

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18年度
(2006年度)

平成19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 専攻等の組織と運営.....	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.....	20
分子構造化学講座.....	20
構造物理化学研究グループ.....	21
固体物性化学研究グループ.....	23
錯体化学研究グループ.....	27
分析化学研究グループ.....	29
構造有機化学研究グループ.....	32
分子反応化学講座.....	36
反応物理化学研究グループ.....	36
有機典型元素化学研究グループ.....	40
反応有機化学研究グループ.....	44
集積化学研究グループ.....	48

量子化学研究グループ	53
1-4-3 各種研究員と外国人留学生の受入状況	58
1-4-4 研究助成金の受入状況	59
1-4-5 学界ならびに社会での活動	60
1-5 その他特記事項	65
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)	65
2 化学科	71
2-1 学科の理念と目標	71
2-2 学科の組織	72
2-3 学科の学士課程教育	74
2-3-1 アドミッション・ポリシーとその目標	74
2-3-2 学士課程教育の理念と達成のための具体策	74
2-3-3 学士課程教育の成果とその検証	75
2-3-4 卒業論文発表実績	84
2-4 その他特記事項	87
2-4-1 学生の表彰	87
報告書作成ワーキンググループ	88

はじめに

平成18年度化学専攻長

江幡 孝之

化学専攻では平成16年度から「分子認識と分子設計」や「量子生命科学」に関する研究を中期目標として進めてきました。この中期目標・中期計画がどのくらい達成されているか、そろそろ検証の時期に入ってきました。現在、私達のおかれた環境はめまぐるしく変わろうとしています。今年度末に教授、助教授、助手から教授、准教授、助教、新助手という新しい名称に変わり、大学のシステムが変化するとともに、学部・大学院の教育改革がよりいっそう求められています。そのなかで、化学専攻・化学科は、広島大学が掲げた到達目標型の学部教育プログラムのもとで授業科目の内容の充実化を図るとともに、大学院では主専攻の「化学プログラム」および「化学と生命」副専攻プログラムを立ち上げました。平成15年度科学技術振興調整費新興分野人材養成「ライフサイエンス分野を中心とする融合領域」の分野として採択された「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」(Nabit プログラム)も順調に進み、来年度に最終年度を向かえます。平成17年度から2年間実施した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」も順調に成果を挙げました。

化学専攻ではこの数年間で教授の新旧交代が大きく進んでおり、次年度は3名の教授を迎える予定です。また、今年度は研究グループの名前が変わりました。天然物有機化学研究グループが反応有機化学グループに、反応有機化学グループが有機典型元素化学研究グループに、それぞれ変わりました。現在、これまで活躍されてきた教員と新しい教員がともに協力し合い、中期目標を含め今後の化学専攻の教育・研究の方向が示されようとしています。

この報告書は、化学専攻および化学科の平成18年度における教育・研究の成果です。最近、基盤研究費（運営交付金）に関して「教育費は公平に配分するが研究費は成果を加味した傾斜配分にする」という意見が大きくなってきています。このように大きく変わる教育・研究環境は我々にとって決して優しいものではなく、我々は今後生き残るためのいっそうの努力が必要です。そのためにも、教育研究成果の報告がこれまでに増して重要になってきます。我々はこの成果を自ら吟味し、さらに外部からの評価・批判を受け、これからの教育・研究をいっそう推進させなければなりません。我々の研究・教育の最新情報については、下記のURLをご参照ください。特に化学専攻・化学科のホームページはこれまでと比べ情報量がより多くなり、また見やすくなっています。

化学専攻

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

化学科

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

NaBi/T プログラム

<http://minerva.chem.sci.hiroshima-u.ac.jp/NaBiT/NaBiTj.html>

先端研究拠点事業

<http://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、有機典型元素化学、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の化学系研究グループが存在し、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18年度化学専攻長	江幡 孝之
化学副専攻長	井上 克也
化学専攻長補佐	石橋 孝章

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18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	秋田	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	藤原（照） 江幡
人事交流委員会	江幡
教務委員	小島** 相田
評価委員	大野* 藤原（照）**
安全衛生委員	◎●井上
広報委員	高橋*
大学院委員	江幡 藤原（照）
入学者選抜方法検討委員会	灰野**
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	江幡
教育交流委員	岡田
情報セキュリティ委員会	高橋**
ナノテク・バイオ・IT融合教育プログラム支援推進協議会	相田 藤原（照）
技術センター（理学部等部門）運営協議会委員	江幡 井口

◎は委員長 ●全学委員

*は 任期2年（H17年度～）

**は任期2年（H18年度～）

化学専攻教員の理学研究科および全学での活動

(学士課程教育センター) 学士課程会議	平田 敏文	平成 18 年 6 月 20 日～
教育評価委員会	平田 敏文	平成 18 年 4 月 1 日～
教員養成会議 教員養成カリキュラム部会	平田 敏文	平成 18 年 10 月 3 日～
入学センター会議	平田 敏文	平成 18 年 4 月 1 日～
入学者成績追跡調査委員会	灰野 岳晴	平成 18 年 8 月 8 日～
進路・就職支援担当者	平田 敏文	
国際交流推進会議	山本 陽介	平成 18 年 6 月 1 日～
国際交流推進会議 短期留学交流プログラム部会	山本 陽介	平成 17 年 10 月 1 日～ 平成 18 年 5 月 31 日
技術センター運営会議	山本 陽介	平成 18 年 4 月 1 日～
留学生センター運営委員会	小島 聡志	平成 16 年 4 月 1 日～
先進機能物質研究センター運営委員会	井上 克也	平成 18 年 4 月 1 日～
北京研究センター運営委員会	山崎 勝義	平成 18 年 4 月 1 日～
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	高橋 修	平成 17 年 5 月 2 日～
安全衛生委員会	山本 陽介	平成 16 年 4 月 1 日～
安全衛生委員会 作業環境測定専門委員会	山本 陽介・小島 聡志	平成 16 年 4 月 1 日～
安全衛生委員会 薬品管理システム専門委員会	山本 陽介・灰野 岳晴	平成 16 年 4 月 1 日～
安全衛生委員会 東広島地区安全衛生委員会	井上 克也	平成 18 年 4 月 1 日～
環境連絡会議	井上 克也	平成 18 年 8 月 1 日～
環境安全センター運営委員会	井上 克也	平成 18 年 6 月 1 日～
男女共同参画推進委員会	平田 敏文	平成 19 年 2 月 1 日～

1－2－1 教職員

平成 19 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	速水	真也
助教授	水田	勉
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	平木	菜奈子

平成18年度の非常勤講師

- 秋光 純 (青山学院大学大学院理工学研究科教授)
 授業科目名：無機固体化学特論－無機固体の超伝導、磁気物性－
 担当：固体物性化学研究グループ
- 築山 光一 (東京理科大学理学部教授)
 授業科目名：反応物理化学特論－レーザー分光学で量子状態選択的素過程を探る－
 担当：反応物理化学研究グループ
- 加藤 修雄 (大阪大学産業科学研究所教授)
 授業科目名：有機合成化学
 担当：構造有機化学研究グループ

1－2－2 教職員の異動

平成18年

4月26日 大方 勝男 (分子反応化学講座教授)

死去

平成19年

1月1日 速水 真也 (分子構造化学講座助教授)

九州大学大学院理学研究院化学部門助手より採用

3月31日 大野 啓一 (分子反応化学講座教授)

定年退職

3月31日 深澤 義正 (分子構造化学講座教授)

定年退職

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行う。
- (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行う。
- (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18年度化学専攻在籍学生数

(平成18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18年度	31 (11) [1] {1}	3
平成17年度	31 (5)	9 (1) [1] <2>
平成16年度	2 (1)	3 {1} <1>
平成15年度以前		5 <1>
合計	64 (17) [1] {1}	20 (1) [1] {1} <4>

() 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18年度生	岡田	深澤, 小島
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

授 業 科 目		博 士 課 程 前 期								担 当 教 員	
		1 年 次				2 年 次					
		1		2		3		4			
		単 位	時 間	単 位	時 間	単 位	時 間	単 位	時 間		
必修	物理化学概論	2	2							相田，山崎	
	無機化学概論	2	2							井上，三吉	
	有機化学概論	2	2							深澤	
	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							開講しない	
	構造物理化学Ⅱ			2	2					江幡，井口	
	固体物性化学Ⅰ	2	2							井上	
	固体物性化学Ⅱ			2	2					井上	
	錯体化学Ⅰ	2	2							開講しない	
	錯体化学Ⅱ			2	2					開講しない	
	分析化学Ⅰ	2	2							開講しない	
	分析化学Ⅱ			2	2					開講しない	
	構造有機化学Ⅰ	2	2							灰野	
	構造有機化学Ⅱ			2	2					深澤	
	光機能化学			2	2					齋藤（自然科学研究支援開発センター）	
	放射線反応化学	2	2							開講しない	
	量子化学			2	2					開講しない	
	集積化学	2	2							大野，岡田	
	反応物理化学Ⅰ	2	2							開講しない	
	反応物理化学Ⅱ			2	2					開講しない	
	反応有機化学Ⅰ	2	2							河内	
	反応有機化学Ⅱ			2	2					山本	
	天然物有機化学Ⅰ	2	2							開講しない	
	天然物有機化学Ⅱ			2	2					開講しない	
	計算情報化学			2	2					松原（特任助教授），相田	
	計算化学演習			2						松原（特任助教授），相田：後期集中	
	物質科学特論			2	2					岩田（特任教授），相田	
	量子情報科学	2								神沼（予定），相田：夏期集中	
	計算機活用特論	2								相田，森本（総合科学部）：夏期集中	
	計算機活用演習	2								相田，森本（総合科学部）：夏期集中	
	択	構造物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	江幡，井口
		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	
光機能化学セミナー		1	2	1	2	1	2	1	2	齋藤（自然科学研究支援開発センター）	
有機化学系合同セミナー		1	2			1	2			大方，深澤，山本	
特別講義		無機固体化学特論－無機固体の超伝導，磁気物性－（1単位，前期集中）									秋光 純（青山学院大学）
	反応物理化学特論－レーザー分光学で量子状態選択的素過程を探る－（1単位，後期集中）									築山光一（東京理科大学）	
	有機合成化学（1単位，後期集中）									加藤修雄（大阪大学）	

・平成18年度化学専攻開講授業科目

	担 当 教員	授業のキーワード
現代英語	小島	英語, ヒアリング, リスニング, 熟語
構造物理化学Ⅱ	江幡 井口	光吸収・発光, ラマン散乱, 時間を含む摂動論, 断熱近似, 電子振動遷移
固体物性化学Ⅰ	井上	固体物性, 複合物性, 分子磁性, 分子伝導性, X線, 回折現象
固体物性化学Ⅱ	井上	固体複合物性, 磁性, 伝導性, 誘電性, 光学物性
構造有機化学Ⅰ	灰野	超分子化学, 分子認識, コンビナトリアル化学, 立体配座
構造有機化学Ⅱ	深澤	構造有機化学, 有機計算化学
量子情報科学	神沼 相田	物理学と情報, 量子計算, 情報と生命
反応有機化学Ⅰ	河内	NMRによる構造および速度解析・典型元素
反応有機化学Ⅱ	山本	有機反応の中間体, 有機典型元素, 有機超原子価化合物, 有機合成
集積化学	大野 岡田	光と分子, エネルギー伝達, 分子間相互作用, 水素結合
物質科学特論	岩田 相田	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
計算情報化学	松原 相田	量子化学, 計算化学, 情報化学, 化学情報学, データベース, 分子設計
計算化学演習	松原 相田	量子化学, 計算化学
計算機活用特論	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
物理化学概論	相田 山崎	分子力場法, 分子軌道法, 反応速度論, 化学反応論
無機化学概論	井上 三吉	典型元素分子の定性的分子軌道, 固体化学, 無機固体の構造と物性
有機化学概論	深澤	有機分子の構造, 分子力学, 遷移状態構造論, 立体電子効果, 化学反応と電子の軌道, 摂動論と HSAB, 溶媒効果, ハメット則
光機能化学	齋藤	凝縮相, 光物性, 分子分光学, ナノ物性, レーザー

・各研究グループの在籍学生数

(平成18年 8月現在)

研究グループ名	M1	M2	D1	D2	D3	D4	D5
化学専攻分子構造化学講座							
構造物理化学研究グループ	2	0	0	0	0	0	0
固体物性化学研究グループ	0	2	0	2	0	0	1
錯体化学研究グループ	4	2	0	0	0	0	0
分析化学研究グループ	1	3	0	1	0	1	0
構造有機化学研究グループ	4	5	0	1	0	0	1
光機能化学研究グループ	0	1	0	0	0	0	0
化学専攻分子反応化学講座							
反応物理化学研究グループ	2	1	0	0	0	0	0
有機典型元素化学研究グループ	5	5	2	2	0	0	0
反応有機化学研究グループ	7	6	0	2	1	1	0
集積化学研究グループ	2	4	0	0	1	0	0
量子化学研究グループ	3	4	1	1	1	2	0
放射線反応化学研究グループ	0	0	0	0	0	0	0
計	30	33	3	9	3	4	2

