移設し、平成18年2月に実験を開始した。自作装置で合成したオゾンを経外光(266 nm)で解離し、生成した高振動励起酸素分子 $O_2(X^3\Sigma_g^-, 6 \leq v \leq 15)$ を、 $B^3\Sigma_u^- - X^3\Sigma_g^-$ 遷移を利用するレーザ誘起蛍光(LIF)法により検出することに成功した。単一振動準位占有数の経時変化の観測から、 CF_4 が振動励起酸素分子の単一量子緩和剤としてきわめて有効であることを見出し、独自に開発した Profile 積分法を利用して、振動準位 $v=6 \sim 14$ の CF_4 との衝突による緩和速度定数を決定すると同時に光解離直後の振動エネルギー分布を決定した。解析結果にもとづいて、非極性分子の高速振動緩和機構およびオゾン紫外光解離の動力学に関する検討を行った。

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、 $(N_2O)_n$ 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

我々は密度汎関数法を用いた内殻励起化学反応を理論的に追跡する手法の開発を行っている。昨年内殻励起動力学を加味したオーグメントスペクトル計算手法を新規に開発し、その応用例として水の $O1s \rightarrow 4a_1$ 励起における超高速解離過程に対して適用した。また同様の手法を HF , NH_3 に対しても適用し、我々の手法の一般性を確かめた。

5. 分子内動力学と単分子分解反応過程

化学反応は分子内の原子の組み換えによって起こるが、その詳細を理解するためには分子内エネルギーの緩和過程を理解する必要がある。我々は反応が起きるまでのエネルギー移動過程を理論的に調べる手段として短時間時間-周波数解析と最大エントロピー法によるスペクトル推定法を組み合わせることで短時間(数 10fs)の情報をもとに精度よくスペクトルを作成する手法を開発した。本手法により fs オーダーによるエネルギー移動を調べることが可能となり、反応前後のエネルギー移動を詳細に調べるツールが確立された。

○発表原著論文

- I. Tokue, K. Yamasaki, and S. Nanbu (2005) Vibrational Energies for the $\tilde{X}^1A_1$, $\tilde{A}^1A_1$, and $\tilde{B}^1A_1$ States of SiH_2/SiD_2 and Related Transition Probabilities Based on Global Potential Energy Surfaces. *J. Chem. Phys.*, **122**(14), 144307.
- K. Yamasaki, S. Tomita, T. Hatano, F. Taketani, and I. Tokue (2005) Radiative Lifetime and Multiquantum Vibrational Relaxation of $SO(B^3\Sigma^-, v'=3)$ by Collisions with He. *Chem. Phys. Lett.*, **413**(1–3), 231–236.
- I. Tokue, K. Yamasaki, S. Minamino, and S. Nanbu (2005) Theoretical Transition Probabilities for the $\tilde{A}^1A_1 - \tilde{X}^1B_1$ System of H_2O^+ and D_2O^+ and Related Franck-Condon Factors Based on Global Potential Energy Surfaces. *J. Theo. Comp. Chem.*, **4**(1) 225–245.
- K. Saito, T. Shiose, O. Takahashi, Y. Hidaka, F. Aiba, and K. Tabayashi, (2005) Unimolecular decomposition of formic acid in the gas phase—On the ratio of the competing reaction channels, *J. Phys. Chem. A* **109** (24), 5352–5357.
- K. Tabayashi, S. Tada, J. Aoyama, K. Saito, H. Yoshida, S. Wada, A. Hiraya, K. Tanaka (2005) Dissociation Mechanisms and Dynamics of core-excited $(N_2O)_n$ clusters. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 179–182.
- Jun-ichi Aoyama, Kiyohiko Tabayashi and Ko Saito (2005) Dissociative Excitation of Benzonitrile by Ultraviolet Multiphoton Absorption. *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, **172** (3), 241–249.
- S. Tada, C. Harada, H. Yoshida, S. Wada, A. Hiraya, K. Tanaka, and K. Tabayashi (2005) Production of methyl-oxonium ion and its complexes in the core-excited $(HC(O)OCH_3)_n$ clusters: H/H⁺ transfer from the α carbonyl, *J. Chem. Phys.* **123**, 124309.
- Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, and K. Honma (2005) Inner-shell Excitation of Ethanol Cluster at O K-edge. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 235–238.
- K. Okada, Y. Yamana, T. Ibuki, A. Fujii, S. Nagaoka, K. Tabayashi, Y. Shimada, Y. Morishita, Y. Tamenori, I.H. Suzuki, and K. Ohno (2005) Vibrational Effect on the Fragmentation Dynamics of the C K-shell Excited CF_2CH_2 . *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **144-147**, 187–189.
- Osamu Takahashi, Ko Saito, Masaaki Mitani, Hiroaki Yoshida, Fumitaka Tahara, Tetsuji Sunami, Keiichiro Waki, Yasunori Senba, Atsunari Hiraya, and Lars G. M. Pettersson (2005) Studies of the X-ray Absorption Spectra of Some Methylcyano Esters. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **142**, 113–119.
- K. Andersson, A. Gomez, C. Glover, D. Nordlund, H. Öström, T. Schiros, O. Takahashi, H. Ogasawara, L.G.M. Pettersson and A. Nilsson (2005) Molecularly Intact and Dissociative Adsorption of Water on Clean Cu(110): A Comparison with the Water/Ru(001) system. *Surf. Sci.*, **585**, L183–L189.

○国際会議

- K. Yamasaki: Radiative Lifetimes, Quenching, and Multiquantum Vibrational Relaxation of $SO(B^3\Sigma^-)$. *The 10th East Asian Workshop on Chemical Reactions* (Mar., 2006, Taipei, Taiwan) (招待講演)

- O. Takahashi, “Auger decay calculations with core-hole excited state molecular dynamics simulations”, *The 3rd Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications* (ASOMEA III) (June, 2005, Vadstena, Sweden) (一般講演)
- Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Yamamoto, F. Tahara, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma, “Probing of a local electronic structure in small hydrogen bonding clusters using soft-X-ray photoabsorption spectroscopy,” *3rd Conf. on Elementary Processes in Atomic Systems*, Miskolc, Hungary, Aug. 31-Sept. 2, 2005. (ポスター)
- C. Harada, S. Tada, K. Yamamoto, Y. Senba, H. Yoshida, A. Hiraya, S. Wada, K. Tanaka, and K. Tabayashi, “Dissociation mechanisms and dynamics of doubly charged CD_3CN molecules and $(\text{CD}_3\text{CN})_n$ clusters observed by PEPIICO spectroscopy”, *20th Int. Conf. on X05: X-ray and Inner-Shell Processes*, Melbourne, Australia, Jul.4-8, 2005. (ポスター)
- I.H. Suzuki, Y. Tamenori, Y. Morishita, K. Okada, T. Oyama, K. Yamamoto, K. Tabayashi, T. Ibuki, and K. Moribayashi, “Multi-charged Kr ions formed through photoionization of 2p electrons using a coincidence technique,” *20th Int. Conf. on X05: X-ray and Inner-Shell Processes*, Melbourne, Australia, Jul.4-8, 2005. (ポスター)
- K. Tabayashi S. Tada, H. Yoshida, S. Wada, and K. Tanaka, “Dissociation mechanisms and dynamics of core-excited organic molecules and clusters: Deuterium labeled methyl-formate,” *Int. Symp. on Isotope Science and Engineering from Basics to Applications*, Nagoya, Japan, Sept. 21-23, 2005. (ポスター)
- T. Maruyama, K. Yamamoto, C. Harada, and K. Tabayashi, “Dissociative double ionization of mechanisms and dynamics of core-excited $(\text{CO}_2)_n$ clusters”, *10th Hiroshima Int. Symp. on Synchrotron Radiation*, Higashi-Hiroshima, Japan, Mar. 16-17, 2006. (ポスター)
- C. Harada, K. Yamamoto, T. Maruyama, K. Tabayashi, S. Wada, H. Yoshida, A. Hiraya, and K. Tanaka, “State-selective dissociation of methyl-trifluoroacetate using time-of-flight mass spectrometer in the O K -edge region”, *10th Hiroshima Int. Symp. on Synchrotron Radiation*, Higashi-Hiroshima, Japan, Mar. 16-17, 2006. (ポスター)

○国内学会

- 山崎勝義, 藤井秀和, 渡辺信嗣, 波田野貴之, 徳江郁雄: $\text{O}_3/266\text{ nm}$ 光解離系で生成する $\text{O}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-, 8 \leq v \leq 13)$ の振動緩和過程と初期振動状態分布。第 21 回化学反応討論会 (2005 年 6 月, 大阪) (一般講演)
- 波田野貴之, 山崎勝義, 富田幸江, 金井恵美, 竹谷文一, 藤井秀和, 徳江郁雄: 単一振電励起 $\text{SO}(\text{B}^3\Sigma^-, v \leq 3)$ の N_2 との衝突による消光および振動緩和過程。第 21 回化学反応討論会 (2005 年 6 月, 大阪) (ポスター)
- 藤井秀和, 渡辺信嗣, 波田野貴之, 徳江郁雄, 山崎勝義: $\text{O}_3/266\text{ nm}$ 光解離系で生成する $\text{O}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-, 8 \leq v \leq 13)$ の振動緩和速度定数と初期振動状態分布の決定。2005 年支部合同新潟地方大会 (2005 年 8 月, 長岡) (一般講演)
- 波田野貴之, 藤井秀和, 渡辺信嗣, 徳江郁雄, 山崎勝義: 単一振電励起 $\text{SO}(\text{B}^3\Sigma^-, v \leq 3)$ の N_2 との衝突による消光および振動緩和過程の研究。2005 年支部合同新潟地方大会 (2005 年 8 月, 長岡) (一般講演)
- 徳江郁雄, 山崎勝義, 南部伸孝: 3 次元ポテンシャルに基づく $\text{SiH}_2(\tilde{\text{A}}, \tilde{\text{B}})$ 状態の解離過程。分子構造総合討論会 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)
- 渡辺信嗣・藤井秀和・波田野貴之・徳江郁雄・山崎勝義: O_3 の 266 nm 光解離により生成する酸素分子の初期振動状態分布と CF_4 による振動緩和。(第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月, 東広島) (一般講演)
- 山本恵輔, 丸山友絵, 田林清彦, 岡田和正: ギ酸クラスターの内殻励起と誘起反応過程の研究。

第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月, 広島大学, 東広島市) (一般講演)

日野めぐみ, 竹本真唯, 長岡伸一, G. Pruemper, 為則雄祐, J. Harries, 鈴木 功, 高橋修, 岡田和正, 田林清彦, L. X. -Jing, T. Lischke, 上田 潔: Si:2p イオン化によって引き起こされる $\text{F}_3\text{SiCH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ 気体のサイト選択的解離。第 19 回日本放射光学会年会・放射光化学合同シンポジウム (2006 年 1 月, 名古屋大学) (一般講演)

山本恵輔, 丸山友絵, 田林清彦, 岡田和正, 為則雄祐, 鈴木功, 長岡伸一, 下條竜夫, 田村孝, 伊勢田満広, 真部弘和, 本間健二, 田中大: ギ酸クラスターの内殻励起と光誘起反応過程の研究。第 19 回日本放射光学会年会・放射光化学合同シンポジウム (2006 年 1 月, 名古屋大学) (ポスター)

高橋修: 水の内殻共鳴励起後のオージェ崩壊過程。2005 分子構造総合討論会 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター発表)

高橋修: 弱い相互作用系に対する理論的研究。第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月, 広島大学, 東広島市) (一般講演)

○国際共同研究・国際会議開催実績

山崎勝義: The 10th East Asian Workshop on Chemical Reactions (Mar., 2006, Taipei, Taiwan) [第 10 回東アジア化学反応研究会(2006 年 3 月, 台北, 台湾)]日本代表団組織委員長