・博士課程修了者の進路

(平成19年5月現在)

（平成17年度実績）

	修了者総数	就職者							進学	研究生・補助員	その他
		一般職				教職					
		製造業	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(5)	23(5)	1(0)	0	24(5)	2(0)	0	2(0)	4(0)	0	0
後期修了*	5(1)	2(0)	0	0	2(0)	0	0	0	—	1(0)	2(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⁾	113
博士課程後期 ⁽²⁾	29
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	2

(2006年度の発表について記載：2006年4月から2007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⁾	11
博士課程後期 ⁽²⁾	11
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	1

(2006年度の発表について記載：2006年4月から2007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。

梅田 康広	環状キラルアミンを用いた不斉反応への応用 (反応有機化学)
尾野上 康裕	ホウ素原子置換芳香族化合物のオルトメタル化に関する研究 (有機典型元素化学)
神谷 幸男	液液界面に生成するテトラフェニルポルフィン会合体のマイクロドメインの in situ 顕微分光測定と解析 (分析化学)
小松 裕之	重水素化ラベル振動分光法による水溶液中における 2-Butoxyethanol の分子構造および水和挙動の研究 (集積化学)
小山 美沙緒	立体規則性を有する poly(<i>N</i> -isopropylacrylamide)の局所構造－溶液物性相関の研究 (集積化学)
近藤 あさ子	交差共役ジエノンの Diels-Alder 反応の, Brønsted 酸による加速効果と, 天然物合成への応用研究 (反応有機化学)
末原 道教	液液界面近傍における単一 DNA 分子の動的挙動の全内部反射顕微蛍光測定と解析 (分析化学)
末益 匠	アデニン単分子膜の作製とその振動分光学的研究 (量子化学)
鈴木 麻希	シンコナアルカロイド誘導体を触媒として用いた不斉シクロプロパン化反応の検討 (反応有機化学)
田中 賢治	連続的な閉環メタセシス反応と渡環 Diels-Alder 反応による三環式骨格の構築に関する検討 (反応有機化学)
田中 宣志	ホスファパラダサイクル錯体を用いた触媒反応とその錯体の酸素に対する反応性の評価 (錯体化学)
谷 厚志	<i>o</i> -(フルオロシリル)フェニルリチウムを鍵中間体とする二座ルイス酸の合成と反応 (有機典型元素化学)
中辻 惇也	カルボニル酸素を配位子とする超原子価 5 配位ホウ素化合物の合成 (有機典型元素化学)
長谷川 傑	赤外分光法を用いた 2-pyridone およびその誘導体の溶液中における互変異性の研究 (集積化学)
馬場 敬之	遷移金属に配位したホスフィンイミドと不飽和有機配位子との環化反応と, 生成した P-N キレート骨格の反応性 (錯体化学)
東川 大志	Chiral effects on magnetic properties for chiral and racemic W^V - Cu^{II} prussian blue analogues (W^V - Cu^{II} プルシアンブルー型磁性体における磁性に対するキラル構造の効果) (固体物性化学)
日高 裕輔	レドックス応答性分子ピンセットのコンフォメーション制御 (構造有機化学)
福岡 博之	光学活性な環状アミドでキャップしたカリックス[5]アレーンホストのキラルゲストに対する包接挙動 (構造有機化学)
福田 克哲	銀イオンとキャビタンドを用いた自己集合カプセル分子のゲスト包接挙動 (構造有機化学)
藤井 絵美	シンコナアルカロイドを不斉有機触媒として用いた不斉 Michael 反応に関する研究 (反応有機化学)
前田 俊樹	芳香族有機単分子膜の IR-UV/VIS 電子振動二重共鳴 SFG 分光 (量子化学)
前原 淳之	イリド配位子を用いた典型元素アート錯体の合成研究 (有機典型元素化学)

松下 孝也	加熱気化導入ーICP発光分析による鉄鋼試料中微量元素の迅速定量法の開発 (分析化学)
南 孝将	金ナノ粒子ネットワーク構造の創製とその分光・ナノ構造観測ならびに理論 的考察 (光機能化学)
山田 朋範	Quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた多原子分子の基本音と IR/Raman 強度についての理論的研究 (量子化学)
山田 浩綱	新規三座配位子を有する遷移金属錯体の合成と応用 (有機典型元素化学)
山平 和也	赤潮プランクトン <i>Heterocapsa circularisquama</i> に含まれる二枚貝致死活性物 質の単離と構造解析 (反応有機化学)
山本 恵輔	O1s内殻励起酢酸クラスターの電子状態変化と光誘起反応のクラスターサイ ズ依存性 (反応物理化学)
八和田 雪美	二つの環状構造単位の連結による新規[3] ロタキサンの合成 (構造有機化 学)
脇本 直樹	直鎖アルキルアミンを導入した HTiNbO ₅ における層間分子の動的挙動 (固 体物性化学)

1-3-6 博士学位

授与年月日を〔 〕内に記す。

三宅 敏子 [平成 18 年 9 月 25 日] (甲)

Theoretical Study on the H-bond Patterns in Water Clusters

(水クラスターの水素結合パターンに関する理論化学的研究)

主査：相田 美砂子 教授

副査：江幡 孝之 教授, 大野 啓一 教授

吉田 智喜 [平成 19 年 3 月 5 日] (甲)

Theoretical study on the interaction between amino acid and DNA bases

(アミノ酸と核酸塩基との間の相互作用に関する理論化学的研究)

主査：相田 美砂子 教授

副査：大野 啓一 教授, 楯 真一 教授

河口 誉元 [平成 19 年 3 月 5 日] (乙)

The study of dynamic properties and host-guest interactions in some inclusion compounds studied by solid state NMR

(固体 NMR による包接化合物の動的挙動とホスト・ゲスト相互作用の研究)

主査：井上 克也 教授

副査：藤原 照文 教授, 三吉 克彦 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18年度のTA

氏名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
吉田 祐輔	化学実験	固体物性化学	D2
片岡 紘子	化学実験	分析化学	D2
大久 真幸	化学実験	量子化学	D2
山口 虎彦	化学実験	有機典型元素化学	D2
田中 正洋	化学実験	構造有機化学	D2
水野 初	化学実験	生物化学	D2
沖本 真広	化学実験	有機典型元素化学	D1
坂宗 和明	化学実験	量子化学	D1
山道 秀映	化学実験	有機典型元素化学	D1
大久 真幸	情報活用演習	量子化学	D2

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18年 4月10日 10:00

場所： 理学部 B501号

講師： Prof. Christian G. Bochet (フライブルグ大学, スイス)

演題： Chromatic orthogonality: a new form of selectivity in organic synthesis

担当： 反応有機化学研究グループ

日時： 平成18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18年 7月 4日 15:00

場所： 理学部 E002号室

講師： 秋光 純 教授 (青山学院大学理工学研究科)

演題： 超伝導の夢を追って- 物理学と人生-

担当： 固体物性化学研究グループ

日時： 平成18年 10月 5日 16:00

場所： 理学部 B301号室

講師： Prof. F. A. Devillanova (イタリア・University of Cagliari)

演題： The nature of the chemical bond in linear three-body systems: from I³- to mixed chalcogen/halogen and trichalcogen moieties

担当： 有機典型元素化学研究グループ

日時： 平成18年12月13日 16:00

場所： 理学部 E002号室

講師： 加藤 修雄 教授 (大阪大学産業科学研究所)

演題： フシコクシン型ジテルペノイドの抗がん活性

担当： 構造有機化学研究グループ

・ 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。数理分子生命理科学研究科（化学系）と共催で開催している。平成18年度の世話人は藤原好恒助教授である。

平成18年度の講師と題目を次にあげる。

第71回 2007年2月27日

『機能性金属錯体の開発—光スイッチング分子から液晶分子まで—』

速水 真也 (化学専攻分子構造化学講座)

・ セミナー等開催実績

第41回 有機反応若手の会

日時： 平成18年 7月

場所： グリーンピアせとうち

担当： 山本 陽介

第56回 錯体化学討論会

日時： 平成18年9月

場所： 東千田キャンパス

担当： 三吉 克彦

第3回 ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム

日時： 平成18年12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（2006 年 1 月～12 月）と国際会議・国内学会（2006 年 4 月～2007 年 3 月）の総数を示す。

項 目	数
論文	8 6
著書	1
総説	2
国際会議	4 7
国内学会（招待・依頼・特別講演）	2 4
特許出願	2

・ 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
2000 年度 (平成 12 年度)	第 2 3 回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞	小島 聡志
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18年度のRA

大学院生氏名	山口 虎彦	所属研究グループ	有機典型元素化学
学年	D 2	指導教員	山本 陽介 教授
研究プロジェクト名	超原子価炭素化合物の合成		

大学院生氏名	沖本 真広	所属研究グループ	有機典型元素化学
学年	D 1	指導教員	山本 陽介 教授
研究プロジェクト名	新規典型元素化合物の研究		

大学院生氏名	山道 秀映	所属研究グループ	有機典型元素化学
学年	D 1	指導教員	山本 陽介 教授
研究プロジェクト名	新規典型元素化合物の研究		

大学院生氏名	田中 正洋	所属研究グループ	構造有機化学
学年	D 2	指導教員	深澤 義正 教授
研究プロジェクト名	自己集合を利用したソフトマテリアルの開発		

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，アミノ酸，包接化合物である。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。平成18年度の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，長鎖フェニルアルカノールのOH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し，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はエネルギーのみに依存することも明らかになった。長鎖フェニルアルカノールのOH伸縮振動緩和では，アルキル鎖中の振動エネルギーの伝搬時間が鎖長によらず，アルキル鎖中を共鳴的にエネルギーが移動することが明らかになった。

超音速分子線中の孤立冷却したL-フェニルアラニン，L-チロシンのコンフォメーションや水和構造の決定を行った。コンフォマーの分離はレーザー誘起蛍光分光を用い，各コンフォマーや水和の構造決定は赤外-紫外二重共鳴分光による赤外スペクトル観測および量子化学計算との対応で行った。その結果，L-フェニルアラニンでは6つ，L-チロシンでは8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しないものとに分類することができた。さらにこれらコンフォマーが水分子と水素結合（水和）する際，分子内水素結合しないコンフォマーが優先的に水和することが明らかになった。この研究は，PCCPのカバーページを飾った。

包接化合物であるカリックスアレンやクラウンエーテルの超音速ジェットレーザー分光を行った。ジェット冷却を行うことにより，それぞれの分子の詳細な電子スペクトルを観測することができた。さらに，希ガスや水分子を内包分子とした分子クラスターのレーザー分光にも成功し，今後，これら包接化合物の新たな包接能力を研究する可能性を切り開いた。

また，上記の中性分子，クラスターの研究に加え，質量選別光解離分光法による分子クラスターイオンのための真空装置の設計，製作を行った。現在，この装置を用いて二酸化炭素クラスターイオンの赤外分光を進めており，今後はエレクトロスプレー法による電解質溶液の溶媒和構造の解明へと研究範囲を拡大していく予定である。

オキサアルキル鎖による分子間引力と反発の拮抗相互作用を利用した，新しい分子間相互作用による非常にユニークで汎用性の高い有機材料の新規物性改良法を開発し，特許申請した。

イノベーションジャパン 2006 をはじめ多くの産学官共同新技術説明会で発表を行い、その一部は化学工業日報で大きく取り上げられた。

○発表原著論文

- N. Tsuji, S. Ishiuchi, M. Sakai, M. Fujii, T. Ebata, C. Jouvét, C. Dedonder-Lardeux (2006) Excited State Hydrogen Transfer in Fluorophenol Ammonia Clusters Studied by Two-Color REMPI Spectroscopy. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 114 – 121
- K. Kouyama, M. Miyazaki, N. Mikami, and T. Ebata (2006) IR laser manipulation of cis-trans isomerization of 2-naphthol and its hydrogen-bonded clusters. *J. Chem. Phys.* **124**, 054315
- T. Hashimoto, Y. Takasu, Y. Yamada, and T. Ebata (2006) Anomalous conformer dependent S_1 lifetime of L-Phenylalanine. *Chem. Phys. Lett.* **421**, 227-231
- Y. Yamada, M. Kayano, N. Mikami, and T. Ebata (2006) Picosecond IR-UV pump-probe study on the vibrational relaxation of phenol-ethylene hydrogen-bonded cluster -Difference of relaxation route/rate between the donor and the acceptor site excitations. *J. Phys. Chem. A* **110**, 6250-6255
- T. Ebata, T. Hashimoto, T. Ito, Y. Inokuchi, F. Altunsoy, B. Brutschy, and P. Tarakeshwar (2006) Hydration Profiles of Aromatic Amino Acids: Conformations and Vibrations of L-Phenylalanine-(H₂O)_n Clusters. (cover picture) *Phys. Chem. Chem. Phys.* **8**, 4783 - 4791
- Y. Yamada, J. Okano, N. Mikami, and T. Ebata (2006) Picosecond time-resolved study on the intramolecular vibrational energy redistribution of NH stretching vibration of jet-cooled aniline and its isotopomer. *Chem. Phys. Lett.* **432**, 421-425
- Y. Mune, K. Ohashi, T. Iino, Y. Inokuchi, K. Judai, N. Nishi, and H. Sekiya (2006) Infrared photodissociation spectroscopy of $[Al(NH_3)_n]^+$ ($n = 1-5$): Solvation structures and insertion reactions of Al^+ into NH_3 . *Chem. Phys. Lett.*, **419**, 201–206.
- T. Iino, K. Ohashi, Y. Mune, Y. Inokuchi, K. Judai, N. Nishi, and H. Sekiya (2006) Infrared photodissociation spectra and solvation structures of $Cu^+(H_2O)_n$ ($n = 1-4$). *Chem. Phys. Lett.*, **427**, 24–28.
- K. Fukuhara, H. Kumamoto, and H. Matsuura (2006) Molecular conformation and melting behavior of alkyl/oligo(oxyethylene)/alkyl triblock position isomers: effect of the position of an oligo(oxyethylene) block. *J. Phys. Chem. B*, **110**, 16239–16247.