○研究助成の受け入れ

松尾学術研究助成金, レーザ照射による複数振動準位の同時生成と新しい吸熱化学反応過程の発見, 代表者 山崎勝義

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。

1. 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** 系の詳細な本論文を，早稲田大学秋葉教授，分子研永瀬教授グループ，（前）電気通信大岩崎教授グループとの共同研究として発表することができた。また，初の 16 π 骨格を有するポルフィリンの酸化体の単離についても，秋葉教授，岩崎教授グループ，産総研都築博士グループとの共同研究の成果として発表することができた。
2. 7-シラノルボルナジエン化合物の特異な反応性に着目し，新規ケイ素活性種の開発をおこなった。ケイ素上に官能基を有する 7-シラノルボルナジエン化合物から，熱または光分解によってシリレンを発生させることに成功した。
3. 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。分子内の配位可能な位置にフルオレニルイリドを導入することに成功した。その結果，分子内シリル基移動を抑制することに成功し，イリドの単離・構造決定に成功した。(ii) また最近，ベンゼン環のオルト位にケイ素原子置換基とホウ素原子置換基を有する化合物の合成をおこない，フッ化物イオンの取り込みを検討した。また，ヒドロシリル基を有する化合物では，アルコール類，アミン類との脱水素縮合反応が進行することを見いだした。
4. 特筆すべきこととしては，日本学術振興会先端研究拠点事業「新規典型元素化合物の創製とその応用」が採用され（2007年3月まで），広島大学を拠点機関として典型元素化学の国内外ネットワーク構築を目指すプロジェクトをスタートすることができたことである。国内の協力機関は，早稲田大学（秋葉欣哉教授），東京大学（川島隆幸教授），筑波大学（関口章教授），京都大学（時任宣博教授），東北大学（吉良満夫教授）であり，米国の拠点機関はアラバマ大学（コーディネーターは Prof. A.J.Arduengo），協力機関はカリフォルニア大学 Riverside (Prof. C. A. Reed)，ドイツの拠点機関はベルリン自由大学（コーディネーターは Prof. K. Seppelt），協力機関はブラウンシュバイク工科大学 (Prof. W.-W. du Mont)) であるが，その事業のコーディネーターとして，10月27，28日に第一回シンポジウムを開催した。協力研究者は，海外25名，国内51名であったが，シンポジウムでは海外から5名，国内から4名の講演者を招待でき，実りある討論ができた。またこの事業の一環として，D1（現在 D2）の学生一人（山口虎彦君）をカリフォルニア大学 Riverside 校 (Prof. C.A.Reed 教授) に3ヶ月弱留学させることができた，昨年から行っていた共同研究を大きく発展させることができた。

○発表原著論文

- M. Yamashita, Y. Yamamoto, K.-y. Akiba, D. Hashizume, F. Iwasaki, N. Takagi, S. Nagase (2005) 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.
- M. Itagaki, K. Masumoto, Y. Yamamoto (2005) Asymmetric cyclopropanation of

- 2,5-dimethyl-2,4-hexadiene by copper catalyst bearing new bisoxazoline ligand. *J. Org. Chem.*, **70**, 3292–3295.
- 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 (2005) 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.
- M. Yamashita, H. Murakami, T. Unrin-in, A. Kawachi, K.-y. Akiba, and Y. Yamamoto (2005) Synthesis and Structure of a Germylene Bearing a 1,8-Dimethoxyanthracene Ligand. *Chem. Lett.*, **34**, 690–691.
- A. Kawachi, M. Okimoto, and Y. Yamamoto (2005) Functional Group Transformations and Stereochemistry of Sila-Functionalized 7-silanorbornadienes. *Chem. Lett.*, **34**, 960–961.
- T. Yamaguchi, Y. Yamamoto, Y. Fujiwara, and Y. Tanimoto (2005) Evidence for a Transition State Model Compound of In-Plane Vinylic SN2 Reaction. *Org. Lett.*, **7**, 2739–2742.
- J. Drabowicz, J. Luczak, P. Kielbasinski, M. Mikolajczyk, Y. Yamamoto, S. Matsukawa, K.-y. Akiba, F. Wang, P. L. Polavarapu, M. W. Wieczorek (2005) Some chiral and achiral low- and high-coordinated selenium and tellurium compounds: Syntheses, structural determination, and selected synthetic applications. *Phosphorus Sulfur and Silicon and the Related Elements*, **3-4**, 741–753.
- W. Nakanishi, S. Hayashi, T. Furuta, N. Itoh, Y. Nishina, M. Yamashita, Y. Yamamoto (2005) Extended Hypervalent 5c-6e interactions: Linear alignment of five C-Z---O---Z-C (Z=S, Se) atoms in anthraquinone and anthracene systems. *Phosphorus Sulfur and Silicon and the Related Elements*, **5-6**, 1351–1355.
- A. Kawachi, H. Maeda, and K. Tamao (2005) Substituent-Control of Two Modes of Intramolecular Reactions of Allyloxy-Silyllithiums and Propargyloxy-Silyllithiums. *Bull. Chem. Soc. Jpn*, **78**, 1520–1527.
- Y. Yamamoto, A. Yamamoto, S.-y. Furuta, M. Horie, M. Kodama, W. Sato, K.-y. Akiba, S. Tsuzuki, T. Uchimarui, D. Hashizume, F. Iwasaki (2005) Synthesis and Structure of 16 π Octaalkyltetraphenylporphyrins. *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 14540–14541.

○総説

山本陽介, 河内敦 (2005) 研究室紹介—北から南から—. *Organometallic News*, No.4, 135-136.

○国際会議

- Y. Yamamoto: Synthesis and Structure of First 16 π Oxidized Porphyrins. 7th International Symposium on Biotechnology Metal Complexes and Catalysis (BMC-VII) (Aug., 2005, Beijing, China) (招待講演)
- Y. Yamamoto, T. Yamaguchi, K.-y. Akiba, D. Kinoshita, C. A. Reed: Approach to Synthesis and Structure of Hexacoordinate Carbon Compounds (12-C-6). JSPS Core-to-Core Program "Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application" First Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry (Oct., 2005, Hiroshima, Japan) (招待講演)
- Y. Yamamoto: Synthesis and Structure of 16 π Octaalkyltetraphenylporphyrins. The 13th Korea-Japan Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry (Nov., 2005, Jeju, Korea) (招待講演)
- Y. Yamamoto; K.-y. Akiba: Preparation of new tridentate ligand precursors: Application to synthesis of main group element and transition metal compounds. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Inorganic Chemistry, Symposium 149. Metal Complexes of Mixed-Donor Multidentate Ligands: Chemistry and Applications (Dec., 2005, Honolulu, USA) (招待講演)

A. Kawachi, M. Okimoto, and Y. Yamamoto: Functional Group Transformations of 7-Silanorbornadiene derivatives. The 14th International Symposium on Organosilicon Chemistry (July, 2005, Wuerzburg, Germany) (一般講演)

A. Kawachi, H. Yakushijin, H. Nishi, Y. Yamamoto: Synthesis, Structures, and Reactions of Novel Boryl Tellurides. 12th International Conference on Boron Chemistry (IMEBORON-XII) (Sept., 2005, Sendai, Japan) (ポスター)

Y. Yamamoto, D. Saito, T. Masui: Synthesis of hypervalent carbon and boron compounds from a newly synthesized tridentate ligand precursors bearing coordinating sulfur atoms. The International Symposium on Dynamic Complexes (ISDC 2005)(Sendai) (Oct., 2005, Sendai, Japan) (ポスター)

○国内学会

山本陽介: 研究を行っていくために重要だと思うこと。第40回有機反応若手の会 (2005年7月, 和歌山) (特別講演)

山本陽介: 超原子価 5 配位炭素およびホウ素化合物における相互作用。第 1 回分子情報ダイナミクス研究会 (2005年9月, 大阪) (招待講演)

山本陽介: 16 π ポルフィリンの合成と構造。第40回ヘテロ原子化学セミナー (2005年9月, 玉野) (招待講演)

山本 陽介: 超原子価 5 配位炭素およびホウ素化合物構築のための新規 3 座アントラセン配位子合成における官能基選択性。日本化学会西日本大会ミニシンポジウム「選択的有機反応の開発」 (2005年10月, 宇部) (依頼講演)

山本陽介, 姜新東, 松川史郎, 秋葉欣哉: 超原子価 5 配位リン化合物の位置異性体の反応・性質の差。第55回有機反応化学討論会 (2005年9月, 新潟) (一般講演)

河内敦, 谷厚志, 山本陽介: (2-ボリルフェニル)シラン誘導体の合成, 構造および反応。第32回ヘテロ原子化学討論会 (2005年12月, 筑波) (一般講演)

○国際学会

Y. Yamamoto, D. Saito, T. Masui: Synthesis of hypervalent carbon and boron compounds from a newly synthesized tridentate ligand precursors bearing coordinating sulfur atoms. The International Symposium on Dynamic Complexes (ISDC 2005) (Oct., 2005, Sendai, Japan) (ポスター)

T. Yamaguchi, Y. Yamamoto, Y. Fujiwara, Y. Tanimoto: Attempted synthesis of a transition state model of vinylic S_N2 reaction. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

T. Kashiwaba, Y. Yamamoto: Development of a new efficient synthetic method of spherand. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

H. Yamamichi, S. Matsukawa, Y. Yamamoto: Synthesis of pentacoordinate phosphorus compounds bearing a novel new tridentate ligand. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

X. Jiang, H. Yamamichi, Y. Yamamoto: Synthesis of P-Me O-equatorial spirophosphorane bearing new bidentate ligand. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem

- 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- D. Saito, T. Masui, Y. Yamamoto: Synthesis of a novel tridentate ligand precursor bearing two coordinating sulfur atoms and application for synthesis of hypervalent carbon and boron compounds. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- M. Kodama, M. Horie, S. Furuta, Y. Yamamoto: Synthesis and structure of 16 pi oxidized octaalkyltetraphenylporphyrins. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- J. Nakatsuji, T. Nishii, Y. Yamamoto: Attempts at synthesis of hypervalent pentacoordinate carbon compounds bearing two carboxyl ligands. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- H. Yamada, Y. Yamamoto: Synthesis of tridentate anthracene ligand precursor, 1,8-dipyrrolyl-9-bromoanthracene and its application for synthesis of transition metal compounds. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Organic Chemistry, Symposium 184. Novel Heteroatom Functionality in Organic Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- A. Kawachi, M. Okimoto, Y. Yamamoto: Functional group transformations and reactions of 7-silanorbornadiene derivatives. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Inorganic Chemistry, Symposium 39. Recent Developments in Organoboron and Organosilicon Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- A. Kawachi, T. Yoshioka, Y. Yamamoto: 1,4-Silyl migration in (2-trimethylsilylphenyl)phosphonium ylides. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Inorganic Chemistry, Symposium 39. Recent Developments in Organoboron and Organosilicon Chemistry (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

○国内学会

- 齊藤大悟, 榊井喬, 山本陽介: 硫黄原子を配位原子とした新規三座配位子を有する超原子価 5 配位炭素化合物の合成と構造。第 35 回構造有機化学討論会 (2005 年 9 月, 大阪) (一般講演)
- 河内敦, 谷厚志, 山本陽介: (2-ボリルフェニル)ヒドロシランの合成およびフッ化物イオンとの反応。第 52 有機金属化学討論会 (2005 年 9 月, 京田辺) (ポスター)
- 小玉めぐみ, 古田晋也, 山本陽介: ポルフィリンの酸化体の合成と構造。日本化学会西日本大会 ミニシンポジウム「選択的有機反応の開発」(2005 年 10 月, 宇部) (一般講演)
- 山道秀映・松川史郎・山本陽介: 強固な骨格を有する新規三座配位子の合成とリン化合物への応用。第 2 回ナノバイオインフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月 26 日-27 日, 東広島) (一般講演)
- 齊藤大悟, 榊井喬, 山本陽介: 硫黄原子を配位原子とした新規三座配位子を有する超原子価炭素およびホウ素化合物の合成と構造。第 32 回ヘテロ原子化学討論会 (2005 年 12 月, 筑波) (ポスター)
- 田中俊宏, 雲林院敏文, 山本陽介: 超原子価 4 配位酸素化合物(10-O-4)の合成の試み。第 32 回へ

テロ原子化学討論会（2005 年 12 月，筑波）（ポスター）

山口虎彦，山本陽介，木下大輔，秋葉欣哉，Reed, C. A.：超原子価 6 配位炭素化合物の合成と構造。第 86 日本化学会春季年会（2006 年 3 月 27 日–30 日）（一般講演）

河内敦，吉岡敬裕，山本陽介：ホスホニウムフルオレニリドを分子内配位子とする五配位ケイ素化合物の合成の試み。第 86 日本化学会春季年会（2006 年 3 月 27 日–30 日）（一般講演）

河内敦，財間政智，谷厚志，山本陽介：(2-ボリルフェニル)ヒドロシランとアルコール類との脱水素縮合反応。第 86 日本化学会春季年会（2006 年 3 月 27 日–30 日）（一般講演）

河内敦，谷厚志，山本陽介：(2-リチオフェニル)ハロシラン化合物の合成と反応。第 86 日本化学会春季年会（2006 年 3 月 27 日–30 日）（一般講演）

河内敦，沖本真広，山本陽介：7-シラベンゾノルボルナジエン誘導体の分解反応。第 86 日本化学会春季年会（2006 年 3 月 27 日–30 日）（一般講演）

○国際共同研究・国際会議開催実績

・国際協同研究

山本陽介，日本学術振興会・先端研究拠点事業“拠点形成促進型”「新規典型元素化合物の創製とその応用」，日本側コーディネーター（2005 年 4 月–2007 年 3 月）

・国際会議主催

山本陽介（組織委員長），河内敦（実行委員），JSPS Core-to-Core Program "Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application" First Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry（2005 年 10 月 27–28 日，広島）。

○共同プロジェクトへの参加状況（国内）

山本陽介，河内敦，分子情報ダイナミクス研究会（代表：福住俊一（大阪大学））（2006 年–）

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金特定領域研究(A)「時空間制御」，「炭素および高周期元素反応活性錯体の時空間制御」，代表者 山本陽介

科学研究費補助金基盤研究(B)，「結合および相互作用エネルギーの定量的評価法の開発と新規典型元素化合物の構築」，代表者 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」，山本陽介

科学研究費補助金基盤研究 (C)，「典型元素複核アート錯体の合成と機能」，代表者 河内敦

日本学術振興会先端研究拠点事業（拠点形成促進型），「新規典型元素化合物の創製とその応用」，代表者 山本陽介

○受賞状況

山口虎彦（D1），日本化学会第 86 春季年会学生講演賞，「超原子価 6 配位炭素化合物の合成と構造」（2006 年 3 月）

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、シクロプロパンなどの小員環化合物の合成的研究において、8-フェニルメンチルアミンの合成法を開発し、それをキラル補助基に用いたピリジニウムイリドの反応において高ジアステレオ選択性を実現した。また、天然に存在するシンコナルカロイドを用いた不斉触媒化も実現した。さらに、それらの不斉誘導機構を有機反応機構的に検討した。高いZ-選択性のPeterson反応の開発を既にしてきたが、その反応の中間体モデルとなる化合物を用いて反応機構を明らかにした。現在、C₂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も研究している。スピロ交差共役エノンへの環状付加反応において既に高い面選択的を見出しているが、この反応の不斉反応への拡張を検討している。また、タンデムMichael反応を用いたビスシクロ化合物の効率的合成法を見出しているが、これについても不斉反応への拡張を検討している。

生理活性天然物の合成的研究として、生理活性・構造の観点から注目されているScyphostatin, Phomoidride B (CP-263,114), Daphniphyllum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。これらにおいては、Michael反応の介在したタンデム反応および閉環のメタセシスとDiels-Alder反応を組み合わせたドミノ型反応などを鍵反応として検討を行っている。

酒類総合研究所との共同研究として、酵母から単離された新規な酵素を用いた1,3-ジオールの非対称化反応を見出し、酵素反応における溶媒効果の解析法として新規な3変数モデルを提案し、酵素を含まない反応系における選択性との関連付けにも成功した。

環境問題に関連して、牡蛎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請負、学外の研究者に協力している。

○発表原著論文

S. Kojima, T. Hidaka, and A. Yamakawa (2005) Application of organocerium reagents for the efficient conversion of Z- α,β -unsaturated Weinreb amides to Z- α,β -unsaturated ketones. *Chemistry Letters*, 470–471.

R. Takagi, K. Tojo, M. Iwata, and K. Ohkata (2005) 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. *Organic and Biomolecular Chemistry*, **3**, 2031–2036.

R. Takagi, Y. Miwa, S. Matsumura, and K. Ohkata (2005) One-pot synthesis of adamantane derivatives by domino Michael reactions from ethyl 2,4-dioxocyclohexanecarboxylate. *Journal of Organic Chemistry*, **70**, 8587–8589.

○国際会議

S. Kojima, T. Fukuzaki, Y. Murai, and A. Nakagawa: Z-Selective Peterson reaction and related mechanistic

- examinations. The 11th Kyushu International Symposium of Physical Organic Chemistry (KISPOC-XI) (Sep., 2005, Fukuoka, Japan) (一般講演)
- S. Kojima, T. Fukuzaki, Y. Murai, and A. Nakagawa: Studies related to Z-selective Peterson reactions. The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) (Dec., 2005, Honolulu, USA) (一般講演)
- M. Murakami, K. Hiroike, S. Matsumura, S. Kojima, and K. Ohkata: Diastereoselective cyclopropanation reaction of pyridinium ylides using *N*-substituted 8-phenylmenthylamines. The 11th Kyushu International Symposium of Physical Organic Chemistry (KISPOC-XI) (Sep., 2005, Fukuoka, Japan) (ポスター)
- Y. Miwa, T. Nerio, R. Takagi, and K. Ohkata: Stereoselectivity in the construction of the substituted bicyclo[3.3.1]nonenone core by successive Michael reactions. The 11th Kyushu International Symposium of Physical Organic Chemistry (KISPOC-XI) (Sep., 2005, Fukuoka, Japan) (ポスター)
- C. Lin, Y. Hiraga, K. Masaki, H. Iefuji, and K. Ohkata: Enzymatic desymmetrization and asymmetrization of 2-substituted and 2,2-disubstituted 1,3-propanediols by a novel lipase isolated from *Cryptococcus spp.* S-2. The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- K. Tanabe, A. Fujie, N. Ohmori, S. Kojima, and K. Ohkata: Synthetic studies on Daphnezomine C based upon ring closing Metathesis. The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- M. Murakami, K. Hiroike, S. Kojima and K. Ohkata: Diastereoselective cyclopropanation using α -pyridinium acetamides with 8-phenylmenthylamine as the chiral auxiliary. The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- Y. Miwa, T. Nerio, R. Takagi, and K. Ohkata: Construction of the bicyclo[3.3.1]nonenone core by successive Michael reactions of 2-cyclohexenone derivatives. The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)
- K. Yamahira, T. Shikano, A. Toryu, Y. Hiraga, and K. Ohkata: Toxic substances towards oyster from red tide phytoplankton heterocapsa circularisquama. The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

○国内学会

- 小島聡志: 選択的 Peterson 反応の開発とその反応機構的検討。第 21 回若手化学者のための化学道場 (2005 年 9 月, 出雲) (依頼講演)
- 近藤あさ子, 田村由紀子, 高木隆吉, 大方勝男: 交差共役 4,4-二置換シクロヘキサジエノンの Diels-Alder 反応における水素結合による加速効果。2005 年日本化学会西日本化学討論会 (2005 年 10 月, 宇部) (一般講演)
- 鈴木麻希, 渡邊亜希人, 小島聡志, 大方勝男: シンコナルカロイドをブレンステッド塩基触媒として用いる不斉シクロプロパン化反応。2005 年日本化学会西日本化学討論会 (2005 年 10 月, 宇部) (一般講演)
- 藤井絵美, 美和有希子, 高木隆吉, 大方勝男: シンコナルカロイドを用いた不斉 Michael 反応に関する研究。2005 年日本化学会西日本化学討論会 (2005 年 10 月, 宇部) (一般講演)
- 東條健剛, 岩田昌門, 宮永渉, 高木隆吉, 大方勝男: 天然物 Scyphostatin の親水性類縁体の合成研究。2005 年日本化学会西日本化学討論会 (2005 年 10 月, 宇部) (一般講演)
- 藺春蕾, 平賀良知, 大方勝男: 酵素反応における立体選択性の溶媒効果。第 2 回ナノ・バイオ・

インフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月, 東広島) (一般講演)

鈴木麻希, 小島聡志, 大方勝男: 水酸基をもつシンコナルカロイド誘導体をブレンステッド塩基として用いた触媒不斉シクロプロパン化反応の検討。第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月, 東広島) (一般講演)

中川玲, 村井豊, 小島聡志: シリルオキシ基を脱離基とする E1cb 反応をモデル反応とした Peterson 反応の機構の検討。第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月, 東広島) (一般講演)

田邊和久, 藤江綾子, 大森直樹, 小島聡志, 大方勝男: ピペリジン環骨格を持つ天然物合成へのオレフィンメタセシスの応用。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

鈴木麻希, 小島聡志, 大方勝男: シンコナルカロイド誘導体を不斉触媒として用いたエナンチオ選択的シクロプロパン化反応。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

梅田康弘, 茶林敬司, 小島聡志, 大方勝男: 新規キラルアミンの合成と不斉反応への応用。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

美和有希子, 練苧喬士, 高木隆吉, 大方勝男: 連続的 Michael 反応による多置換ビスクロ [3.3.1] ノネノン骨格の構築における立体選択性。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

藤井絵美, 美和有希子, 高木隆吉, 大方勝男: シンコナルカロイドを不斉源としたシクロヘキセノン誘導体の Michael 反応に関する研究。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

東條健剛, 岩田昌門, 宮永渉, 高木隆吉, 大方勝男: 天然物 Scyphostatin の合成研究。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

近藤あさ子, 田村由紀子, 高木隆吉, 大方勝男: 交差共役ジエノンをを用いた Diels-Alder 反応の水素結合による加速効果。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

藺春蕾, 平賀良知, 大方勝男: 有機反応および酵素反応の立体選択性における溶媒効果の解析; 遷移状態における極性, 活性化体積, 疎水性の情報。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 船橋) (一般講演)

村上正晃, 廣池恭子, 松村修二, 小島聡志, 大方勝男: 8-フェニルメンチルアミンを有するピリジニウム塩を用いたジアステレオ選択的シクロプロパン化反応の検討。第 21 回若手化学者のための化学道場 (2005 年 9 月, 出雲) (ポスター発表)

美和有希子, 練苧喬士, 高木隆吉, 大方勝男: 連続的 Michael 反応による置換ビスクロ [3.3.1] ノネン骨格の構築。第 55 回有機反応化学討論会 (2005 年 9 月, 新潟) (ポスター発表)

村上正晃, 松村修二, 小島聡志, 大方勝男: 8-フェニルメンチルアミンをキラル補助基とするピリジニウムイリドによるジアステレオ選択的シクロプロパン化反応の検討。第 55 回有機反応化学討論会 (2005 年 9 月, 新潟) (ポスター発表)

山平和也, 鹿野達也, 鳥龍明子, 平賀良知, 大方勝男: 海洋渦鞭毛藻 *Heterocapsa circularisquama* から単離された二枚貝致死活性物質 Heterocapsatoxin 類の単離・構造解析。第 47 回天然物化合物討論 (2005 年 10 月, 吹田) (ポスター発表)

田邊和久, 藤江綾子, 大森直樹, 小島聡志, 大方勝男: ピペリジン環を含む多環式天然物に向けての合成研究。第 35 回複素環化学討論会 (2005 年 10 月, 吹田) (ポスター発表)

梅田康弘, 茶林敬司, 小島聡志, 大方勝男: 立体選択的アルキル化を用いた C₂ 対称ピペラジンの合成。第 35 回複素環化学討論会 (2005 年 10 月, 吹田) (ポスター発表)

○産学官連携実績

広島県食品工業技術センター「新規酵母の開発」, 大方勝男

カネカテクノロジー「天然化合物の精密構造解析に関する研究」、大方勝男
独立行政法人酒類総合研究所，大方勝男

○国際共同研究実績

L. A. Paquette 教授（米国 Ohio State 大学），大方勝男，高木隆吉

S. Niwayama 教授（米国 Texas Tech 大学），大方勝男，平賀良知

先端研究拠点事業「新規典型元素化合物の創製とその応用」，小島聡志

○研究助成の受け入れ状況

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 特定領域研究

「連続的 Michael 反応を基盤とした多置換ビシクロ骨格のワンポット構築法の開発」

代表 高木隆吉（2005 年度）

広島県酒造組合連合会「新酵母の開発」代表 大方勝男（2005 年度）

カネカテクノロジー（株）「天然化合物の精密構造解析に関する研究」代表 大方勝男（2005 年度）

ピジョン（株）「天然物有機化学における学術研究」代表 大方勝男（2005 年度）

大塚化学（株）「生理活性化合物の有機合成の研究」代表 大方勝男（2005 年度）

日本ポリエチレン（株）「メタロセン触媒の活性化機構に関する研究」代表 大方勝男（2005 年度）

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

当研究グループの研究ターゲットは、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。2005 年度の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

水素結合は生体系で重要な役割を担っている。今回、水クラスターのマトリックス単離赤外スペクトルを測定し、各クラスターの理論計算と比較することにより、水素結合様式と水素結合した OH 伸縮振動の波数値との間に密接な関係があることを明らかにした。この関係は、マトリックスや希薄溶液中の水クラスターは勿論、水や氷の OH 伸縮振動の帰属にも共通に利用できることが分かった。