○国際会議・国際学会

- T. Ebata “Frequency and time domain spectroscopy of gas phase molecules and their clusters in supersonic beams.” Symposium on Recent Topics in Molecular Spectroscopy and Dynamics (April 1, 2006, Kyoto, Japan) (招待講演)
- T. Ebata “Vibrational dynamics of hydrogen-bonded clusters studied by time and frequency domain spectroscopy.” International Conference on Raman Spectroscopy (August 20-25, 2006, Yokohama, Japan) (招待講演)

○国内学会

- 江幡孝之, 「アミノ酸のコンフォーマー安定性と水和構造」。分子研研究会「ホモキラリティーの起源に関する星間化学・分子科学」(2006年11月7–8日, 岡崎)(依頼講演)
- 江幡孝之, 「カリックスアレンの超音速ジェットレーザー分光」2006分子構造討論会(2006年9月, 静岡)(ポスター)
- 井口佳哉, 「超音速ジェットレーザー分光によるL-チロシンのコンフォメーション安定性の研

2006 分子構造討論会 (2006 年 9 月, 静岡) (一般講演)

福原幸一, 加納達也, 「オキサアルキル鎖を疎水基に持つ非イオン界面活性剤の相挙動」第 42 回熱測定討論会 (2006 年 10 月 7-9 日, 京都) (一般講演)

伊東孝文, 橋本貴世, 江幡孝之, 井口佳哉: 「L フェニルアラニンの水和クラスター形成におけるコンフォーマー特異性」(口頭) 分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡)

日下良二, 山田勇治, 江幡孝之, 三上直: 「水素結合クラスターの OH 振動緩和過程におよぼす結合強度および質量効果」(ポスター) 分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡)

伊東孝文, 井口佳哉, 江幡孝之: 「L フェニルアラニンの水和クラスター形成におけるコンフォーマー特異性」(口頭) 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 広島)

程野有貴, 伊東孝文, 井口佳哉, 江幡孝之: 「カリックスアレンとそのファンデルワールスクラスターの超音速ジェットレーザー分光」(口頭) 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 広島)

小林悠亮, 井口佳哉, 伊東孝文, 江幡孝之: 「ジェット冷却を用いた L-チロシンの安定コンフォーマーの研究」(口頭) 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 広島)

横田知弓, 池田純子, 塚田真太郎, 福原幸一, 江幡孝之: 「オキサアルカン誘導体の熱物性」(ポスター) 第 42 回熱測定討論会 (2006 年 10 月 7-9 日, 京都)

○特許公報

福原幸一「物質変性剤及びその利用」特願 2006-179959

福原幸一「新規ジカルボン酸ジエステル化合物, 化学物質改質剤及びその利用」特願 2007-089693

○研究助成の受け入れ状況

科学研究補助金基盤研究 (A) (2006 年-2009 年) 「アミノ酸の光化学初期過程におけるコンフォーマー特異性の発見と解明」(代表) 江幡孝之

サタケ技術振興財団助成金 (2006 年) 「アミノ酸のコンフォメーション特異的光化学反応の解明」江幡孝之

科学研究補助金若手研究 (A) (2006 年-2007 年) 「エレクトロスプレー法- 質量選別光解離分光法による電解質溶液のイオン水和構造の研究」(代表) 井口佳哉

○産学連携実績

福原幸一「ソフトマテリアル全般に適用可能な材料の融点降下法」新技術説明会 (2006 年 7 月 21 日, 東京)

福原幸一「低融点有機材料を創造するための新しい手法の開発」イノベーションジャパン (2006 年 9 月 13-15 日, 東京)

福原幸一「材料の低融点化を可能にするアルキル鎖構造改変法」広島大学リエゾンフェア (2006 年 11 月 8 日, 広島)

福原幸一「新しい分子間相互作用原理に基づく有機材料の物性改良法」広島大学産学連携センター企業説明会 (2007 年 3 月 19 日, 広島)

○その他特記事項

学生の受賞

伊東孝文; 学生賞, 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (広島), 2006 年 12 月

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）

○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リ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

- Bin Zhang, Zheming Wang, Yan Zhang, Kazuyuki Takahashi, Yoshinori Okano, Hengbo Cui, Hayao Kobayashi, Katsuya Inoue, Mohamedally Kurmoo, Francis L. Pratt, and Daoben Zhu, "Hybrid Organic-Inorganic Conductor with a Magnetic Chain Anion: $\text{K-BETS}_2[\text{Fe III}-(\text{C}_2\text{O}_4)\text{Cl}_2]$ [BETS] Bis(ethylenedithio)tetraselenafulvalene]", *Inorg. Chem.*, **45**, 3275-3280 (2006)
- Kazuki Ohishi, Wataru Higemoto, Akihiro Koda, Shanta R. Saha, Ryosuke Kadono, Katsuya Inoue, Hiroyuki Imai, Hiroyuki Higashikawa, "Possible Magnetic Chirality in Optically Chiral 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 Rotation and Relaxation", *J. Phys. Soc. Jpn.*, **756**, 63705 (2006) Editor's Choice
- Shinya Hayami, Natsuko Motokawa, Aya Shuto, Naoji Masuhara, Yasuhiro Umebayashi, Yonezo Maeda, Osamu Sato, Katsuya Inoue, Ryo Kawajiri, Yui Kumura, Takashi Okubo, and Tadaoki Mitani, "Hysteresis Loops in Dielectric Properties of the Thermochromic Copper(II)Compounds", *Chem. Lett.*, **35**, 1114-1115 (2006)
- Takaki Morita, Satoru Nakashima, Koji Yamada, Katsuya Inoue, "Occurrence of the Spin-crossover Phenomenon of Assembled Complexes, $\text{Fe}(\text{NCX})_2(\text{bpa})_2$ ($\text{X}=\text{S}, \text{BH}_3$; $\text{bpa}=1,2\text{-Bis}(4\text{-pyridyl})\text{ethane}$) by Enclathrating Organic Guest Molecule", *Chem. Lett.*, **35**, 1042-1043 (2006)
- S. Ovchinnikov, I. G. Bostrem, V. E. Sinitsyn, A. S. Boyarchenkov, and N. V. Baranov, K. Inoue, "Quantum dissipation theory of slow magnetic relaxation mediated by domain-wall motion in the one-dimensional chain compound $[\text{Mn}(\text{hfac})_2\text{BNOH}]$ ", *Phys. Rev. B*, **74**, 174427 (2006)
- R. B. Morgunov, V. L. Berdinskia, M. V. Kirman, K. Inoue, J. Kishine, Y. Yoshida, and Y. Tanimoto, "Spin Solitons in Molecular Magnetic Materials with the Chiral Structure", *JETP Letters*, **848**, 446-450 (2006)
- Y. Fujiwara, Y. Katsumoto, Y. Ohishi, M. Koyama, K. Ohno, M. Akita, K. Inoue, and Y. Tanimoto, "Polymerization of N-isopropylacrylamide under magnetic levitation", *Journal of Physics: Conference Series*, **51**, 458-461 (2006)
- T. Kanzawa, Y. Hosokoshi, K. Katoh, S. Nishihara, K. Inoue and H. Nojiri, "EPR measurements of a

two-dimensional spin frustrated system, BIPNNBNO with $S=1$ and $S=1/2$ ", *Journal of Physics: Conference Series*, **51**, 91-94 (2006)

Shinya Hayami, Soushi Miyazaki, Masahiko Yamamoto, Kenji Hiki, Natsuko Motokawa, Aya Shuto, Katsuya Inoue, Teruo Shinmyozu, Yonezo Maeda, "Spin-crossover behaviors of iron(III) compounds with strong intermolecular interactions", *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **79**, 442-450 (2006)

○国際会議・国際学会

K. Inoue, Y. Yoshida, J. Kishine, K. Kikuchi and M. Mitoh, Properties, Structure And Magnetism For Chiral Molecule-Based Magnets, 磁性国際会議 (ICM 2006) , (Aug., 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)

C. González, J. Campo, G.J. McIntyre, F. Palacio, Y. Numata, Y. Yoshida, K. Kikuchi and K. Inoue, MAGNETIC STRUCTURES OF THE THREE CRYSTALLOGRAPHIC PHASES IN THE MOLECULAR MAGNET $[\text{Cr}(\text{CN})_6][\text{Mn}(\text{S})\text{-pnH}(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})$ WHICH EXHIBITS STRUCTURAL CHIRALITY. 磁性国際会議 (ICM 2006) , (Aug., 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)

Y. Hosokoshi, Y. Konishi, S. Nishihara, K. Inoue, MAGNETIC PROPERTIES OF A SPIN-1 LADDER UNDER PRESSURE. 磁性国際会議 (ICM 2006) , (Aug., 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)

Numata Youhei, Inoue Katsuya, Baranov Nicolai, Kikuchi Koichi, Magnetic phase diagram of new chiral molecule-based magnet $[\text{Co}(\text{hfac})_2]\text{BNO}^*$, 分子磁性国際会議 (ICMM 2006) , (Aug., 2006, Victoria, Canada) (ポスター)

González-Jiménez C., Campo J., Palacio F., McIntyre G. J., Inoue K. , Yoshida Y., Kikuchi K., Seaching for magnetic chirality in molecular magnets 分子磁性国際会議 (ICMM 2006) , (Aug., 2006, Victoria, Canada)

Yoshida Yusuke, Kishine Jun-ichir, Kikuchi Koichi, Inoue Katsuya, FC/ZFC Magnetization Comparison Between 2-D Chiral and Achiral Magnet. 分子磁性国際会議 (ICMM 2006) , (Aug., 2006, Victoria, Canada) (ポスター)

Inoue K., Yoshida Y, Kishine J, Mito M, Kikuchi K, Imai H, Chiral Spin Ordering and Dynamics of Structurally Chiral Molecule-based Ferrimagnets 分子磁性国際会議 (ICMM 2006) , (Aug., 2006, Victoria, Canada) (ポスター)

Kishine J, K Inoue, M Mito, K Kikuchi, Chiral Spin Ordering and Chiral Soliton Lattice Formation in Chiral Molecular-based Ferrimagnets 分子磁性国際会議 (ICMM 2006) , (Aug., 2006, Victoria, Canada) (ポスター)

○国内学会

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, 松山, 3月

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, 松山, 3月

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, 松山, 3月

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, 松山, 3月

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, シンポジウム (招待)

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, 東京, 3月(招待講演)

井上克也, 磁気物性と合成化学の接点有機合成化学協会シンポジウム, 広島, 5月(招待講演)

井上克也, 透明分子性カイラル磁性体とその磁気回折, OKAYAMA X'mas X-ray Workshop

「高輝度放射光を用いた物性研究の最前線」, 岡山, 12月(招待講演)

井上克也, 結晶と磁性の chirality : 分子性化合物, 東大研物性研短期研究会「量子スピン系の物理」, 東京, 11月(招待講演)