②マトリックス単離赤外分光法による光化学反応の追跡とアミノイミノ互変異性

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た。*p*-トルイジンおよび 2-アミノピリジンについて、アルゴンで希釈した試料を 12 K に冷却した CsI 板に吹き付け、UV 照射する実験を行った。これより、アミノ基が置換した芳香族に対して、UV 照射によりアミノイミノ互変異性が可逆的に進行することを明らかにした。また、2-アミノピリジンの T₁ 励起状態の赤外スペクトルも測定できた。

③マトリックス単離近赤外分光法と振動の非調和定数

Gaussian 03 のプログラムにより結合音や倍音の非調和振動を計算できるようになった。一方、マトリックス単離近赤外分光法を用いれば、単一分子の結合音や倍音が観測できると考えられる。しかしながら、研究例は少ない。そこで今回、酢酸のアルゴンマトリックス単離近赤外スペクトル (3950–12000 cm⁻¹) を測定した。この結果より、非調和振動の理論計算値は実測値をかなりよく再現していることを明らかにした。

④内殻励起による複素環化合物の特異的解離

内殻電子の局在性を利用すれば、分子内の特定の原子を選択的に励起することが可能である。今回は、2-アミノ-3-メチルピリジンの窒素および炭素内殻領域でのフラグメンテーションを調べた。その結果、特に窒素内殻イオン化が起こる励起エネルギーにおいて、窒素原子周りでの解離が顕著となる特徴的な反応が観察された。

⑤電子線衝撃法による励起分子の解離反応観測装置の開発

励起源として数百 eV の電子線を用いると分子の内殻励起が可能となる。しかし、これまで電子線を用いた内殻励起は吸収スペクトルの研究がほとんどで、Auger 崩壊後生成する解離イオン種を測定した研究はほとんど存在しない。そこで今回、新規に電子線を励起源とした気相反応装置の作製・開発を行った。

⑥重水素ラベルによる 2-butoxyethanol の水和挙動の研究

2-butoxyethanol (C₄E₁) の CH 伸縮 (ν_{CH}) バンドは、水溶液中において C₄E₁ 濃度低下に伴って高波数シフトすることが知られている。この高波数シフトの原因は、溶液構造やアルキル基まわりの溶媒和変化など様々な観点から議論されているが、未だに明らかになっていない。これは、ν_{CH} モードのカップリングや他の振動の倍音や結合音の影響によって、3000~2800 cm⁻¹ 領域の振動バンドの帰属が非常に困難であることが一因である。したがって本研究では、C₄E₁ のブチル基の一部を選択的に重水素化し、水溶液中における孤立 ν_{CD} バンドの挙動を詳細に調べた。また、量子化学シミュレーションを併用し、ν_{CD} バンドの波数シフトと C₄E₁ の水和との関連性を明らかにした。

⑦水溶性高分子の立体規則性と溶解性の相関

我々は、これまでに赤外 (IR)・ラマン分光法と密度汎関数法によるスペクトルシミュレーションを併せ使い、poly(*N*-isopropylacrylamide) (PNiPA) のコイル・グロビュール転移過程で観測されるスペクトルの変化は、主に局所構造変化を反映することを明らかにしてきた。また近年、高分子

鎖の立体規則性により転移温度が変化するという報告があり、局所構造が転移挙動に影響を及ぼすことが示唆されている。そこで、立体特異性重合によって得た PNiPA の赤外スペクトルを様々な溶媒中で測定し、局所構造の変化が赤外スペクトルに与える影響を研究した。

⑧DNA 塩基モデル化合物の溶液中における keto-enol 互変異性

2-pyridone (2PY) は、核酸塩基のモデル化合物として研究されており、低温マトリックス単離状態やガス中では、keto 型と enol 型が共存し、光などの外部刺激によって異性化する。一方、溶液中における 2PY についての研究は非常に少ない。我々は、高感度の分光器を用い、希薄溶液中における 2PY の会合および変異性を赤外分光法および量子化学計算を併用して詳細に調べ、2PY の安定性に対する非極性溶媒の効果を研究した。

○発表原著論文

- K. Ohno, H. Takao, T. Masuda, and Y. Katsumoto (2005) Two characteristic H-bonded O-H stretching bands for the compounds containing ether oxygen and hydroxyl oxygen. *Chem. Lett.*, **34**(2), 250–251.
- Md. R. Matin, S. A. Wahab, Y. Katsumoto, H. Matsuura, and K. Ohno (2005) 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.
- N. Akai, H. Yoshida, K. Ohno, and M. Aida (2005) 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.
- N. Akai, K. Ohno, and M. Aida (2005) Photoinduced amino-imino tautomerism of 2-aminopyridine in a low-temperature argon matrix. *Chem. Phys. Lett.*, **413**(4-6), 306–310.
- N. Akai, Y. Katsumoto, K. Ohno, and M. Aida (2005) Vibrational anharmonicity of acetic acid studied by matrix-isolation near-infrared spectroscopy and DFT calculation. *Chem. Phys. Lett.*, **413**(4-6), 367–372.
- K. Ohno, M. Okimura, N. Akai, and Y. Katsumoto (2005) The effect of cooperative hydrogen bonding on the OH stretching-band shift for water clusters studied by matrix-isolation infrared spectroscopy and density functional theory. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **7**(16), 3005–3014.
- Md. R. Matin, Y. Katsumoto, H. Matsuura, and K. Ohno (2005) Hydration of short-chain poly(oxyethylene) in carbon tetrachloride: An infrared spectroscopic study. *J. Phys. Chem. A*, **109**(42), 19704–19710.
- K. Okada, M. Kosugi, A. Fujii, S. Nagaoka, T. Ibuki, S. Samori, Y. Tamenori, H. Ohashi, I. H. Suzuki, and K. Ohno (2005) Variation in resonant Auger yields into the 1G_4nl states of Kr across the L_3 threshold. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **38**(4), 421–431.
- T. Ibuki, K. Okada, M. Takahashi, S. Samori, T. Goya, Y. Senba, H. Yoshida, A. Hiraya, and K. Ohno (2005) Energy relaxation through the π^* -state in C, F and O K-shell excited CF_3COCH_3 . *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **143**(1), 21–27.
- K. Okada, Y. Yamana, T. Ibuki, A. Fujii, S. Nagaoka, K. Tabayashi, Y. Shimada, Y. Morishita, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, and K. Ohno (2005) Vibrational effect on the fragmentation dynamics of the C K-shell excited CF_2CH_2 . *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **144-147**, 187–189.
- M. Kitajima, A. De Fanis, K. Okada, H. Yoshida, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ueda (2005) High-resolution resonant Auger spectroscopy of CF_4 , SiF_4 , and SF_6 . *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **144-147**, 199–202.
- Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, and K. Honma (2005) Inner-shell excitation of ethanol cluster at O K-edge. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **144-147**, 235–238.
- T. Ibuki, Y. Shimada, R. Hashimoto, S. Nagaoka, M. Hino, K. Okada, I. H. Suzuki, Y. Morishita, and Y.

- Tamenori (2005) Photofragmentation of C, F and S K-shell excited CF_3SF_5 studied by PEPICO and PIPICO spectroscopy. *Chem. Phys.*, **314**(1-3), 119–126.
- S. Nagaoka, Y. Tamenori, M. Hino, T. Kakiuchi, J. Ohshita, K. Okada, T. Ibuki, and I. H. Suzuki (2005) Site-specific fragmentation caused by Si 1s core-level photoionization of $\text{F}_3\text{SiCH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ vapor. *Chem. Phys. Lett.*, **412**(4-6), 459–463.
- K. Okada, M. Nakamura, and K. Saito (2005) A kinetic study on the decay of formic acid produced by the thermal decomposition of ethyl formate. *Proc. 25th Int. Symp. Shock Waves*, Society for Shock Wave Research (India) 659–664.
- T. Tanaka, H. Shindo, C. Makochekanwa, M. Kitajima, H. Tanaka, A. De Fanis, Y. Tamenori, K. Okada, R. Feifel, S. Sorensen, E. Kukk, and K. Ueda (2005) Interference effects in Auger resonant Raman spectra of CO via selective vibrational excitations across the O 1s $\rightarrow 2\pi$ resonance. *Phys. Rev. A*, **72**(2), 022507 (7 pages).
- Y. Morishita, Y. Tamenori, K. Okada, T. Oyama, K. Yamamoto, K. Tabayashi, T. Ibuki, and I. H. Suzuki (2005) Shake-off of loosely bound electrons in Auger decays of Kr 2p core hole states. *Phys. Rev. A*, **72**(4), 044702 (4 pages); **72**(6), 069912(E) (1 page).
- S. Nagaoka, A. Tamura, A. Fujii, J. Ohshita, K. Okada, T. Ibuki, I. H. Suzuki, H. Ohashi, and Y. Tamenori (2005) Site-specific fragmentation caused by core-level photoexcitation: Comparison between Si 1s and 2p photoexcitations in $\text{F}_3\text{SiCH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ vapor. *Int. J. Mass Spectrom.*, **247**(1-3), 101–105.
- A. Padermshoke, Y. Katsumoto, H. Sato, S. Ekgasit, I. Noda, and Y. Ozaki (2005) Melting behavior of poly(3-hydroxybutyrate) investigated by two-dimensional infrared correlation spectroscopy. *Spectrochim. Acta A*, **61**(4), 541–550.
- Y. Katsumoto, T. Tanaka, and Y. Ozaki (2005) Molecular interpretation for the solvation of poly(acrylamide)s I. Solvent-dependent changes in the C=O stretching band region of poly(*N,N*-dialkylacrylamide)s. *J. Phys. Chem. B*, **109**(44), 20690–20696.

○国際会議

- K. Okada, M. Nakamura, and K. Saito: A kinetic study on the decay of formic acid produced by the thermal decomposition of ethyl formate. The 25th International Symposium on Shock Waves (July, 2005, Bangalore, India) (一般講演)
- I. H. Suzuki, Y. Tamenori, Y. Morishita, K. Okada, T. Oyama, K. Yamamoto, K. Tabayashi, T. Ibuki, and K. Moribayashi: Multi-charged Kr ions formed through photoionization of 2p electrons using a coincidence technique. The 20th International Conference on X-ray and Inner-Shell Processes (July, 2005, Melbourne, Australia) (ポスター)
- M. Kato, Y. Morishita, F. Koike, M. Oura, H. Yamaoka, Y. Tamenori, K. Okada, T. Matsudo, T. Gejo, I. H. Suzuki, and N. Saito: Absolute photoionization cross-sections with ultra-high energy resolution for Ne, Ar, Kr, Xe and N_2 in the soft X-ray region. The 20th International Conference on X-ray and Inner-Shell Processes (July, 2005, Melbourne, Australia) (ポスター)
- T. Tanaka, H. Shindo, C. Makochekanwa, M. Kitajima, A. De Fanis, Y. Tamenori, K. Okada, R. Feifel, S. Sorensen, E. Kukk, K. Ueda, and H. Tanaka: Interference effects in resonant photoemission spectroscopy of CO via O 1s $\rightarrow \pi^*$ excited states. The 24th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (July, 2005, Rosario, Argentina) (ポスター)
- Y. Tamenori, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Yamamoto, F. Tahara, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma: Probing of a local electronic structure in small hydrogen bonding clusters using soft X-ray photoabsorption spectroscopy. The 3rd Conference on the Elementary Processes in Atomic Systems

(Aug.–Sept., 2005, Miskolc, Hungary) (ポスター)

Y. Katsumoto, M. Koyama, T. Tanaka, and K. Ohno: Conformational change of poly(*N*-isopropylacrylamide) during the coil–globule transition investigated by infrared spectroscopy and density functional theory calculation. Pacifichem 2005 (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

A. Padermshoke, Y. Katsumoto, and M. Aida: Experimental and theoretical investigations on the vibrational spectra of 2-deoxyguanosine. Pacifichem 2005 (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

Y. Katsumoto, H. Komatsu, and K. Ohno: Solvation-induced changes in the isolated C–D stretching vibration band of 2-butoxyethanol in an aqueous solution studied by infrared spectroscopy. Pacifichem 2005 (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

K. Shin-ya, Y. Katsumoto, and K. Ohno: Conformational analysis of 2-amino-1-phenylethanol by matrix-isolation infrared spectroscopy and density functional theory. Pacifichem 2005 (Dec., 2005, Honolulu, USA) (ポスター)