東川大志, 増原直治, 吉田祐輔, 奥田一樹, 井上克也, $[W^V(CN)_8]^{3-}$ を用いた新規キラル磁性体の構造と物性測定, 第56回錯体化学討論会, 1Ac15, 広島, 2006年9月

東川大志, 増原直治, 吉田祐輔, 奥田一樹, 井上克也, 分子磁性体における磁性のキラル効果, 分子構造討論会 2006, 3D06, 静岡, 2006年9月

東川大志, 山田公一, 奥田一樹, 沼田陽平, 井上克也, Mo^V を用いたキラルマグネットの作成, 分子構造討論会 2004, 4P015, 広島, 2004年9月(ポスター)

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, 日本化学会 第86回 春季年会, 1F2-05, 千葉, 2006, 3月

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, 日本化学会 第86回 春季年会, 1PB-031, 千葉, 2006, 3月

○国際共同研究・国際会議開催実績

井上克也: 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・ラウエランジェバン研究所, 中性子線回折研究, 2002-

井上克也: 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-

井上克也: 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-

井上克也: 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-

井上克也: 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)

井上克也: 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-

井上克也: 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-

井上克也: 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-

井上克也: 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-

井上克也: 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-

井上克也: 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(A)，「結晶と磁性の Chirality」，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

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。

シクロペンタジエニル配位子 (Cp) をアンカーとした架橋配位子は，2つの金属中心を安定に架橋するという目的に適している。この観点から，2つのCpを14族の炭素やケイ素原子で連結したものが，数多く報告されてきたが，連結部を15族のリンとしたものの例は，きわめて限られていた。また，リン上のローンペアへは，第3の金属原子を結合させることができるため，架橋構造の多様性をさらに高められると期待できる。このような観点からリン上に2つのCp基をもつ架橋配位子系の構築に取り組んだ。

P(=S)Ph架橋[1]フェロセノファンを，出発原料として1つのCp環をフェロセンユニットから外すことで第2のメタルを導入可能にするというユニークな合成法を開発した。またCpに結合した架橋のP=Sが，歪んだ構造とはなるもののペンダント配位出来ることを初めて明らかにした。

2つのフェロセンユニットを2つのリンが繋いだリン架橋[1.1]ferrocenophaneの合成に関する研究では，リン上に種々の置換基を導入可能な合成ルートを開発した。これにより，かさ高いリンの2座配位子を合成することが出来，これを配位子に用いたコバルト錯体において，触媒反応の鍵錯体として重要なジアルキルコバルト錯体の単離と構造決定に成功した。

○発表原著論文

- Y. Imamura, T. Mizuta, K. Miyoshi, (2006) Stereoselective Synthesis and Coordination Behavior of Phosphorus-Bridged [1.1]Ferrocenophanes *Organometallics*, **25**, 882-886.
- Y. Imamura, K. Kubo, T. Mizuta, K. Miyoshi, (2006) Reactions of Ring-Slipped Iron Complexes Derived from P(:S)Ph-Bridged [1]Ferrocenophane: Synthesis of Bis(half-sandwich) Heterodinuclear Complexes, *Organometallics*, **25**, 2301-2307.
- K. Kubo, T. Baba, T. Mizuta, K. Miyoshi, (2006) Trapping of Unsaturated Small Molecules through Cyclization with Iron-Iminophosphorane Complexes *Organometallics*, **25**, 3238-3244.
- H. Nakazawa, Y. Miyoshi, T. Katayama, T. Mizuta, K. Miyoshi, N. Tsuchida, A. Ono, K. Takano, (2006) Syntheses, Structures, and DFT Calculations of Phosphenium Phosphite Complexes of Molybdenum: Preference of Non-bridging Form to Bridging Form of a Donor Group *Organometallics*, **25**, 5913-5921.
- W. Affo, H. Ohmiya, T. Fujioka, Y. Ikeda, T. Nakamura, H. Yorimitsu, K. Oshima, Y. Imamura, T. Mizuta, K. Miyoshi, (2006) Cobalt-Catalyzed Trimethylsilylmethylmagnesium-Promoted Radical

Alkenylation of Alkyl Halides: A Complement to the Heck Reaction *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 8068-8077.

Y. Imamura, T. Mizuta, K. Miyoshi, H. Yorimitsu, and K. Oshima, (2006) Synthesis of coordinatively unsaturated cobalt(II)-alkyl complexes bearing phosphorus-bridged [1.1]ferrocenophanes *Chem. Lett.*, **35**, 260-261.

○著書

三吉克彦 (2006) 化学結合と分子の構造 一定性的な分子軌道による理解。講談社

○国内学会

馬場敬之, 久保和幸, 三吉克彦: ホスフィンイミド錯体とニトリルとの環化反応による P-N キレート骨格の形成とその反応性。第 56 回錯体化学討論会 (2006 年 9 月, 広島) (一般講演)
音成洋彰, 久保和幸, 水田 勉, 三吉克彦: カルボジホスホランを配位子としたパラジウム錯体の合成とオルトメタル化。2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (一般講演)
富岡正雄, 久保和幸, 村上江梨, 金光郁恵, 水田 勉, 三吉克彦: 鉄-ホスフィノボランの合成, 構造, および反応性。2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (一般講演)
青谷朋之, 今村友紀, 水田 勉, 三吉克彦: 金属への配位により誘起されるリン中心の立体反転〜大環状ポリホスフィノフェロセンの配座制御〜。日本化学会第 87 春季年会 (2007 年 3 月, 大阪) (一般講演)

青谷朋之, 今村友紀, 水田 勉, 三吉克彦: 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。第 56 回錯体化学討論会 (2006 年 9 月, 広島) (ポスター)

田中宣志, 岩國由紀子, 水田 勉, 三吉克彦: ホスファパラダサイクル錯体の P-Pd 結合への酸素の挿入。第 56 回錯体化学討論会 (2006 年 9 月, 広島) (ポスター)

宮地ちひろ, 片山貴文, 潮 純一, 水田 勉, 三吉克彦: チタナジホスフィンキレート配位子を用いた Ti-Pd-ヘテロ 2 核錯体触媒の合成。第 33 回有機典型元素化学討論会 (2006 年 12 月, 福岡大学) (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 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

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 18 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：逆ミセル溶液のバルク溶媒として用いてきたクロロホルムなどの有害な塩素系有機溶媒を無害なものに換えることを検討し、逆ミセル中でのヨウ素-ルミノール系 CL 反応において 1-ヘキサノール-シクロヘキサン混合溶媒を用いる高感度なフローインジェクション CL 法を確立し、ヨウ素の定量に応用した。

(b) 逆ミセル吸着ナノ界面場を用いたポリアミド合成と分離分析への活用：シリカゲル表面に吸着させた逆ミセルのナノ界面相を反応場としてポリアミドを合成し、それを新規な固定相とする液体クロマトグラフ (LC) 分離法を開発することを目的とし、そのポリアミド固定相のテトラフェニルポルフィンに対する特異な保持能の原因等について検討した。

(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形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直交して印加し、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 18 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量を見積もった。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

T. Fujiwara, I. U. Mohammadzai, M. Kojima and T. Kumamaru (2006) An improved method for the flow-injection determination of iodine using the luminol chemiluminescence reaction in a reversed micellar medium of cetyltrimethylammonium chloride in 1-hexanol-cyclohexane. *Anal. Sci.*, **22**, 67-71.

Y. Okamoto, T. Matsushita, H. Kataoka, S. Tsukahara, T. Fujiwara (2006) Direct Determination of Zinc

in Steel Samples by Electrothermal Vaporization Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry. *Appl. Spectrosc.*, **60**, 339-342.

S. Tsukahara (2006) Measurement of Ordered Associate of Protonated Tetraphenylporphine Formed at Toluene/Aqueous H₂SO₄ Interface by Attenuated Total Internal Reflection Spectroscopy with Polarized Light. *Anal. Chim. Acta*, **556**, 112-120.

○総説

S. Tsukahara (2006) Recent Analytical Methodologies on Equilibrium, Kinetics, and Dynamics at Liquid/Liquid Interface. *Anal. Chim. Acta*, **556**, 16-25.

○国内学会

塚原 聡：液液界面に生成する分子集積体の in situ 顕微分光計測，日本分光学会中国四国支部講演会，（2006 年 10 月，高松市）招待講演

塚原 聡：液液界面に生成するテトラフェニルポルフィン会合体の電場内における泳動挙動，第 2 回大阪大学分析化学研究懇談会，（大阪大学，豊中市，2007 年 3 月）招待講演

塚原 聡：液液界面における不均一反応の in situ 顕微分光計測，日本分析化学会第 55 年会，（2006 年 9 月，大阪大学，豊中市）依頼講演

松下孝也，片岡紘子，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：メタル炉上でのオキシ錯体生成—加熱酸化—ICP 発光分析によるチタンとニオブの同時定量，第 67 回分析化学討論会，（2006 年 5 月，秋田大学，秋田市）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異方性測定と解析，第 67 回分析化学討論会，第 67 回分析化学討論会，（2006 年 5 月，秋田大学，秋田市）一般講演

神谷幸男，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面に生成したポルフィリン会合体のキャラクタリゼーション，日本分析化学会第 12 回中国四国支部分析化学若手セミナー，（2006 年 8 月，小松島市野外活動センター，小松島市）ポスター

中津留可乃，神谷幸男，中田功太，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：吸着逆ミセルを用いて合成したポリアミド固定相シリカゲルへのテトラフェニルポルフィンの吸着・脱着挙動，日本分析化学会第 12 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2006 年 8 月，小松島市野外活動センター，小松島市）ポスター

末原道教，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面近傍における単一 DNA 分子の動的挙動の全内部反射顕微蛍光測定，日本分析化学会第 55 年会，（2006 年 9 月，大阪大学，豊中市）一般講演

中津留可乃，神谷幸男，中田功太，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：逆ミセル吸着界面場を用いて合成したポリアミドへのテトラフェニルポルフィンの吸着・脱着挙動，日本分析化学会第 55 年会，（2006 年 9 月，大阪大学，豊中市）一般講演

塚原 聡，山崎麻美，岡本泰明，藤原照文：トルエン／水界面に吸着したローダミン B の顕微蛍光異方性測定，第 25 回日本溶媒抽出討論会，（2006 年 11 月，金沢工業大学，石川県石川郡）一般講演

末原道教，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：全内部反射蛍光顕微鏡を用いた液液界面近傍における単一 DNA 分子の動的挙動の計測，第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム，（2006 年 12 月，広島大学，東広島市）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
（2002～2006）

○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)「逆ミセル吸着界面におけるポリアミドのナノ構造体形成と分離への応用」 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）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

○その他特記事項

受賞状況

末原道教，学生賞「全内部反射蛍光顕微鏡を用いた液液界面近傍における単一 DNA 分子の動的挙動の計測」，第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム，（2006 年 12 月，広島大学，東広島市）
末原道教，平成 18 年度日本化学会中国四国支部長賞（2007 年 3 月）

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

当研究グループ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ている。その他、溶液中における有機分子の三次元構造解析法の開発、および応用を行っている。

2006 年度の研究成果の概要を以下に示す。

1. カリックス [5] アレーンを基盤とした高次フラーレンを選択的に包接する新規人工ホスト分子を開発した。このホスト分子をもちいて、フラーレン混合物 (高次フラーレン含有率 10 % 以下) の中から高次フラーレンを抽出、濃縮することに成功した。
2. フラーレンを包接するレセプター分子の探索を目的として、金属イオンによって自己集合するレセプター分子の、動的コンビナトリアルライブラリーを構築した。構築したライブラリーから、フラーレンを選択的に包接するレセプターを見いだした。
3. カリックス [4] アレーンを基盤とした単糖を認識する人口レセプターの合成を行った。カルボン酸を持つ単糖を選択的に包接する人口レセプター分子の合成に成功した。
4. 金属配位により自己集合する人工カプセル分子を開発した。このカプセルは分子のサイズを精密に識別することのできる特異な包接空間を持つことを明らかにした。
5. 光学活性な二級アルコールの絶対配置を決定する手法として、不斉補助試薬と化学シフト計算法を組み合わせた方法を開発した。本手法のために開発した新しい不斉補助試薬と化学シフト計算法の組み合わせは、従来法よりも簡便に二級アルコールの絶対配置を決定できることを明らかにした。
6. di-carboxylate Sn^{IV} (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。本手法がポルフィリン金属錯体の溶液中における構造解析法として非常に有効であることを明らかにした。
7. パプアニューギニア産の海綿から、二種類の新規なブリアランジテルペンを単離精製し、構造決定を行った。
分子力場計算と NMR を組み合わせる手法で、ブリアランジテルペンの構造決定を行った。本手法は溶液中で複数の配座をもつ自由度の高い分子の構造決定に有効であることを示した。

○発表原著論文

- N. K. Kubota, Y. Kobayashi, H. Iwamoto, Y. Fukazawa and Y. Uchio (2006) Two new halogenated briarane diterpenes from the papuan gorgonian coral *Junceella fragilis*. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **79**, 634-636.
- H. Iwamoto, Y. Kobayashi, T. Kawatani, M. Suzuki and Y. Fukazawa (2006) Determination of absolute configuration of secondary alcohols using new chiral auxiliary and chemical shift calculation. *Tetrahedron Lett.*, **47**, 1519-1523.
- H. Iwamoto, K. Hori and Y. Fukazawa (2006) Structure elucidation of dicarboxylate complex of Sn^{IV} porphyrin with a ring current effect model. *Tetrahedron*, **62**, 2789-2798.
- T. Haino, M. Yanase, C. Fukunaga, Y. Fukazawa (2006) Fullerene encapsulation with calix[5]arenes. *Tetrahedron Symposia-in-Print*, "Supramolecular Chemistry of Fullerenes," **62**, 2025-2035. (invited)
- T. Haino, M. Kobayashi, Y. Fukazawa (2006) Guest Encapsulation and Self-Assembly of Cavitand-Based Coordination Capsule. *Chemistry - A European Journal*, **12**, 3310-3319.