○国内学会

勝本之晶, 田中丈幸, 尾崎幸洋, 大野啓一: 赤外分光法によるアクリルアミド系高分子側鎖の溶媒和状態の観測。分子構造総合討論会 2005 (2005 年 9 月, 東京) (一般講演)

勝本之晶, 小松裕之, 大野啓一: 2-Butoxyethanol の水和と CH 伸縮バンドの高波数シフト。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 千葉) (一般講演)

下赤卓史, 勝本之晶, 赤井伸行, 大野啓一: アルコールの水素結合様式と OH 伸縮振動バンド波形の相関。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 千葉) (一般講演)

長谷川傑, 勝本之晶, 赤井伸行, 大野啓一, 相田美砂子: 溶液中における 2-Pyridone の会合および互変異性。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 千葉) (一般講演)

藤原好恒, 勝本之晶, 小山美沙緒, 大野啓一, 谷本能文: 磁気浮上環境における poly(*N*-isopropylacrylamide) の合成。日本化学会第 86 春季年会 (2006 年 3 月, 千葉) (一般講演)

小松裕之, 勝本之晶, 大野啓一: 溶媒和に伴う 2-Butoxyethanol の C–D 伸縮バンドシフトの置換位置依存性。第 2 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005 年 11 月, 広島) (一般講演)

長谷川傑, 岡田和正, 田林清彦, 為則雄祐, 日野めぐみ, 森下雄一郎, 鈴木 功, 伊吹紀男, 大野啓一: 内殻励起メチルチオシアネート分子の解離ダイナミクス。第 21 回化学反応討論会 (2005 年 6 月, 大阪) (ポスター)

加藤昌弘, 森下雄一郎, 小池文博, 大浦正樹, 山岡人志, 為則雄祐, 岡田和正, 松戸誉央, 下條竜夫, 鈴木 功, 齋藤則生: Ne 原子 1s Rydberg 状態と内殻励起 2 電子励起状態領域の光吸収断面積の高エネルギー分解能測定。原子衝突研究協会第 30 回研究会 (2005 年 8 月, 和光) (ポスター)

岡田和正, 伊吹紀男, 松戸誉央, 山名洋輔, 藤井亜紀子, 長岡伸一, 鈴木 功, 田林清彦, 為則雄祐, 大野啓一: 内殻領域における 1,1-ジフルオロエチレンの光吸収スペクトルと解離イオンの角度分布。分子構造総合討論会 2005 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)

森下雄一郎, 加藤昌弘, 鈴木 功, 齋藤則生, 為則雄祐, 大浦正樹, 山岡人志, 岡田和正, 松戸誉央, 下條竜夫: 極低温カロリメーターによる軟 X 線領域の絶対強度標準の開発。第 19 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2006 年 1 月, 名古屋) (ポスター)

加藤昌弘, 森下雄一郎, 小池文博, Stephan Fritzsche, 大浦正樹, 山岡人志, 為則雄祐, 岡田和正, 松戸誉央, 下條竜夫, 鈴木 功, 齋藤則生: Ne 原子の内殻電子励起領域における光吸収断面積の高エネルギー分解能測定。第 19 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2006 年 1 月, 名古屋) (ポスター)

伊吹紀男, 伊藤伸一, 為則雄祐, 岡田和正, 長岡伸一, 森下雄一郎, 鈴木 功: F1s 励起 CF₃SF₅

の解離におけるドップラーシフト。第 19 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2006 年 1 月, 名古屋) (ポスター)

勝本之晶, 大野啓一, 田中丈幸, 尾崎幸洋: 赤外・ラマン分光法を用いた poly(*N*-isopropylacrylamide) のコイル・グロビュール転移の研究[X] 混合溶媒中における poly(*N,N*-diethylacrylamide) の C=O 伸縮バンドのシフト。第 54 回高分子学年次大会 (2005 年 5 月, 横浜) (ポスター)

小山美沙緒, 勝本之晶, 田中丈幸, 大野啓一: 赤外・ラマン分光法を用いた poly(*N*-isopropylacrylamide) のコイル・グロビュール転移の研究[XI] 立体制御された PNiPA の赤外スペクトル。第 54 回高分子学年次大会 (2005 年 5 月, 横浜) (ポスター)

勝本之晶, 田中丈幸, 尾崎幸洋: 赤外・ラマン分光法を用いた poly(*N*-isopropylacrylamide) のコイル・グロビュール転移の研究[XII] 混合溶媒中における PNiPA のアミド I バンドのシフト。第 54 回高分子討論会 (2005 年 9 月, 山形) (ポスター)

小山美沙緒, 勝本之晶, 田中丈幸, 大野啓一: 赤外・ラマン分光法を用いた poly(*N*-isopropylacrylamide) のコイル・グロビュール転移の研究[XI] 立体制御された PNiPA の赤外スペクトルの温度変化。第 54 回高分子討論会 (2005 年 9 月, 山形) (ポスター)

田中丈幸, 勝本之晶, 大野隆, 大野啓一, 尾崎幸洋: *N,N*-dimethylacetamide の溶媒和モデルの密度反関数計算。分子構造総合討論会 2005 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)

Adchara Padermsheke, 勝本之晶, 相田美砂子: Solvent effects on the tautomerization of isocytosine investigated by infrared spectroscopy and quantum chemical calculations. 分子構造総合討論会 2005 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)

勝本之晶, 沖村真理, 赤井伸行, 大野啓一: 凝集相における協同的水素結合を考慮した OH 伸縮振動バンドの分類[I]。第 28 回溶液化学シンポジウム (2005 年 11 月, 京都) (ポスター)

下赤卓史, 勝本之晶, 大野啓一: 凝集相における協同的水素結合を考慮した OH 伸縮振動バンドの分類[II]。第 28 回溶液化学シンポジウム (2005 年 11 月, 京都) (ポスター)

小松裕之, 勝本之晶, 大野啓一: 孤立 C-D 伸縮バンドの波数シフトから見た 2-Butoxyethanol の水和挙動。第 28 回溶液化学シンポジウム (2005 年 11 月, 京都) (ポスター)

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内)

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)

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金若手研究(A), 「解離片のエネルギー状態に着目した内殻励起分子の解離機構に関する研究」代表 岡田和正

小笠原科学技術振興財団研究助成, 「溶媒和構造を考慮した量子化学的分子デザインによる新奇な生体親和性高分子材料の開発」代表 勝本之晶

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。

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

Direct ab initio MD 法によって得られるトラジェクトリーから、量子力学的な基本音に相当する振動数を正確に出す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水クラスターの自由エネルギー

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自由エネルギーを得ることができた。

④アルカリ金属イオンの溶媒和構造

171 個の溶媒水分子を含めた系に対してモンテカルロ法により溶媒水分子の分布を求めた。さらに、イオンおよび 130 個程度までの溶媒水分子に対する非経験的分子軌道法計算により、溶媒水分子に対するイオンの影響は、イオンの最外殻軌道と水分子の軌道との軌道間相互作用に起因していることを明らかにした。イオンの種類による水和の違いには、イオン半径ではなく、イオンの最外殻軌道が到達する範囲の違いが重要である。

⑤表面和周波振動分光法の測定手法開発と応用

赤外光を使う和周波分光法は二次の非線形光学効果を利用した界面振動分光法である。電子共鳴を利用した電子振動二重共鳴効果を利用すれば、和周波分光の感度が向上し、界面の電子励起状態に関する情報も得ることが可能となる。この二重共鳴効果の適用範囲を広げるために、赤外プローブと組み合わせて和周波を発生させるもう一方の可視/紫外プローブの波長を、広い範囲で連続的に選択できるように和周波分光装置の開発を進めている。本年度の作業によって、可視/紫外プローブ光の波長を 235~400 nm および 470~800 nm の広い波長領域で選択できるようになった。

○発表原著論文

M. Aida and M. Dupuis (2005) Fundamental absorption frequency from quasi-classical direct ab initio molecular dynamics: diatomic molecule. *Chemical Physics Letters*, **401**(1–3), 170–174.

N. Akai, H. Yoshida, K. Ohno and M. Aida (2005) Photochemistry of *p*-toluidine in a low-temperature

- argon matrix: infrared spectrum and geometrical structure of 4-methylanilino radical. *Chemical Physics Letters*, **403**(4–6), 390–395.
- N. Akai, K. Ohno and M. Aida (2005) Photoinduced amino-imino tautomerism of 2-aminopyridine in a low-temperature argon matrix. *Chemical Physics Letters*, **413**(4–6), 306–310.
- N. Akai, Y. Katsumoto, K. Ohno and M. Aida (2005) Vibrational anharmonicity of acetic acid studied by matrix-isolation NIR spectroscopy and DFT calculation. *Chemical Physics Letters*, **413**(4–6), 367–372.
- S. Fujiyoshi, T. Ishibashi, H. Onishi (2005) Low-Frequency Vibrations of Molecular Submonolayers Detected by Time-Domain Raman Spectroscopy. *Journal of Molecular Structure*, **735-736C**, 169–177.
- T. Nomoto, T. Ishibashi, H. Okamoto, H. Hamaguchi (2005) Structure of the S1 state of diphenylacetylene as studied by time-resolved CARS and infrared spectroscopy. *Journal of Molecular Structure*, **735-736C**, 197–202.
- S. Fujiyoshi, T. Ishibashi, H. Onishi (2005) Fourth-Order Raman Spectroscopy of Wide-Bandgap Materials. *Journal of Physical Chemistry B*, **109**, 8557–8561.

○総説・著書

- 相田 美砂子 (2005) バイオとナノテクの融合. *情報処理*, 情報処理学会, **46**, 266–270.
- A. Yamakata, T. Ishibashi, K. Takeshita, H. Onishi (2005) Time-resolved infrared absorption study of photocatalysts and related materials. *Topics in Catalysis*, **35**, 211–216.
- 石橋 孝章 (2005) 8. 3. 3 非線形ラマン分光. 実験化学講座 9, 物質の構造 I, 分光 上, 547–559.
- 石橋 孝章 (2005) 7. 3. 4 赤外可視和周波発生分光. 実験化学講座 9, 物質の構造 I, 分光 上, 464–480.

○国際会議

- M. Aida: Quasi-Classical Direct Ab Initio Molecular Dynamics on Anharmonic Frequencies, KISPOC-XI, Fukuoka (Japan), September 2005 (招待講演)
- T. Maeda, T. Suemasu, and T. Ishibashi: Construction of a spectrometer for IR-UV sum-frequency generation spectroscopy, JST Joint International Symposium on Creation of Nanoscale Designed Surfaces and their Electronic and Catalytic Properties (JST-JIS-NDS), Tokyo (Japan), September 2006 (ポスター).
- M. Tanaka and M. Aida: *Ab initio* MO study on the hydration of alkali metal ion, PACIFICHEM2005, Honolulu (USA), December 2005 (ポスター)
- M. Tanaka and M. Aida: Theoretical study on the inversion of trimethylamine by means of *ab initio* MO and direct *ab initio* MD, PACIFICHEM2005, Honolulu (USA), December 2005 (ポスター)
- T. Miyake and M. Aida: Theoretical study on the chemical potential of the water cluster, PACIFICHEM2005, Sheraton Waikiki (Honolulu), Honolulu (USA), December 2005 (ポスター)
- T. Yoshida, M. Aida, A. Sarai: Interaction Free Energy Landscapes between Amino Acid Side Chain and Base Pair, The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM2005) Honolulu (USA), December 2005 (ポスター)
- T. Yoshida, M. Aida, A. Sarai: Intrinsic Rotational Energy Profile Around the Glycosidic Bond of 7,8-Dihydro-8-oxoguanine in DNA, The 2005 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM2005) Honolulu (USA), December 2005 (ポスター)
- T. Yoshida, M. Aida, A. Sarai: Is there a code for protein-DNA interaction? YES, there exists the *analog* code for protein-DNA interaction, 25th ANNIVERSARY INTERNATIONAL CBI CONFERENCE (CBI2005) RIKEN Yokohama Institute (横浜) 2005 年 8 月 24–26 日 (ポスター)

M. Ohisa, M. Aida, H. Yamataka: Two Dimensional Free Energy Surface Using QM/MM-MC Method on Alkyl Halide/Halide Exchange Reaction, KISPOC-XI, Audiovisual Hall at Station for Collaborative Research, Kyushu University (Fukuoka), September 2005 (ポスター)

○国内学会

相田 美砂子, 量子化学から生命科学へのとりくみ, 第45回分子科学若手の会 夏の学校 (2005年8月, 滋賀) (全体講演)

石橋 孝章, マルチプレックス SFG 分光法とその有機薄膜への応用, 日本分光学会赤外ラマン部会 シンポジウム「振動分光の可能性を探る」(2005年12月, 大阪) (招待講演).

石橋 孝章, 「非線形界面振動分光法の新しい試み」理研セミナー (2005年6月, 和光) (招待講演).

飯田 裕美, 相田 美砂子: チミンダイマー(6-4)生成物の光回復酵素による修復過程についての理論化学的研究. 第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005年11月, 東広島) (一般講演)

宮本 秀範, 相田 美砂子: グリシンの水和についての理論化学的研究. 第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005年11月, 東広島) (一般講演)

前田 俊樹, 末益 匠, 石橋 孝章: IR-UV SFG 分光装置の開発. 第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005年11月, 東広島) (一般講演)

山田 朋範, 相田 美砂子: Quasi-Classical Direct Ab Initio MD 法による分子内振動の非調和性の研究. 第9回理論化学討論会 (2005年5月, 京都) (一般講演)

山田 朋範, 相田 美砂子: Quasi-classical direct ab initio MD 法による水の IR および Raman スペクトル. 第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, (2005年11月, 東広島) (一般講演)

大久 真幸, 相田 美砂子, 山高 博: 水溶液中におけるハロゲン交換反応の自由エネルギーマップ: F と Cl による違い. 第二回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, (2005年11月, 東広島) (一般講演)

大久 真幸, 相田 美砂子, 山高 博: 水溶液中における反応の自由エネルギー変化. 低温科学研究所共同利用研究集会「氷, 水およびクラスレート水和物の物性に関する研究集会」(2005年12月, 札幌) (一般講演)

杰力 買合木提江, 三宅 敏子, 相田 美砂子: プロトン化水クラスター($\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_n$) の数え上げ. 2005年日本化学会西日本大会 (2005年10月, 宇部) (一般講演)

杰力 買合木提江, 三宅 敏子, 相田 美砂子: プロトン化水クラスター($\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$) のトポロジ的に可能な水素結合パターンの数え上げ. 第二回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, (2005年11月, 東広島) (一般講演)

三宅 敏子, 相田 美砂子: 水クラスターの化学ポテンシャルに関する理論化学的研究. 第9回理論化学討論会 (2005年5月, 京都) (一般講演)

山田 朋範, 相田 美砂子: 水の IR と Raman スペクトルの理論計算: direct ab initio MD 法による基本音の計算. 平成17年度低温研共同研究「氷, 水およびクラスレート水和物の物性に関する研究集会」(2005年12月, 札幌) (一般講演)

前田 俊樹, 末益 匠, 石橋 孝章: 赤外紫外和周波発生分光装置の試作. 分子構造総合討論会 2005 (2005年9月, 東京) (ポスター)

山田 朋範, 相田 美砂子: Quasi-Classical Direct Ab Initio MD 法による分子内振動の解析. 分子構造総合討論会 2005 (2005年9月, 東京) (ポスター)

坂宗 和明, 相田 美砂子: エチレングリコールの構造異性化の経路についての Direct ab initio MD 法による研究. 分子構造総合討論会 2005 (2005年9月, 東京) (ポスター)

- 大久 真幸, 相田 美砂子, 山高 博: 水溶液中におけるハロゲン化アルキルのハロゲン交換反応の自由エネルギーマップ。第 55 回有機反応化学討論会 (2005 年 9 月, 新潟) (ポスター)
- 大久 真幸, 相田 美砂子, 山高 博: QM/MM-MC 法を用いた水溶液中における交換反応の自由エネルギーマップ作成。分子構造総合討論会 2005 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)
- 大久 真幸, 相田 美砂子, 山高 博: ハロゲン置換反応の水溶液中におけるメカニズムについての QM/MM-MC 法による研究。第 28 回溶液化学シンポジウム (2005 年 11 月, 京都) (ポスター)
- 田中 雅人, 相田 美砂子: QM/MM 法を用いた $M^+ \cdots Cl^-$ ($M=Li, Na, K$) の水和構造に関する理論化学的研究。分子構造総合討論会 2005 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)
- 田中 雅人, 相田 美砂子: $(LiCl)_n$ ($n=1,2,4$) の水和についての QM/MM-MC 法による研究。第 28 回溶液化学シンポジウム (2005 年 11 月, 京都) (ポスター)
- 三宅 敏子, 相田 美砂子: 水クラスターの水素結合パターンの分布と構造変化。2005 分子構造総合討論会 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)
- 吉田 智喜, 相田 美砂子: タンパク質-DNA 相互作用: アナログ認識コードの作成。2005 分子構造総合討論会 (2005 年 9 月, 東京) (ポスター)

○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)

○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 「色素分子膜分析のための電子振動二重共鳴和周波分光の研究」 (代表: 石橋 孝章)

1－4－3 各種研究員と外国人留学生の受け入れ状況

・各種研究員

日本学術振興会外国人短期研究員

氏名	Prof. Elliot R. Bernstein (Colorado State University)
受入期間	2006 年 3 月
研究課題	超音速ジェット赤外・紫外二重共鳴法による生体関連分子の異性化ダイナミクス解明
受入教員	江幡孝之

日本学術振興会外国人特別研究員

氏名	趙 東霞(ZHAO Dong-Xia) 遼寧師範大学・助教授 (Liaoning Normal University, Associate Professor)
受入期間	平成 17 年 7 月 26 日 から 平成 19 年 7 月 25 日まで
研究課題	水溶液中における生体分子の酸化・還元反応およびダイナミクスに関する理論的研究
受入教員	相田 美砂子

・外国人留学生の受け入れ状況

平成 17 年度は、博士課程後期に 5 名の外国人留学生を受け入れた。

1-4-4 研究助成金の受け入れ状況

化学専攻のスタッフが平成17年度（2005年度）に受けた研究費等の総数を示す。

項目	分類	数
文部科学省科学技術振興調整費	新興分野人材養成	1
日本学術振興会先端研究拠点事業	拠点形成促進型	1
文部科学省ナノ支援事業	高分解能磁気測定	1
文部科学省科学研究費補助金	特定領域研究	6
	基盤研究(A)	1
	基盤研究(B)	6
	基盤研究(C)	5
	萌芽研究	1
	若手研究(A)	1
	若手研究(B)	1
	外国人特別研究員奨励費	1
	学術創成研究費	0
その他の研究費（公募）		6
委任経理金		9

1-4-5 学会ならびに社会での活動

・座長を行った学会・討論会の名称

- 江幡孝之, 第21回化学反応討論会 (2005年6月)
- 福原幸一, 第41回熱測定討論会 (2005年10月)
- 山田康治, 分子構造総合討論会 (2005年9月, 東京)
- 三吉克彦, 分子研研究会 生体における金属イオンの役割とその利用 (2006年3月, 岡崎)
- 水田 勉, 分子研研究会 生体における金属イオンの役割とその利用 (2006年3月, 岡崎)
- 水田 勉, 第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005年11月, 東広島)
- 水田 勉, 日本化学会西日本大会 (2005年10月, 宇部)
- 藤原照文, 日本分析化学会第54年会 (2005年9月, 名古屋)
- 塚原 聡, 日本分析化学会第54年会 (2005年9月, 名古屋)
- 深澤義正, 日本化学会第86春季年会 (2006年3月, 千葉)
- 灰野岳晴, 日本化学会第86春季年会 (2006年3月, 千葉)
- 岩本 啓, 第49回香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会 (2005年11月, 福井)
- 山崎勝義, 第21回化学反応討論会 (2005年6月, 大阪)
- 山崎勝義, 第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005年11月, 東広島)
- 山本陽介, 第35回構造有機化学討論会 (2005年9月, 大阪)
- 山本陽介, 第55回有機反応化学討論会 (2005年9月, 新潟)
- 山本陽介, 2005年日本化学会西日本大会ミニシンポジウム「選択的有機反応の開発」(2005年10月, 宇部)
- 山本陽介, JSPS Core-to-Core Program "Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application" First Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry, Hiroshima (2005年10月, 広島)
- 山本陽介, The 13th Korea-Japan Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry, (2005年11月, Jeju, Korea)
- 山本陽介, The 2nd Tsukuba International Symposium on Organic Main Group Element Chemistry (2005年12月, 筑波)
- 山本陽介, 第32回ヘテロ原子化学討論会 (2005年12月, 筑波)
- 山本陽介, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2005) Inorganic Chemistry, Symposium 149. Metal Complexes of Mixed-Donor Multidentate Ligands: Chemistry and Applications (2005年12月, Honolulu, USA)
- 河内 敦, 第86回日本化学会春季年会 (2006年3月, 千葉)
- 小島聡志, 2005年日本化学会西日本大会 (2005年10月, 宇部)
- 岡田和正, 第2回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2005年11月, 東広島)
- 勝本之晶, 日本化学会第86春季年会 (2006年3月, 千葉)
- 相田美砂子, 2005年日本化学会西日本大会 (2005年10月, 宇部)

・論文誌編集委員

- 井上克也, 日本化学会欧文誌(Bull. Chem. Soc. Jpn)編集委員(2006.3-)
 藤原照文, 日本分析化学会, 「分析化学」誌編集委員 (2003-2004)
 深澤義正, 日本化学会欧文誌 (Bull. Chem. Soc. Jpn) 編集委員 (2001-2004)
 山本陽介, Bulletin of the Chemical Society of Japan, 編集委員 (2002-2006)
 山本陽介, Journal of Physical Organic Chemistry, Editorial Board (2005-)
 岡田和正, 日本分光学会「分光研究」編集委員(2003-2006 年度)
 相田美砂子, 日本生物物理学会「生物物理」編集委員 (2003-2004)

・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-)
 福原幸一, 日本熱測定学会委員(2005-)
 三吉克彦, 錯体化学討論会運営委員, 実行委員長
 水田 勉, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2005)
 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 (1989-2005)
 藤原照文, 日本鉄鋼協会, 評議員 (2005-)
 藤原照文, 日本化学会, 中国四国支部西日本大会幹事 (2003)
 塚原 聡, 日本分析化学会近畿支部幹事 (1999, 2002-2003)
 塚原 聡, 日本分析化学会近畿支部常任幹事 (2000-2001)
 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-)
 塚原 聡, 日本分析化学会中国四国支部庶務幹事 (2005-)
 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-)
 山崎勝義, 日本分光学会代議員 (2004 度)
 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)
 山本陽介, IUPAC Commission II-2, National Representative (2002-)
 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, 日本化学会理事 (2005-)
 大方勝男, 有機合成化学協会中国四国支部幹事 (1999-)
 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事務局局員 (2003-)
 大野啓一, 日本化学会中国四国支部幹事 (2000)
 大野啓一, 日本化学会代議員 (2001.11.1-2003.10.31)
 大野啓一, 分子構造総合討論会運営委員 (2002-2006)

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, 日本分光学会企画委員会委員 (1999–現在)

・ 学会・討論会の組織委員

井上克也, 科学研究費企画調査研究会『結晶と磁性のChirality:磁気構造と物性』2005年9月19-20, 京都, ザ・パレスサイドホテル, 提案代表者
 井上克也, 科学研究費企画調査研究会「カイラル磁性研究の現状と展望」2005年8月1-2日, 九州工業大学図書館AVホール, 代表者
 井上克也, 磁性国際会議(ICM)分子磁性分野評価委員
 井上克也, 分子研研究会『結晶と磁性のChirality:磁気構造と物性』2006年2月18-19, 自然科学研究機構・分子科学研究所・岡崎コンファレンスセンター, 提案代表者
 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, 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)
 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)
 深澤義正, 第 19 回シクロファン研究会, 2005 (組織委員)
 灰野岳晴, 第17回生体機能関連化学若手の会サマースクール, 2005 (実行委員長)
 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)
 山崎勝義, 第 18 回化学反応討論会実行委員会委員 (2002)
 田林清彦, 2004 分子構造総合討論会準備委員会委員 (2002-2004)
 山本陽介, JSPS Core-to-Core Program "Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application" First Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry, Hiroshima, 組織委員
 河内 敦, JSPS Core-to-Core Program "Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application" First Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry, Hiroshima, 組織委員
 山本陽介, 22nd International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS-22), 組織委員
 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 (2004)

岡田和正, 第20回日本放射光学会年会実行委員 (2005-)