- T. Haino, T. Fujii, Y. Fukazawa (2006) Guest Binding and New Self-Assembly of Bis-Porphyrins. *J. Org. Chem.*, **71**, 2572-2580.
- Y. Uchio, N. K. Kubota, T. Haino, Y. Fukazawa (2006) Structure Elucidation of Briarane Diterpenoids using Molecular Mechanics Calculations. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **79**, 914-920.
- T. Haino (2006) Cavitand-based Self-Assembling molecular Capsule. *Journal of Northwest Normal University (Natural Science)*, **42**, 73-74.
- T. Haino, C. Fukunaga, Y. Fukazawa (2006) A New Calix[5]arene-based Container: Selective Extraction of Higher Fullerenes. *Org. Lett.*, **8**, 3545-3548.
- T. Haino, H. Mitsuhashi, Y. Ishizu, Y. Fukazawa (2006) Dynamic combinatorial library for fullerene receptors based on metal-assisted self-assembly. *Tetrahedron Lett.*, **47**, 7915-7918.
- T. Haino, M. Nakamura, Y. Fukazawa (2006) Sugar binding to an calix[4]arene-based receptor. *HETEROCYCLES*, **68**, 2477-2482.

○国際会議・国際学会

- T. Haino: Supramolecular nano networks formed by self-assembly of ditopic calix[5]arene and dumbbell-shaped C60. The 209th ECS Meeting (May, 2006, Denver, Colorado) (招待講演)
- T. Haino: Cavitand-based Self-Assembling Molecular Capsule. 16th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP-XVI) & IUPAC 2nd International Symposium on Novel Materials and Synthesis (NMS-II) (July, 2006, Lanzou, China) (招待講演)
- T. Haino, K. Sakamoto, Y. Matsumoto, Y. Fukazawa: Supramolecular Polymer Networks Formed by Self-Assembly of Ditopic Calix[5]arene and Dumbbellshaped-C60. JSPS Core-to-Core program, innovative Synthesis of Novel Main-Group Element Chemistry, Second Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry (Oct., 2006, Tokyo, Japan) (ポスター)

○国内学会

- 深澤義正: NMR 化学シフトを用いて構造を調べる。第 18 回基礎有機化学連合討論会 (第 36 回構造有機化学討論会・第 56 回有機反応化学討論会) (2006 年 10 月, 福岡) (特別講演)
- 深澤義正: NMR 化学シフトからフレキシブルな分子の構造を調べる。2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (特別講演)
- 深澤義正: シクロファンとのかかわり。第 21 回シクロファン研究会 (2006 年 12 月, 神戸) (特別講演)
- 灰野岳晴: 自己組織化による超分子ナノ構造の構築。第 2 回分子情報ダイナミクス研究会 (2006 年 9 月, 大阪) (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ゲスト包接挙動。第 1 回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2006 年 5 月, 筑波) (一般講演)
- 灰野岳晴, 高柳 麗, 藤井隆史, 深澤義正: 芳香族ジアミドで連結されたビスポルフィリンホスト分子の自己集合。第 18 回基礎有機化学連合討論会 (第 36 回構造有機化学討論会・第 56 回有機反応化学討論会) (2006 年 10 月, 博多) (一般講演)
- 田中正洋, 灰野岳晴, 深澤義正: (4-アルコキシフェニル) イソオキサゾールで置換されたベンゼン誘導体の自己集積化。2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (一般講演)
- 塩秀美, 高野竜士, 灰野岳晴, 深澤義正: カリックス[4]アレーンを基盤とした自己集合ホストのキラルゲスト包接挙動。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 広島) (一般講演)

- 福田克哲, 小林睦美, 灰野岳晴, 深澤義正: キラルなゲスト分子によって誘起される自己集合カプセル分子の超分子キラリティー。第3回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006年12月, 広島) (一般講演)
- 高柳麗, 藤井隆吏, 灰野岳晴, 深澤義正: クレフト型テトラキスポルフィリンホスト分子の合成と会合挙動。第3回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006年12月, 広島) (一般講演)
- 福岡博之, 片山正和, 灰野岳晴, 深澤義正: 光学活性な環状アミドを有するカリックス[5]アレーンホストの包接挙動。第3回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006年12月, 広島) (一般講演)
- 日高裕輔, 岩本啓, 深澤義正: レドックススイッチングによる分子ピンセットのコンフォメーション制御。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (一般講演)
- 八和田雪美, 岩本啓, 深澤義正: [3]ロタキサン合成における2つの環状構造単位を結ぶ共有結合部位の効果。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (一般講演)
- 福岡博之, 片山正和, 灰野岳晴, 深澤義正: 光学活性な環状アミドを有するカリックス[5]アレーンホストのゲスト包接挙動。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (一般講演)
- 塩秀美, 高野竜士, 灰野岳晴, 深澤義正: ガリウムイオンにより自己集合したカリックス[4]アレーンビスカテコールホストのゲスト包接挙動。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (一般講演)
- 福田克哲, 小林睦美, 灰野岳晴, 深澤義正: 自己集合カプセル分子のゲスト包接における同位体効果。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (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分子のジアステレオ選択的なゲスト包接。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (一般講演)
- 坂元克司, 松本陽子, 灰野岳晴, 深澤義正: 超分子フラーレンポリマーの形態。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (一般講演)
- 田中正洋, 灰野岳晴, 深澤義正: トリイソオキサゾイルベンゼン誘導体の溶液中における自己集合。日本化学会第87春季年会 (2007年3月, 大阪) (一般講演)
- 坂元克司, 松本陽子, 灰野岳晴, 深澤義正: ホスト・ゲスト相互作用を基盤としたフラーレンポリマーの合成研究。第1回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2006年5月, 筑波) (ポスター)
- 塩秀美, 高野竜士, 灰野岳晴, 深澤義正: 金属配位を利用したカリックス[4]アレーン自己集合ホストの合成。第1回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2006年5月, 筑波) (ポスター)
- 高柳麗, 藤井隆吏, 灰野岳晴, 深澤義正: 四つのポルフィリンをもつクレフト型分子の合成と自己集合。第1回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2006年5月, 筑波) (ポスター)
- 日高裕輔, 岩本啓, 深澤義正: チオールジスルフィド酸化還元反応による分子ピンセットのコンフォメーション制御。第18回基礎有機化学連合討論会 (第36回構造有機化学討論会・第56回有機反応化学討論会) (2006年10月, 博多) (ポスター)
- 岩本啓, 深澤義正: ポルフィリンの環電流計算法とスズポルフィリン-カルボン酸錯体の配座解析。第18回基礎有機化学連合討論会 (第36回構造有機化学討論会・第56回有機反応化学討論会) (2006年10月, 博多) (ポスター)
- 田中正洋, 灰野岳晴, 深澤義正: 1,3,5-トリイソオキサゾイルベンゼン誘導体の自己組織化。第18回基礎有機化学連合討論会 (第36回構造有機化学討論会・第56回有機反応化学討論会) (2006年10月, 博多) (ポスター)

- 坂元克司, 松本陽子, 灰野岳晴, 深澤義正: ホスト- ゲスト相互作用を利用したフラーレンを含む自己集合ポリマーの合成。第18回基礎有機化学連合討論会(第36回構造有機化学討論会・第56回有機反応化学討論会)(2006年10月, 博多)(ポスター)
- 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ジアステレオ選択的なゲスト分子の包接。第18回基礎有機化学連合討論会(第36回構造有機化学討論会・第56回有機反応化学討論会)(2006年10月, 博多)(ポスター)
- 西沙織, 日浦紗喜, 山口泰生, 岩本啓, 深澤義正: ポルフィリンをカリックスアレーンでキャップしたホスト分子の合成。第21回シクロファン研究会(2006年12月, 神戸)(ポスター)
- 日高裕輔, 岩本啓, 深澤義正: レドックススイッチを導入した分子ピンセットのコンフォーメーション制御。第21回シクロファン研究会(2006年12月, 神戸)(ポスター)
- 八和田雪美, 岩本啓, 深澤義正: [3]ロタキサン合成における2つの環状構造単位を連結した効果。第21回シクロファン研究会(2006年12月, 神戸)(ポスター)
- 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分子のジアステレオ選択的なゲスト分子の包接挙動の検討。第21回シクロファン研究会(2006年12月, 神戸)(ポスター)
- 塩秀美, 高野竜士, 灰野岳晴, 深澤義正: カリックス[4]アレーンを用いた自己集合ホストの合成とキラルゲスト分子の包接挙動。第21回シクロファン研究会(2006年12月, 神戸)(ポスター)
- 福岡博之, 片山正和, 灰野岳晴, 深澤義正: 光学活性な環状アミドでキャップしたカリックス[5]アレーンホストのゲスト包接挙動。第21回シクロファン研究会(2006年12月, 神戸)(ポスター)

○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「次世代共役ポリマーの超階層制御と革新機能」研究代表者 赤城和夫(京大院工) [次世代共役ポリマーの創製] 班長 増田俊夫(京大院工) 公募研究「超分子化学を基盤とするフラーレンポリマーの合成と機能制御」灰野岳晴
- 科学研究費補助金 基盤研究(B)「新規フラーレンナノコンポジットの創成と機能化」灰野岳晴
- 研究助成 倉田記念日立科学技術財団 「C60 とカリックス[5]アレーンの超分子形成を基盤とする自己集合ナノ構造の構築に関する研究」灰野岳晴
- 研究助成 中国電力技術研究財団 「フラーレンを基盤とする新規導電性ナノ材料の開発研究」灰野岳晴
- 研究助成 石川カーボン科学技術振興財団 「フラーレンを基盤とする新規ナノ炭素材料の開発」灰野岳晴
- 研究助成 広島大学後援会 「自己複製機能を持つロタキサン分子の創製」岩本啓

○その他特記事項

- 深澤義正, 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」研究協力者
- 灰野岳晴, 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」研究協力者
- 灰野岳晴, 広島大学薬品管理システム専門委員会委員(2004年4月～)

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

大気化学および燃焼化学において最近注目され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研究を進めている。本年度は、2006(平成 18)年 2 月より稼働を開始したレーザ誘起蛍光検出システムを利用して、酸素分子 $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ および一酸化硫黄 $SO(X^3\Sigma^-, B^3\Sigma^-)$ の単一振動準位占有数の時間挙動を「Profile 積分法」を用いて解析し、特定準位のエネルギー移動速度の決定と機構解明を行った。 O_2 に関する成果は、学術雑誌 *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 第 8 巻, 第 16 号 (2006) の内表紙を飾った。

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、動力学的考察からこれらの微視的反応機構の検討を行った。また、蛍光分散スペクトル測定より励起性解離過程に伴う反応ダイナミクスを、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誘起化学

内殻電子は分子内の原子核近傍にそれぞれ局在しているが、分子内の化学的環境に大きく影響を受け、その結合エネルギーはいわゆる「化学シフト」する。我々は、分子内環境だけでなく分子間相互作用といった外部化学環境にもこれらの結合エネルギーや電子励起状態が大きく依存することを、比較的強い水素結合による有機酸クラスターを用い、放射光実験や量子化学的計算を行って明らかにした。さらに、内殻励起後のクラスター光化学過程に見られる分解片クラスター分布を観測し、その分解過程のダイナミクスに対して“Local fragmentation”機構を提唱した。

4. 内殻共鳴状態の傾きの系統性について

内殻励起後の化学反応機構は主に、1. 光励起, 2. オージェ崩壊, 3. 結合解離, の 3 段階を経由し進行する。結合解離のほとんどはオージェ終状態に支配されるが、内殻励起されたことによる効果は内殻正孔状態におけるダイナミクスに反映されるはずであり、ここに内殻励起化学反応の特異性が発現する。我々は内殻共鳴励起状態の傾きに着目し、化学結合と傾きとの間の一般的な規則を見出した。本規則によれば、分子の形を見ただけである程度反応性が理解でき、軟 X 線光化学反応による反応設計を行う上で重要である。

○発表原著論文

K. Yamasaki, H. Fujii, S. Watanabe, T. Hatano, and I. Tokue (2006) Efficient Vibrational Relaxation of $O_2(X^3\Sigma_g^-, v=8)$ by Collisions with CF_4 . *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **8**(16), 1936-1941.