・その他の委員

水田 勉, おもしろワクワク化学の世界 ‘05 広島化学展 実行委員 (2005 年 8 月)
 藤原照文, 日本分析化学会中国四国支部第 37 回分析化学講習会実行委員 (2000)
 藤原照文, 日本分析化学会中国四国支部第 42 回分析化学講習会実行委員 (2005)
 塚原 聡, 日本分析化学会中国四国支部第 42 回分析化学講習会実行委員 (2005)
 岡本泰明, 日本分析化学会中国四国支部第 42 回分析化学講習会実行委員 (2005)
 大方勝男, おもしろワクワク化学の世界 ‘05 広島化学展 実行委員長 (2005 年 8 月)
 小島聡志, おもしろワクワク化学の世界 ‘05 広島化学展 実行委員 (2005 年 8 月)
 平賀良知, おもしろワクワク化学の世界 ‘05 広島化学展 実行委員 (2005 年 8 月)
 大野啓一, 広島県立海田高等学校学校評議員 (2001-2004)
 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)
 相田美砂子, 産業技術総合研究所 計算科学研究部門評価委員 (2005-2006)

・他研究機関での講義・客員

藤原照文, 広島大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2005 年 4 月 1 日～2005 年 9 月 30 日
 岡本泰明, 広島工業大学, 非常勤講師, 2005 年 10 月 1 日～2006 年 3 月 31 日
 山崎勝義, 放送大学面接授業(集中型), 講師, 2001 年 2 月, 放送大学新潟学習センター
 平賀良知, 広島工業大学工学部, 非常勤講師, 2005 年 9 月 20 日-2005 年 2 月 28 日
 平賀良知, 広島県産業科学技術研究所, 研究協力員 (1998.4-)
 相田美砂子, 東京大学工学系研究科, 非常勤講師, 2005 年 10 月 1 日-2006 年 3 月 31 日

・高大連携事業

三吉克彦, 広島県立広島中・高等学校 出張講義 (模擬授業) (2005 年 6 月)
 水田 勉, 鳥取県立鳥取東高等学校 (SSH 自然化学実験) (2005 年 9 月, 広島大学)
 水田 勉, 鳥取県立鳥取東高等学校 (SSH 自然化学特別講義) (2005 年 11 月, 鳥取)
 水田 勉, SANbe スーパーサイエンスセミナー (2005 年 12 月, 国立三瓶青年の家)
 久保和幸, 鳥取県立鳥取東高等学校 (SSH 自然化学実験) (2005 年 9 月, 広島大学)
 藤原照文, 広島県立廿日市高等学校 (模擬授業) (2005 年 10 月)
 山崎勝義, 広島県立広島皆実高等学校 (大学模擬講義) (2005 年 10 月)
 大方勝男, 広島県立賀茂高等学校 出張授業 (2005 年 7 月)
 大方勝男, 広島県立井口高等学校 出張授業 (2005 年 12 月)
 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・プログラム事業「研究者招へい講座」(2004 年 11 月)
 相田美砂子, 広島大学附属高校 スーパーサイエンス・ハイスクール特別講義 (2005 年 11 月)
 山本陽介, 広島大学附属高等学校 SSH 事業 (2005 年 8 月)
 山本陽介, 広島県立呉宮原高等学校 出張講義 (2005 年 11 月)

1-5 その他特記事項

1-5-1 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）、井上 克也、江幡 孝之、石橋 孝章、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

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（アステラス製薬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, Associate Director）

博士研究員

高須 雄一、Shaheda A. Wahab、赤井 伸行、永原 哲彦、山本 竜也、

Adchara Padermshoke

○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 17 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/>)

《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 30 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 2005 年 4 月 15 日 (金)

題目: ガイダンス及び第 43 回中国四国産学連携化学フォーラムへの参加

講師: 相田 美砂子 (広島大学大学院理学研究科)

第 2 回 (若手研究者シリーズ(1)) 2005 年 4 月 22 日 (金)

題目: 低振動数ラマン散乱, 量子化学計算, クラスレートハイドレート

講師: 高須 雄一 (広島大学 量子生命科学プロジェクト研究センター 博士研究員)

第 3 回 (院生シリーズ(1)) 2005 年 5 月 6 日 (金)

題目: 水クラスターの水素結合パターン, 有向グラフ, 組み合わせ数え上げ

講師: 三宅 敏子 (広島大学大学院理学研究科 博士課程後期 3 年)

第 4 回 2005 年 5 月 13 日 (金)

題目: 生命科学における情報計算からの新しい挑戦の機会

講師: 神沼 二真 (広島大学大学院特任)

第 5 回 2005 年 5 月 20 日 (金)

題目: 振動分光法による液晶ディスプレイ用光学補償フィルムの配向解析

講師: 高橋 洋平 (富士写真フイルム(株) 先進コア技術研究所 解析技術センター)

第 6 回 2005 年 5 月 27 日 (金)

題目: 松笠, セコイアの実, パイナップル, サボテン等にひそむ数理

講師: 細矢 治夫 (広島大学客員教授, お茶ノ水女子大学名誉教授)

第 7 回 (院生シリーズ(2)) 2005 年 6 月 3 日 (金)

題目: タンパク質による DNA 認識への計算化学からのアプローチ

講師: 吉田 智喜 (広島大学大学院理学研究科 博士課程後期 3 年)

第 8 回 2005 年 6 月 10 日 (金)

題目: 化学反応における選択性と統計性

一なぜ、如何にして反応は生起するのか?

- 講師：小松崎 民樹（神戸大学助教授）
- 第 9 回 2005 年 6 月 17 日（金）
 題目：固体高分解能NMRによる膜蛋白質の動的構造の解析
 講師：齊藤 肇（広島大学客員教授，姫路工業大学名誉教授）
- 第 10 回 2005 年 6 月 24 日（金）
 題目：工学と生物学のインフォマティクス ―配列情報解析―
 講師：石野 洋子（広島大学大学院理学研究科特任助教授）
- 第 11 回（院生シリーズ(3)）2005 年 7 月 1 日（金）
 題目：タンパク質の基質認識に関する構造生物学的研究
 講師：紙谷 康則（広島大学大学院理学研究科 博士課程後期）
- 第 12 回 2005 年 7 月 8 日（金）
 題目：水素結合： Proper or Improper
 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 13 回（若手研究者シリーズ(2)）2005 年 7 月 15 日（金）
 題目：マトリックス単離赤外分光法を用いた分子反応・構造の研究
 講師：赤井 伸行（広島大学量子生命科学プロジェクト研究センター 博士研究員）
- 第 14 回 2005 年 7 月 22 日（金）
 独立行政法人 酒類総合研究所見学
- 第 15 回 2005 年 7 月 29 日（金）
 題目：大学の教育と研究の良し悪しを誰が，どのように，判断するのか？
 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 2005 年 10 月 7 日（金）
 題目：NaBiT プログラムについての説明とガイダンス
 講師：相田 美砂子（広島大学大学院理学研究科化学専攻教授）
- 第 17 回 2005 年 10 月 14 日（金）
 題目：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
 講師：田中 伸和（広島大学自然科学研究支援開発センター（遺伝子実験施設），大学院
 先端物質科学研究科・分子生命機能科学専攻 助教授）
- 第 18 回（企業人材シリーズ(12)）2005 年 10 月 21 日（金）
 題目：三菱レイヨン(株)の研究開発と求める人材について
 講師：榎野 隆之（三菱レイヨン株式会社 技術開発統括部 担当部長）
- 第 19 回（企業人材シリーズ(13)）2005 年 10 月 28 日（金）
 題目：発見の経緯と林原生物化学研究所における研究開発
 講師：穂田 研志（林原生物化学研究所 藤崎研究所 研究員）
- 第 20 回（企業人材シリーズ (14)）2005 年 11 月 4 日（金）
 題目：地球環境保全と電力技術開発
 講師：竹原 淳（中国電力株式会社 エネルギー総合研究所 マネージャー）
- 第 21 回 2005 年 11 月 11 日（金）
 題目：カーボンナノチューブの作成と応用
 講師：湯田坂 雅子（NEC 基礎・環境研究所 主任研究員）
- 第 22 回 2005 年 11 月 18 日（金）
 題目：湧永製薬における創薬研究
 ～キノロン系抗菌剤の研究とコンビナトリアルケミストリー～

- 講師：赤松 久（湧永製薬株式会社 創薬研究所）
- 第 23 回 2005 年 11 月 25 日（金）
 題目：NMR による蛋白質の 3 次元構造の解析
 講師：齊藤 肇（広島大学客員教授，姫路工業大学（兵庫県立大学）名誉教授）
- 第 24 回（企業人材シリーズ（16））2005 年 12 月 2 日（金）
 題目：植物病原菌の薬剤排出トランスポーター
 講師：林 敬介（宇部興産㈱ 医薬研究部門）
- 第 25 回（院生シリーズ（4））2005 年 12 月 9 日（金）
 題目：マトリックス単離赤外分光法と理論計算による分子の構造安定性に関する研究
 講師：新屋 慶（広島大学大学院理学研究科化学専攻 博士課程後期）
- 第 26 回 2006 年 1 月 13 日（金）
 題目：広がるデータマイニング技術 ～ビジネスからサイエンスまで
 講師：森本 康彦（広島大学総合科学部 助教授）
- 第 27 回 2006 年 1 月 20 日（金）
 題目：Frequency- and Time-domain Spectroscopy of Biomolecules in the Gas Phase
 （気相の生体分子の周波数および時間分解分光）
 講師：Professor Seong Keun Kim（Associate Dean of Planning, College of Natural Sciences, Seoul National University）
- 第 28 回（企業人材シリーズ（17））2006 年 1 月 27 日（金）
 題目：計算科学は産業界で如何に活用されているか
 講師：中村 振一郎（㈱三菱化学 科学技術研究センター計算科学研究所長）
- 第 29 回 2006 年 2 月 3 日（金）
 題目：生物電気化学法と生命科学 ―その基礎と応用の現状と将来
 講師：谷口 功（熊本大学工学部物質生命化学科 教授）
- 第 30 回（企業人材シリーズ（18））2006 年 2 月 10 日（金）
 題目：創薬研究におけるバイオインフォマティクス
 講師：河合 隆利（エーザイ株式会社シーズ研究所 主幹研究員）

②第 3 回 QuLiS 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 3 回 QuLiS シンポジウム「創薬における IT」

日時：2006 年 3 月 28 日（火）13：00～17：20

場所：広島大学理学部大会議室

プログラム：

1. 13:00～14:00 片倉 晋一（第一製薬株式会社 創薬開拓研究所）
 「創薬研究における情報技術の活用 ―蛋白質の構造情報を中心に―」
2. 14：00～15:00 佐藤 文俊（東京大学情報基盤センター）
 「創薬の新基盤技術を目指したタンパク質量子化学シミュレーション：研究紹介と中期ビジョン」
3. 15:20～16:20 原田 義則（日立製作所 ライフサイエンス推進事業部）
 「ウェット技術とインフォマティクス技術を融合させた生命科学産業支援ビジネス」
4. 16:20～17:20 友田 修司，金野 大助
 （東京大学大学院総合文化研究科生命環境科学系）

「生命科学教育への IT の利用」

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 1 回 NaBiT セミナー 2005 年 4 月 27 日

講演題目：時間分解分光法で観測した凝縮相中の化学反応

講師：岩田 耕一（東京大学理学部スペクトル化学センター）

第 2 回 NaBiT セミナー 2005 年 6 月 1 日

講演題目：複雑分子系の量子化学：均一触媒系，ナノ構造，生体分子系など

講師：諸熊 奎治（米国エモリー大学 教授，広島大学客員教授）

第 3 回 NaBiT セミナー 2005 年 6 月 29 日

講演題目：NMR of Biological Solids

講師：Prof. Ayyalusamy Ramamoorthy (Department of Chemistry & Biophysics, University of Michigan, Ann Arbor 72 MI, USA)

第 4 回 NaBiT セミナー 2005 年 8 月 12 日

講演題目：分子と高分子の量子化学と分光学

講師：平田 聡（フロリダ大学化学科助教授，広島大学客員助教授）

第 5 回 NaBiT セミナー 2006 年 3 月 9 日

講演題目：Non-covalent Interactions

講師：Prof. Pavel Hobza (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic)

第 6 回 NaBiT セミナー 2006 年 3 月 9 日

講演題目：H-bonding and stacking in DNA base pairs and amino acid pairs

講師：Prof. Pavel Hobza (Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic)

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（約 50 ノードの PC クラスタ）を使用した。

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。

⑥2005 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。

2. 化 学 科

2－1 学科の理念と目標

化学科の理念・目標は、自然科学の基盤である化学における教育研究を深化，推進するとともに，化学の基礎を体系的に身につけ，幅広く深い教養に根ざした総合的判断力を持った社会で活躍できる人材を育成することである。