- I. Tokue, K. Yamasaki, and S. Nanbu (2006) Isotope Effects in the Dissociation of the $\tilde{B}^1A_1$ State of SiH_2 , $SiHD$, and SiD_2 Using Three-Dimensional Wave Packet Propagation. *J. Chem. Phys.*, **124**(11), 114308.
- K. Tabayashi, K. Yamamoto, O. Takahashi, Y. Tamenori, T. Gejo, M. Iseda, T. Tamura, K. Honma, I.H. Suzuki, S. Nagaoka, and T. Ibuki (2006) Inner-shell excitation spectroscopy and fragmentation of small hydrogen-bonded clusters of formic acid after core-excitations at the oxygen K-edge. *J. Chem. Phys.* **125**(19), 194307 (10 pages).
- C. Harada, S. Tada, K. Yamamoto, Y. Senba, H. Yoshida, A. Hiraya, S. Wada, K. Tanaka, and K. Tabayashi (2006) Dissociation mechanisms and dynamics of doubly charged CD_3CN observed by PEPICO spectroscopy. *Rad. Phys. Chem.* **75**(11), 2085-2089.
- K. Tabayashi S. Tada, H. Yoshida, S. Wada, and K. Tanaka (2006) Dissociation mechanisms and dynamics of core-excited organic molecules and clusters: Deuterium labeled methyl-formate. *J. Nucl. Sci. Technol.* **43**(4), 441-445.
- Y. Tamenori, K. Okada, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma (2006) Formation of H_3O^+ by the soft X-ray ionization of ethanol clusters. *Chem. Phys. Lett.* **433**(1-3), 43-47.
- I. H. Suzuki, Y. Tamenori, Y. Morishita, K. Okada, T. Oyama, K. Yamamoto, K. Tabayashi, T. Ibuki, and K. Moribayashi (2006) Multi-charged Kr ions formed through photoionization of 2p electrons using a coincidence technique. *Rad. Phys. Chem.* **75**(11), 1778-1783.
- Y. Morishita, Y. Tamenori, K. Okada, T. Oyama, K. Yamamoto, K. Tabayashi, T. Ibuki, K. Moribayashi, and I.H. Suzuki (2006) Formation mechanisms of multi-charged Kr ions through 2p shell photoionization using a coincidence technique. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**(6), 1323-1335.
- O. Takahashi, S. Yamanouchi, K. Yamamoto, and K. Tabayashi (2005) Theoretical study of x-ray absorption spectra of small formic acid clusters. *Chem. Phys. Lett.*, **419**, 501-505.
- O. Takahashi, M. Odelius, D. Nordlund, H. Bluhm, A. Nilsson, and L. G. M. Pettersson (2006) Auger Decay Calculations with Core-hole Excited State Molecular Dynamics Simulations of Water. *J. Chem. Phys.*, **124**, 064307-9.
- O. Takahashi, K. Tabayashi, S. Wada, R. Sumii, K. Tanaka, M. Odelius, and L. G. M. Pettersson (2006) Theoretical Study of ion desorption from PMMA and PiPAc thin films through core-excitation. *J. Chem. Phys.*, **124**(12), 124901-8.
- R. I. Hiyoshi, Y. Kohno, O. Takahashi, J. Nakamura, Y. Yamaguchi, S. Matsumoto, N. Azuma, K. Ueda (2006) High pressure effect on vibrational structure of insensitive energetic material 5-Nitro-2,4-dihydro-1,2,4-triazole-3-one (NTO). *J. Phys. Chem. A*, **110**(32), 9816-9827.
- T. Schiros, S. Haq, H. Ogasawara, O. Takahashi, H. Ostrom, K. Andersson, L.G.M. Pettersson, A. Hodgson, and A. Nilsson (2006) Structure of water adsorbed on the open Cu(110) surface: H-up, H-down, or both ? *Chem. Phys. Letters*, **429**(4-6), 415-419.
- O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, K. Ueda, H. Suezawa, and M. Nishio (2006) Origin of the pi-facial stereoselectivity in the addition of nucleophilic reagents to chiral aliphatic ketones. *Chem. Asian J.*, **1**(6), 852-859.

○国際会議・国際学会

K. Yamasaki: Kinetic Approach to Photodissociation Dynamics. Symposium on Recent Topics in Molecular Structure and Dynamics (Apr. 2006, Kyoto, Japan) (招待講演)

K. Tabayashi: Inner-shell excitation spectroscopy and fragmentation dynamics of hydrogen-bonded clusters of carboxylic acid. The 11th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation

- (Mar., 2007, Higashi-Hiroshima, Japan) (招待講演)
- K. Tabayashi, T. Maruyama, K. Tanaka, H. Namatame, and M. Taniguchi: Coincidence measurements of core-excited molecules and clusters using TOF fragment-mass spectroscopy. The 9th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (May, 2006, Daegu, Korea) (ポスター)
- T. Maruyama, K. Yamamoto, C. Harada, K. Tabayashi, H. Yoshida, S. Wada, A. Hiraya, and K. Tanaka: Dissociative ionization dynamics of core-excited methyl trifluoro-acetate clusters at the oxygen K-edge. The 11th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation (Mar., 2007, Higashi-Hiroshima, Japan) (ポスター)
- R. Kawasaki, K. Yamamoto, T. Maruyama, H. Yoshida, and K. Tabayashi: Photoinduced dissociation processes of methyl acetate after core-excitation at the O K-edge region. The 11th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation (Mar., 2007, Higashi-Hiroshima, Japan) (ポスター)
- T. Yamanaka, K. Yamamoto, T. Maruyama, H. Yoshida, and K. Tabayashi: O1s core-excited states and fragmentation processes of nitromethane clusters. The 11th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation (Mar., 2007, Higashi-Hiroshima, Japan) (ポスター)
- O. Takahashi, K. Tabayashi, S. Wada, R. Sumii, K. Tanaka, M. Odelius, and L. G. M. Pettersson: Theoretical Study of ion desorption from PMMA and PiPAc thin films through core-excitation. 46th IUVSTA Workshop & 5th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics (May, 2006, Abashiri, Japan) (ポスター)
- O. Takahashi: Theoretical study of Auger decay calculations with core-hole excited state molecular dynamics simulations. The 66th Okazaki Conference, International Workshop on Soft X-ray Raman Spectroscopy and Related Phenomena, (Aug., 2006, Okazaki, Japan) (ポスター)

○国内学会

- 高橋 修: 内殻共鳴励起後のオージェ過程に対する理論計算。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (招待講演)
- 高橋 修: 内殻正孔動力学を考慮した共鳴オージェ過程の理論計算。原子分子の内殻励起および軟 X 線技術共同研究会 (2007 年 2 月, Spring-8) (依頼講演)
- 渡辺信嗣, 碓田真也, 山崎勝義: 振動励起酸素分子 $O_2(X^3\Sigma_g^-, \nu)$ の酸素分子による振動緩和過程。2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (一般講演)
- 碓田真也・渡辺信嗣・山崎勝義: 同一振電回転準位への励起を利用する光解離生成分子の初期振動状態分布決定。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 竹本真唯, 長岡伸一, 日野めぐみ, G. Prümper, 為則雄祐, J. Harries, 鈴木 功, 岡田和正, 田林清彦, L. Xjao-Jing, T. Lischke, 上田 潔: $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$ 気体のサイト選択的解離の内殻準位依存性。分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (一般講演)
- 竹本真唯, 長岡伸一, 日野めぐみ, G. Prümper, 為則雄祐, J. Harries, 鈴木 功, 岡田和正, 田林清彦, 鈴木 功, L. Xjao-Jing, T. Lischke, 上田 潔: Si:2p イオン化によって引き起こされる $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$ 気体のサイト選択的イオンペア生成。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (一般講演)
- 松山公大, 高橋 修, 山崎勝義: 水素化物(NH_3, H_2O, HF)の内殻共鳴励起後のオージェ崩壊過程。分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (一般講演)
- 渡辺信嗣, 藤井秀和, 波田野貴之, 碓田真也, 徳江郁雄, 山崎勝義: $O_2(X^3\Sigma_g^-, 8 \leq \nu \leq 14)$ から O_2 への振動エネルギー移動過程。第 22 回化学反応討論会 (2006 年 6 月, 岡崎) (ポスター)
- 伊勢田満広, 田村 孝, 下條竜夫, 本間健二, 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦: 軟 X 線励起ク

- ラスター内反応による H_3O^+ 生成過程の研究。第 22 回化学反応討論会 (2006 年 6 月, 岡崎) (ポスター)
- 丸山友絵, 原田知恵, 山本恵輔, 田林清彦, 吉田啓晃: 内殻励起 $\text{CF}_3\text{COOCH}_3$ 分子のサイト・状態選択的解離。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (ポスター)
- 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 平谷篤也, 国分美希, 伊勢田満広, 森田敦志, 下條竜夫, 本間健二: 分子一希ガスヘテロクラスターの内殻励起過程の研究に向けたピックアップ型分子線装置の製作。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 平谷篤也, 田村 孝, 伊勢田満広, 下條竜夫, 本間健二: 酸素 1s 内殻電子励起エタノールクラスターの多価イオン化解離過程の観測。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 岡田和正, 岩崎義巳, 河本 尚, 田林清彦, 鈴木 功, 下條竜夫, 為則雄祐, 大野啓一: パーフルオロシクロブタンの内殻励起・解離過程。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 山本恵輔, 丸山友絵, 田林清彦, 岡田和正, 為則雄祐, 鈴木 功, 伊勢田満広, 田村 孝, 下條竜夫, 本間健二: 酢酸クラスターの O1s 内殻励起と光誘起反応過程。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 山中剛志, 丸山友絵, 山本恵輔, 田林清彦, 吉田啓晃: ニトロメタンクラスターの内殻励起と光化学反応過程。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 丸山友絵, 山本恵輔, 田林清彦, 吉田啓晃, 和田眞一, 平谷篤也, 田中健一郎: $\text{CF}_3\text{CO}_2\text{CH}_3$ および $(\text{CF}_3\text{CO}_2\text{CH}_3)_n$ の O(1s) 内殻励起光化学。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 川崎梨絵, 山本恵輔, 丸山友絵, 田林清彦, 吉田啓晃: 酢酸メチルの内殻励起光化学過程。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 野村哲央, 高橋修, 山崎勝義, 樋高義昭: ギ酸の単分子熱分解反応における動力学的研究。第 22 回化学反応討論会 (2006 年 6 月, 岡崎) (ポスター)

○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

科学研究費補助金 基盤研究(B), 高振動励起分子のエネルギー緩和過程と反応過程の競争機構の解明, 研究代表者 山崎勝義

○その他の特記事項

山崎 勝義, 「Monograph シリーズ」広島大学学術情報リポジトリ第 1 回注目コンテンツ掲載 (http://ir.lib.hiroshima-u.ac.jp/portal/hot/contents_1.html)

有機典型元素化学研究グループ

スタッフ 山本 陽介（教授），河内 敦（助教授）

○研究活動の概要

昨年度採択された，日本学術振興会先端研究拠点事業（拠点形成型）「新規典型元素化合物の創製とその応用」のコーディネーターとして，8月26日から3日間にわたり，第2回シンポジウムを開催した。協力研究者は，海外26名，国内102名であったが，シンポジウムでは海外から24名，国内から9名の講演者を招待できた上，ポスター発表44件，参加者155名を数え，非常に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2人をそれぞれアラバマ大学 Arduengo 教授とアムステルダム自由大学 Lammertsma 教授の研究室に，また工学研究科の助手1名をアイオワ州立大学 Verkade 教授の研究室に3ヶ月程度派遣することができ，共同研究を大きく発展させることができた。

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有するケイ素化合物について，ケイ素原子上の置換基効果を調べた。ケイ素原子上にメトキシ基，ビニル基を有する化合物，またケイ素原子がシクロブタン環に組み込まれた系をそれぞれ合成し， ^{29}Si シフト値と結晶構造におけるケイ素-イリド炭素間距離との相関関係について考察をおこなった。(ii) ベンゼン環のオルト位にフルオロシリル基とジメシチルボリル基を有する化合物の合成をおこなった。ケイ素原子上にメチル基またはフェニル基を有する化合物を合成し，それらの，フッ化物イオンの取り込み能力の違いを ^{19}F NMR 測定により明らかにした。(iii) ベンゼン環のオルト位に(ヒドロキシ)シリル基とジメシチルボリル基とを有する化合物では，ヒドロキシ基がホウ素原子上を分子内求核攻撃することにより，メシチル基が脱離することを見出した。4配位ボレート中間体を単離・構造決定することにも成功した。

○発表原著論文

- T. Adachi, S. Matsukawa, M. Nakamoto, K. Kajiyama, S. Kojima, Y. Yamamoto, K.-y. Akiba, S. Re, and S. Nagase (2006) Experimental Determination of $n_{\text{N}} \rightarrow \sigma^*_{\text{P-O}}$ Interaction Energy of *O*-Equatorial C-Apical Phosphoranes Bearing a Primary Amino Group. *Inorg. Chem.*, **45**, 7269-7277
- A. Kawachi, T. Yoshioka, Y. Yamamoto (2006) Anionic 1,4-Silyl Migration in (2-Trimethylsilylphenyl)phosphonium Methylides. *Organometallics*, **25**, 2390-2393.
- M. Itagaki, K. Masumoto, K. Suenobu, and Y. Yamamoto (2006) Studies of Copper-bisoxazoline Catalyzed Asymmetric Cyclopropanation of 2,5-Dimethyl-2,4-hexadiene. *Organic Process Research and Development*, **10**, 245-250.
- M. Itagaki and Y. Yamamoto (2006) Application of A Chiral Copper-1,1-Bis{2-[(4S)-tert-butyloxazoliny]}cyclopropane Catalyst for Asymmetric Cyclopropanation of Styrene. *Tetrahedron Lett.* **47**, 523-525.

○総説

- 山本陽介 (2006) 5本の結合を持つ炭素化合物（身の回りの素朴な疑問）化学と教育, **54**, 216-219.

○国際会議・国際学会

Y. Yamamoto: Synthesis and structure of hypervalent pentacoordinated boron compounds. The 232nd ACS National Meeting, Symposium on "Polyfunctional Organoboranes: From Molecules to Materials" (Sep. 2006, San Francisco, U.S.A.) (招待講演)

Y. Yamamoto: Hypervalent Chemistry: From Bond Switching to Penta- and Hexacoordinate Carbon Compounds. JSPS Core-to-Core Program "Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application" Second Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry (Aug. 2006, Tokyo, Japan) (招待講演)

A. Kawachi: Synthesis of *o*-Disilylbenzenes and *o*-Borylsilylbenzenes via Silicon-functionalized *o*-Silylphenyllithiums. JSPS Core-to-Core Program "Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application" Second Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry (Aug. 2006, Tokyo, Japan) (ポスター)

○国内学会

山本陽介: 新規3座配位子系の合成とそれらの超原子価炭素およびホウ素化合物の合成への展開。2006年日本化学会西日本大会, ミニシンポジウム「有機合成化学の新たな飛躍を目指して」(2006年11月, 沖縄) (招待講演)

河内 敦: *o*-(フルオロシリル)フェニルリチウムの開発と多座Lewis酸合成への応用。21世紀COE「京都大学化学連携研究教育拠点」第三回有機元素化学セミナー(2006年10月, 京都) (招待講演)

山本陽介, 齊藤 大悟, 舩井 喬, 土肥千里, 佐藤仁美, 山田浩綱: 7員環を縮環したベンゼン系新規配位子の合成と典型元素および遷移金属化合物合成への応用。第33回有機典型元素化学討論会(2006年12月, 福岡) (一般講演)

山口虎彦: 超原子価6配位炭素化合物の合成と構造。第41回有機反応若手の会(2006年7月10日-12日, 呉) (一般講演)

沖本真広: 7-シラノルボルナジエン化合物の分解反応と新規ケイ素活性種の合成の試み。第41回有機反応若手の会(2006年7月10日-12日, 呉) (ポスター)

中辻惇也: カルボニル酸素原子を配位子とする超原子価5配位炭素・ホウ素化合物の合成。第41回有機反応若手の会(2006年7月10日-12日, 呉) (ポスター)

谷厚志(2-リチオフェニル)ハロシラン化合物の合成と反応。第41回有機反応若手の会(2006年7月10日-12日, 呉) (ポスター)

山田浩綱: 新規三座配位子を有する遷移金属化合物の合成と触媒反応の開発。第41回有機反応若手の会(2006年7月10日-12日, 呉) (ポスター)

姜新東: C₂F₅基を有する5配位リン*o*-equatorial化合物のジアステレオマーの合成と異性化。第41回有機反応若手の会(2006年7月10日-12日, 呉) (ポスター)

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およびアミン類との脱水素縮合反応。第53回有機金属化学討論会(2006年9月8日-9日, 大阪) (ポスター)

平野雄一: 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。第22回若手化学者のための化学道場(2006年9月21日-22日, 岡山) (ポスター)

鈴木直幸: スフェランドの新規合成法の開発。第22回若手化学者のための化学道場(2006年9月21日-22日, 岡山) (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18回基礎有機化学連合討論会(2006年10月7日-9日, 福岡) (一般講演)

姜新東, 松川史郎, 山道秀映, 山本陽介: C₂F₅アニオンのカニッツァーロ型反応による新規二座配位子の合成と5配位リン化合物合成への応用。第30回フッ素化学討論会 (2006年11月9日-10日) (ポスター)

河内敦, 谷厚志, 山本陽介: *o*- (ボリル) シリルベンゼンの合成およびフッ化物イオンとの反応。第11回ケイ素化学協会シンポジウム (2006年11月10-11日, 桐生) (ポスター発表)

河内敦, 財間政智, 山本陽介: *o*- (ボリル) ヒドロシリルベンゼンとアルコールおよびアミンとの脱水素縮合反応。第11回ケイ素化学協会シンポジウム (2006年11月10-11日, 桐生) (ポスター発表)

山田浩綱, 山本陽介: 新規三座配位子を有する遷移金属化合物の合成とその性質。2006年化学会西日本大会 (2006年11月18日-19日, 沖縄) (ポスター)

田中俊広, 山本陽介: 超原子価 4 配位酸素化合物 (10-0-4) の合成の試み。2006 年化学会西日本大会 (2006 年 11 月 18 日-19 日, 沖縄) (ポスター)

平田祐介, 小玉めぐみ, 山本陽介: ポルフィリンの酸化体の合成と構造。第 32 回反応と合成の進歩シンポジウム (2006 年 12 月 4 日-5 日, 広島) (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 配位炭素化合物の構造に対する置換基効果の検討。第 33 回有機典型元素化学討論会 (2006 年 12 月 7 日-9 日, 福岡) (ポスター)

姜新東, 角田憲一郎, 松川史郎, 山道秀映, 山本陽介: C₂F₅ 基を有するジアステレオメリック 5 配位リン化合物の合成と異性化。第 33 回有機典型元素化学討論会 (2006 年 12 月 7 日-9 日, 福岡) (ポスター)

中辻惇也, 山本陽介: カルボニル酸素を配位子とする超原子価 5 配位ホウ素化合物の合成。第 33 回有機典型元素化学討論会 (2006 年 12 月 7 日-9 日, 福岡) (ポスター)

中辻惇也, 山本陽介: カルボニル酸素を配位子とする超原子価 5 配位ホウ素化合物の合成。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月 16 日-17 日, 東広島) (一般講演)

中辻惇也, 山本陽介: カルボニル酸素を配位子とする超原子価 5 配位ホウ素化合物の合成。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

鈴木直幸, 柏葉 崇, 山本陽介: スフェランドの新規合成法の開発。(2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

平野雄一, 伊藤 純, 才木祐司, 田治秀基, 山本陽介: ピリミジン配位子とする結合エネルギー評価系の構築。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

田中俊広, 雲林院敏文, 山本陽介: 超原子価 4 配位酸素化合物 (10-0-4) 合成の試み。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

山口虎彦, 山本陽介: フェノキシ基を有する超原子価 6 配位炭素化合物の合成と構造。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

山道秀映, 松川史郎, 山本陽介: アピカルー エクアトリアルー エクアトリアル型新規三座配位子の合成と 5 配位 1 5 族元素化合物の構築。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

姜新東, 松川史郎, 山道秀映, 山本陽介: 2 つの C₂F₅ 基を有する新規二座配位子を持つ超原子価アンチモン化合物の合成。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

河内敦, 谷厚志, 山本陽介: *o*-(フルオロジフェニルシリル)フェニルリチウムの合成と反応。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

河内敦, 寺西拓也, 山本陽介: *o*-シリルフェニルリチウム類の酸化的カップリングによる 2,2'-ジシリルビフェニルの合成。第 87 日本化学会春季年会 (2007 年 3 月 25 日- 28 日, 大阪) (一般講演)

河内敦, 財間政智, 谷厚志, 山本陽介: *o*-ボリル(ヒドロキシシリル)ベンゼンの分子内ホウ素-炭素結合切断反応。第87日本化学会春季年会 (2007年3月25日- 28日, 大阪) (一般講演)

○国際共同研究・国際会議開催実績

・国際共同研究

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)

・国際会議開催

山本陽介, 河内敦: 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」第 2 回国際シンポジウム (2006 年 8 月 26-28 日, 東京)

○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)「元素相乗系」, 「配位空間制御に基づく相乗系超原子価元素化合物の創製」, 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

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

科学研究費補助金特定領域研究(B)「炭素震源の高度分子変換」, 「ジメタラベンゼンを反応剤とする含典型元素パイ電子系炭素分子の効率的合成」, 代表者 河内敦

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化」, 代表者 河内敦

○その他特記事項

山本陽介, 広島大学薬品管理システム専門委員会委員長 (2006 年 4 月-)

山本陽介, 理学部化学科学科長 (2006 年 4 月-2007 年 3 月)

反応有機化学研究グループ

スタッフ (故) 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、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を実現した。また、光学活性なピペラジンの合成法を確立し、その誘導体を触媒とするMichael反応において、非常に高いエナンチオ選択性を達成した。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。Z-選択的Peterson反応の開発研究において、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、さらにZ-オレフィンの新規な合成法を見出した。

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、不斉Brønsted酸を用いた不斉反応への拡張を行った。また、タンデムMichael反応を用いたビスクロ化合物の効率的合成法を見出しているが、これについてもシンコナルカロイドを用いて不斉反応への拡張を行った。

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が、Scyphostatinに関しては全合成を達成した。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的メタセシスと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、牡蠣などの二枚貝に対して特異的な毒性を示す赤潮プランクトン中の生理活性物質の探索と構造解析や赤潮防御法などの地域社会の特徴を活かした研究を行なっている。最近、赤潮プランクトンから牡蠣に対する2種の致死活性物質を単離精製し、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, K. Kajiyama, M. Nakamoto, and S. Matsukawa, K.-y. Akiba (2006) The ligand-exchange process of P-H-apical phosphoranes and the thermal formation and pseudorotation of anti-apicophilic spiroposphoranes. *European Journal of Organic Chemistry* 218-234.

K. Kashiwagi, R. Sugise, T. Shimakawa, T. Matuura, and M. Shirai (2006) Linear relationship between activity of a new Ru-catalyst and acidity of substituted benzoic acids in the dimerization of acrylonitrile. *Chem. Lett.* **35**, 186-187.

C. Lin, Y. Hiraga, K. Masaki, H. Iefuji, and K. Ohkata (2006) Comparison of the chiral recognition of prochiral substrates in the acetylation reaction by a novel lipase (CSL) from the yeast, *Cryptococcus* spp. S-2 with immobilized PPL enzyme-catalyzed desymmetrization and asymmetrization of prochiral 2-substituted 1,3-propanediols by CSL and immobilized PPL. *Journal of Molecular Catalysis B-Enzymatic* **38**, 1-10.