2-2 学科の組織

【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18年3月1日現在）および平成17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
	北川 宏（非常勤）	九州大学大学院理学院理学研究所
	月向 邦彦	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	渋谷 一彦（非常勤）	東京工業大学大学院理工学研究科
	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
	三吉 克彦	化学専攻分子構造化学講座
	山崎 勝義	化学専攻分子反応化学講座
	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
	齋藤 健一	自然科学研究支援センター
	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	自然科学研究支援センター
	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
助手	秋田 素子	化学専攻分子構造化学講座
	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】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17年度化学科長 谷本 能文

副化学科長 山本 陽介

化学科長補佐 泉 俊輔

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17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	◎片柳 岡本 久保 芦田 藤原（昌） 高木 高橋
自己点検・評価委員	三吉 大野
教務問題検討委員	◎小島 谷本 藤原（照） 山本 岡田 山田 相田
情報処理委員	◎相田 高橋 芦田 岡本 高木
野外研修企画委員	◎月向 谷本 勝本 高木 芦田 福原
当番教室	集積化学研究グループ
廃液処理指導員	藤原（昌） 岡田 石橋
危険薬品庫管理者	久保
就職担当	相田 H16年10月～H17年9月末 藤原（照） H17年10月～H18年9月末

◎は委員長

2-3 学科の学士課程教育

2-3-1 アドミッション・ポリシーとその目標

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。

2-3-2 学士課程教育の理念と達成のための具体策

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。

2－3－3 学士課程教育の成果とその検証

・平成 17 年度化学科在籍学生数

平成 17 年 5 月 1 日現在

入 学 年 度	在 籍 学 生 数
平成 17 年度	66 (18)
平成 16 年度	60 (13)
平成 15 年度	69 (19)
平成 14 年度	58 (24)
平成 13 年度	6 (0)
平成 12 年度	3 (0)
合 計	262 (74)

() 内は女子で内数

・チューター

入 学 年 度	チューター
平成 17 年度	谷本, 泉
平成 16 年度	相田, 水田
平成 15 年度	大野, 河内
平成 14 年度	江幡, 岡田
平成 13 年度	灰野
平成 12 年度	深澤, 小島
平成 11 年度	三吉

・平成17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	井上, 江幡, 大方, 大野, 月向, 平田	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	泉	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	月向, 井上, 灰野	
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	平田	
専門 基礎	1 前	必修	基礎化学 A	江幡	
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	谷本	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	相田	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	岡田, 石橋, 斎藤, 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, 河内, 泉, 灰野	有機化学, 演習
専門	3 前後	必修	化学実験	片柳	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	田林	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	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 17 年度集中講義

北川 宏 (九州大学大学院理学研究院教授)

授業科目名: 無機物性化学 (3・4 年次生対象)

(担当: 化学専攻分子構造化学講座固体物性化学研究グループ)

渋谷 一彦 (東京工業大学大学院理工学研究科教授)

授業科目名: 物理化学特論 (3・4 年次生対象)

(担当: 化学専攻分子反応化学講座集積化学研究グループ)

・担当授業科目一覧

平成17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	物理化学 III, 量子化学,	化学演習		◎
	井上 克也	教養ゼミ, 無機固体化学			◎
	江幡 孝之	教養ゼミ, 基礎化学 A, 分子構造化学			◎
	大方 勝男	教養ゼミ, 基礎化学 B,	有機化学演習		◎
	大野 啓一	教養ゼミ, 集積化学			◎
	北川 宏	無機物性化学			
	渋谷 一彦	物理化学特論			
	月向 邦彦	教養ゼミ, 生体高分子化学			◎
	谷本 能文	先端化学, 化学概説 A, 分子光化学			◎
	平田 敏文	教養ゼミ, 化学概説 B, 生物化学			◎
	深澤 義正	有機化学 III, 構造有機化学			◎
	藤原 照文	機器分析化学			◎
	三吉 克彦	基礎無機化学, 無機化学 III	無機化学演習		◎
	山崎 勝義				◎
	山本 陽介	教養ゼミ, 有機化学 I, 反応有機化学			◎
助教授	石橋 孝章	化学数学	物理化学演習 II 分担	○	◎
	泉 俊輔	生体物質化学	情報活用演習, 有機 化学演習	○	◎
	岡田 和正	物理化学 I	物理化学演習 II 分担	○	◎
	片柳 克夫	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		○	◎
	斎藤 健一		物理化学演習 II 分担		
	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	物理化学演習 II 分担	○	◎
	中島 覚	放射化学			
	灰野 岳晴	有機化学 II	有機化学演習	○	◎
	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		○	◎
助手	秋田 素子			○	○
	芦田 嘉之			○	○
	岩本 啓			○	○
	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 ¹				
	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	

¹ 内地研究員

・平成17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することになっている卒業に必要な単位数を表す。)

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、卒業研究を除いた卒業に必要な単位数を表す。)

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。
6. 「化学解説A」と「化学概説B」は化学科の学生には単位を認めない。

付記 この受講基準は、平成17年度以降の入学生に適用する。

・ 平成 17 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	概	説	と	他	の	1	科	目	を	選	択
物	理	学	概	説	A	及	び	物	理	学	概	説
化	学	概	説	A	及	び	化	学	概	説	B	以
生	物	科	学	概	説	A	及	び	生	物	科	学
地	球	惑	星	シ	ス	テ	ム	学	科	1	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									

・平成17年度化学科卒業生進路状況

(平成18年5月現在)

卒業生総数	就職者								進学	その他	
	一般職						教職			研究生	その他
	製造業	情報通信業	サービス業	卸売業	学校教育	小計	高等学校教諭	小計			
54(20)	7(2)	2(2)	2(1)	1(1)	1(1)	13(7)	1(0)	1(0)	38(13)	0	2(0)

() 内は女子で内数

2-3-4 卒業論文発表実績

【1】平成17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	スタッフ名
化学専攻分子構造化学講座	3	江幡, 井口, 福原
構造物理化学研究グループ	4	井上, 山田, 秋田
固体物性化学研究グループ	4	三吉, 水田, 久保
錯体化学研究グループ	3	藤原(照), 塚原, 岡本
分析化学研究グループ	5	深澤, 灰野, 岩本
構造有機化学研究グループ		
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	山崎, 田林, 高橋
反応有機化学研究グループ	5	山本, 河内
天然物有機化学研究グループ	5	大方, 小島, 平賀, 高木
集積化学研究グループ	4	大野, 岡田, 勝本
量子化学研究グループ	4	相田, 石橋
数理分子生命理学専攻		
物理環境化学研究グループ	4	谷本, 藤原(好), 藤原(昌)
生物化学研究グループ	5	平田, 泉, 芦田
分子生物物理学研究グループ	5	月向, 片柳, 大前
計	54	

【2】平成17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)

- 大環状ポリホスフィノフェロセンの合成および配位子としての機能 (錯体化学)
- ヒト由来ガン遺伝子産生タンパク質 Reg IV の X 線解析に向けた大量調製 (分子生物物理学)
- チミンダイマー(6-4)生成物の光回復酵素による修復過程についての理論化学的考察 (量子化学)
- 欠陥スピネル型硫化物の結晶構造とイオン伝導性 (固体物性化学)
- アミノ酸とその水和クラスターの超音速ジェット分光 (構造物理化学)
- 連続的 Michael 反応によるビシクロ化合物構築法の天然物合成への応用 (天然物有機化学)
- タバコ培養細胞由来のエノン還元酵素の単離・精製と構造 (生物化学)
- [4+3]付加環化反応を鍵反応とした Phomoidride 類の合成研究 (天然物有機化学)
- O₃の紫外光解離により生成する振動励起 O₂の消失過程 (反応物理化学)
- 深海微生物および近縁種由来の新規なジヒドロ葉酸還元酵素のクローニングと発現系の構築 (分子生物物理学)
- 亜硝酸還元酵素の結晶解析に向けた大量調製 (分子生物物理学)
- パラジウムを中心金属としてもつカルボジホスホラン錯体の合成とオルトメタル化反応 (錯体化学)
- ペロブスカイト型トリハロゲノスズ(II)酸塩の構造と光学的性質 (固体物性化学)
- Jurkat 細胞におけるγ線および紫外線応答タンパク質のプロテオミクス (生物化学)
- 新奇オキシエチレン系非イオン性界面活性剤/水系の状態図 (構造物理化学)
- 異方の磁性イオンを用いた、新規キラル磁性体の合成とその物性研究 (固体物性化学)
- 化学修飾法と質量分析法を組み合わせた Melittin の膜トポロジー解析 (生物化学)
- 電子線/活性化学種衝突法を用いた気相反応実験装置の開発と応用 (集積化学)
- ホスト-ゲスト相互作用を基盤としたフラーレンを含む超分子ポリマーの合成研究 (構造有機化学)
- キラルなリン酸触媒を用いた不斉 Michael 反応の検討 (天然物有機化学)
- 赤外分光法によるビニルエーテル系高分子の水和に関する研究 (集積化学)
- ベンゼン環にチオフェン環を縮環した新規配位子前駆体の合成の試み (反応有機化学)
- オルト位にホウ素置換基を有するアリールヒドロシランの反応性：還元反応および脱水素縮合反応 (反応有機化学)
- カリックス〔4〕アレーンを基盤とした金属配位による自己集合ホストの合成 (構造有機化学)
- 強磁場を使った過重力環境によるポルフィリンナノロッドの磁気配向 (物理環境化学)
- 水素結合の協同性を考慮したメタノールの OH 伸縮バンドの解析 (集積化学)
- 電解重合反応における3次元的キラリティーの磁気誘導 (物理環境化学)
- フォトクロミック反応による水の熱対流に対する磁場効果 (物理環境化学)
- 4つのポルフィリンをもつクレフト型分子の合成とその会合挙動 (構造有機化学)
- 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)
- ポリチオフェンナノクラスターの磁気配向 (物理環境化学)

メタラーホスフィンボランならびに-ホスフィノボランダイマーの光反応による新規なリン-ホウ素環状化合物への誘導の試み (錯体化学)

赤潮プランクトン *Heterocapsa circularisquama* から単離されたカキ致死活性物質の構造決定に関する研究 (天然物有機化学)

Peterson 反応中間体のモデル化合物における E1cb 反応の検討 (天然物有機化学)

吸着逆ミセルを用いて合成したナイロンへのテトラフェニルポルフィン (TPP) の吸着・脱着挙動 (分析化学)

超音波音速法によるタンパク質の圧縮率-構造相関の研究-アミロイド形成反応を中心に- (分子生物物理学)

脂質二分子膜を有する単一ジャイアントベシクルのマイクロマニピュレーション (分析化学)

箱型分子を用いる [2] ロタキサン合成法の検討 (構造有機化学)

ボリル (アリール) テルリドの合成と分解反応 (反応有機化学)

長鎖フェニルアルコールの構造と緩和速度との相関 (構造物理化学)

ピリミジンを配位子とする結合エネルギー評価系の構築 (反応有機化学)

柑橘類からの生理活性物質の探索と構造解析 (生物化学)

時間分解赤外分光装置の制作と二酸化チタン光触媒反応への応用 (量子化学)

HF, NH₃ の内殻共鳴励起後のオージェダイナミクス (反応物理化学)

酸素内殻励起による (CO₂)_n クラスターの光化学過程 (反応物理化学)

チタナジホスフィンキレート配位子 (Cp₂Ti(OPPh₂)₂) を用いた Ti-Pd ヘテロ二核錯体触媒の合成 (錯体化学)

水溶液中におけるグリシンのプロトン移動についての理論化学的研究 (量子化学)

ダイズ培養細胞における化学ストレスに応答する遺伝子のクローニングと発現解析 (生物化学)

全反射レーザー励起顕微法による溶液界面ローダミン B の蛍光異方性測定 (分析化学)

不斉補助試薬を導入した 2 級アルコールの配座解析 (構造有機化学)

2-, 3-, 4-ピリジンカルバルデヒドのコンホメーションに関するマトリックス単離赤外分光研究 (集積化学)

ジチオオキサレートで架橋した錯体の合成と性質 (固体物性化学)

真空紫外 CD 分光法によるタンパク質の二次構造予測 (分子生物物理学)

2-4 その他特記事項

2-4-1 学生の表彰

学長表彰者 1 名

日本化学会中国四国支部長賞受賞者 1 名

報告書作成ワーキンググループ

大野 啓一	(平成17年度化学科自己点検・評価委員)
秋田 素子	(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)