- S. Kojima, K. Fujitomo, Y. Itoh, K. Hiroike, and K. Ohkata (2006) The effect of substituents on the pyridine ring in the diastereoselective cyclopropanation reaction of pyridinium ylides bearing an 8-phenylmenthyl ester group. *Heterocycles* **67**, 679-694.
- C. Lin, Y. Hiraga, and K. Ohkata (2006) Two-parameter analysis of solvent effects on selectivity in chemical reactions: Information of polarity and activation volume at the transition state in organic and enzymatic reactions. *Chemistry Letters* **35** 208-209.
- M. Shobayashi, N. Mukai, K. Iwashita, Y. Hiraga, and H. Iefuji (2006) A new method for isolation of S-adenosylmethionine (SAM)-accumulating yeast. *Applied Microbiology and Biotechnology* **69**, 704-710.
- K. Kajiyama, M. Yoshimune, S. Kojima, and K.-y. Akiba (2006) A new method for the formation of anti-apicophilic (O-cis) spirophosphoranes - Kinetic studies on the stereomutation of O-cis arylspirophosphoranes to their O-trans isomers. *European Journal of Organic Chemistry* 2739-2746.
- T. Adachi, S. Matsukawa, M. Nakamoto, K. Kajiyama, S. Kojima, Y. Yamamoto, K.-y. Akiba, S. Re, and S. Nagase (2006) Experimental determination of $n_n \rightarrow \sigma_{p-o}^*$ interaction energy of *o*-equatorial *c*-apical phosphoranes bearing a primary amino group. *Inorganic Chemistry* **45**, 7269-7277.
- C. Lin, Y. Hiraga, K. Masaki, H. Iefuji, and K. Ohkata (2006) Temperature-dependence of enantioselectivity and desymmetrization in the acetylation of 2-mono- and 2,2-di-substituted 1,3-propanediols by a novel lipase isolated from the yeast *Cryptococcus* spp. S-2. *Biocatalysis and Biotransformation* **24**, 390-395.
- S. Kojima, M. Suzuki, A. Watanabe, and K. Ohkata (2006) Asymmetric synthesis of activated cyclopropanes catalyzed by cinchonidine as a chiral Brønsted base. *Tetrahedron Letters* **47**, 9061-9065.

○国際会議・国際学会

- K. Tanabe, A. Fujie, N. Ohmori, S. Kojima, and K. Ohkata: Studies towards the synthesis of the polycyclic natural product 'daphnezomine c' using ring-closing metathesis. 25th International Symposium on Chemistry of Natural Products (July, 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- K. Yamahira, T. Shikano, A. Toryu, D. Omoda, K. Matsuo, Y. Hiraga, and K. Ohkata: Structure elucidation of heterocapsatoxin a and b, two toxic compounds oyster, from the marine dinoflagellate *heterocapsa circularisquama*. 25th International Symposium on Chemistry of Natural Products (July, 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- R. Takagi, K. Tojo, W. Miyanaga, S. Tsuyumine, and K. Ohkata: Synthetic study of scyphostatin. 25th International Symposium on Chemistry of Natural Products (July, 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- S. Kojima, M. Suzuki, A. Watanabe, and K. Ohkata: Asymmetric cyclopropanation with cinchona alkaloid derivatives functioning as Brønsted base catalysts. 2nd International Symposium of Core-to-Core Program on Main Group Chemistry (Aug., 2006, Tokyo, Japan) (ポスター)

○国内学会

- 井上祐太：連続 Michael 反応によるビシクロ[3.3.1]ノネン骨格の構築とその立体選択性に関する研究。第 21 回若手化学者のための化学道場（2006 年 9 月，総社）（ポスター）
- 中川玲，村井豊，小島聡志，大方勝男：Peterson 反応における中間体モデルとしての E1cb 反応機構の検討。第 18 回基礎有機化学連合討論会（2006 年 10 月，福岡）（ポスター）
- 鈴木麻希，渡邊亜希人，小島聡志，大方勝男：キニンおよびシンコニジン誘導体を不斉ブレンステッド塩基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。第 36 回複素環化

学討論会（2006 年 10 月，長崎）（一般講演）

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 C_2 対称ピペラジンの合成。第 36 回複素環化学討論会（2006 年 10 月，長崎）（ポスター）

岩本明久，八谷恵美，田中聖子，渡辺恒夫，小島聡志，大方勝男：Phomoidride 類の合成に向けた[4+3]付加環化反応の検討。第 36 回複素環化学討論会（2006 年 10 月，長崎）（ポスター）

梅田康弘，茶林敬司，小島聡志，大方勝男： C_2 対称キラルピペラジンをを用いた不斉 Michael 反応への応用。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2006 年 12 月，東広島）（一般講演）

近藤あさ子，田村由紀子，高木隆吉，大方勝男：Diels-Alder 反応のブレンステッド酸による加速効果に関する研究。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2006 年 12 月，東広島）（一般講演）

榊原裕，平賀良知，小島聡志：カロテノイドの異性化における溶媒効果。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2006 年 12 月，東広島）（一般講演）

梅田康弘，小島聡志：環状キラルアミンを触媒とした不斉 Michael 反応。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

田中賢治，高木隆吉，大方勝男：連続的な閉環メタセシスと渡環 Diels-Alder 反応による三環式骨格の構築。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

藤井絵美，高木隆吉，大方勝男：シンコナルカロイドを不斉有機触媒とした環状ケトンの不斉 Michael 反応に関する研究。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

井上祐太，高木隆吉，大方勝男：連続的 Michael 反応を鍵反応とした Plukenetione A のアダマンチル骨格部分の合成研究。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

榊原裕，平賀良知，小島聡志：カロテノイドの異性化における溶媒効果。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

迫平洋輔，小島聡志：新規キラルリン化合物の合成と構造。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

Triana Widiarti，岩本明久，平賀良知，小島聡志：ピロリジ-2-イルメチルホスホン酸の合成と応用。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

鳥龍明子，山平和也，鹿野達也，松尾和彦，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 Heterocapsatixin A の部分構造解析。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

中川玲，村井豊，小島聡志：Peterson 試薬とアルデヒドとのアルドール付加物からの高選択的 syn 脱離反応。日本化学会第 87 回春季年会（2007 年 3 月，吹田）（一般講演）

○産学官連携実績

大方勝男，カネカテクノロジー受託研究「天然化合物の精密構造解析に関する研究」

平賀良知，カネカテクノロジー受託研究「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

小島聡志，独立行政法人酒類総合研究所

平賀良知，独立行政法人酒類総合研究所

小島聡志，アサヒビール株式会社事業開発研究所

平賀良知，アサヒビール株式会社事業開発研究所

○共同プロジェクトへの参加状況（国内）

小島聡志，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」

○国際共同研究実績

大方勝男, L. A. Paquette 教授 (米国 Ohio State University)

小島聡志, L. A. Paquette 教授 (米国 Ohio State University)

平賀良知, S. Niwayama 教授 (米国 Texas Tech University)

高木隆吉, L. A. Paquette 教授 (米国 Ohio State University)

○研究助成の受け入れ状況

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 平賀良知 (2006 年度)

大塚化学 (株) 「生理活性化合物の有機合成の研究」代表 小島聡志 (2006 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 小島聡志 (2006 年度)

○その他特記事項

大方勝男, 広島大学環境安全センター運営委員会委員 (2004.4～2006.4)

大方勝男, 広島大学入学センター会議委員 (2004.4～2006.3)

小島聡志, 広島大学留学生センター運営委員会委員 (2004.4～)

小島聡志, 広島大学作業環境測定専門委員会委員 (2004.4～)

平賀良知, 広島県産業科学技術研究所, 研究協力員 (1998.4～)

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である。2006 年度の研究成果を以下に列挙する。

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、分子集合体で働く引力を考える上で、基本的な分子間相互作用である。アルコールや水などの液体状態においては、分子間に働く水素結合によって幅広い OH 伸縮バンドが観測される。本研究グループでは、このバンドを解析する試みの一つとして、水素結合パターンと波数値の線形関係を見出した。本年度は、特にアルコールの水素結合バンドを、マトリックス単離赤外スペクトル、四塩化炭素希薄溶液の赤外スペクトル、および量子化学計算によって詳細に調べた。この結果、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が明らかとなった。

②電子線衝撃法による内殻励起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。励起源として数百 eV の電子線を用い、2-, 3-, および 4-ピコリ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、窒素内殻イオン化の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。この結果は、前年度に提唱した 2-アミノ-3-メチルピリジンの解離機構を支持するものである。

③シクロブタン環の内殻励起と解離

本研究グループでは、主に解離片の運動エネルギーに着目して内殻励起分子の解離ダイナミクスを考察してきた。また、放射光の偏光を利用し解離生成イオンの角度分布を観測すれば、内殻励起状態の対称性に関する情報を得ることができる。今年度はパーフルオロシクロブタンの炭素内殻領域における解離について実験を行った。その結果、従来 C 1s → $\sigma^*(CC)$ 遷移と帰属されていた 291.3 eV の第一共鳴ピークは、C 1s → $\sigma^*(CF)$ 遷移と帰属すべきであるとの結論を得た。運動エネルギー分布も $\sigma^*(CF)$ への遷移と $\sigma^*(CC)$ への遷移で異なることが分かった。

④重水素ラベルによる 2-butoxyethanol の水和挙動の研究

2-butoxyethanol (C_4E_1) のブトキシ基を選択的に孤立重水素化し、その振動バンド (ν_{CD}) を解析することにより、 C_4E_1 の水溶液中における水和状態やコンホメーションを詳細に調べる方法確立した。 ν_{CD} バンドは水和によって高波数側にシフトし、そのシフト量は隣接する酸素原子が形成する水素結合の数に依存する。また、 ν_{CD} バンドはコンホメーションの違いによって複数現れ、それらの相対強度からアルキル基のコンホメーション変化を調べる事ができることがわかった。

⑤水溶性高分子の立体規則性と溶解性の相関

Poly(*N*-isopropylacrylamide) (PNiPA) の立体特異性重合を試み、得られた高分子の物性が立体規則性によってどのように変化するかを調べた。この結果、PNiPA の溶液中における転移挙動は立体規則性に大きく依存し、特にアタクチックポリマーでは良溶解であった有機溶媒に対してもイソタクチックポリマーでは不溶となることが明らかになった。またイソタクチックリッチな PNiPA では有機溶媒中であらたに UCST 型の相図を示すものも見つかった。また、PNiPA の赤外スペクトル測定から、局所構造の変化が高分子の溶液物性に影響を及ぼす可能性を示唆した。

⑥DNA 塩基モデル化合物の溶液中における keto-enol 互変異性

核酸塩基の keto-enol 互変異性を調べるためのモデル化合物として 2-pyridone (2PY) を用い、赤外分光法および量子化学計算から、溶媒など外部環境が互変異性反応に及ぼす影響を調べた。その結果、誘電率の非常に低い溶媒中においても、その誘電率による keto 型の安定化が顕著に見られることを明らかにした。

○発表原著論文

- K. Ohno, H. Takao, and Y. Katsumoto (2006) Geometrical behavior of hydrogen bonding patterns in the α -dodecyl- ω -hydroxy-tris(oxyethylene)-water system monitored by near infrared spectroscopy. *Spectrochim. Acta*, **63A**, 690–693.
- T. Itoh, N. Akai, and K. Ohno (2006) Infrared spectra of *p*-, *m*- and *o*-fluorobenzaldehyde in low temperature argon matrix. *J. Mol. Struct.*, **786**, 39–45.
- I. Kanesaka, H. Nagami, K. Kobayashi, and K. Ohno (2006) Infrared intensity study on molecular interactions in quinuclidine. *Bul. Chem. Soc. Jpn.*, **79**, 406–412.
- K. Taga, K. Kawasaki, Y. Yamamoto, T. Yoshida, K. Ohno, and H. Matsuura (2006) Raman spectra and conformational analyses for a series of diethyl ether and its organosilicon derivatives, $\text{CH}_3\text{MH}_2\text{OM}'\text{H}_2\text{CH}_3$ (M, M' = C and Si), by density functional theory. *J. Mol. Struct.*, **788**, 159–175.
- S. Shin, A. Kurawaki, Y. Hamada, K. Shinya, K. Ohno, A. Tohara, and M. Sato (2006) Conformational behavior of *N*-methylformamide in the gas, matrix, and solution states as revealed by IR and NMR spectroscopic measurements and by theoretical calculations. *J. Mol. Struct.*, **791**, 30–40.
- N. Akai, T. Harada, K. Shin-ya, K. Ohno, and M. Aida (2006) Photoinduced amino-imino tautomerism: An infrared study of 2-amino-5-methylpyridine in a low-temperature argon matrix. *J. Phys. Chem. A*, **110**, 6016–6022.
- Y. Katsumoto, H. Komatsu, and K. Ohno (2006) Origin of the blue shift of the CH stretching band for 2-butoxyethanol in water. *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 9278–9279.
- K. Ohno, T. Itoh, C. Yokota, and Y. Katsumoto (2006) Matrix-isolation infrared spectra of 2-, 3- and 4-pyridinecarboxaldehyde before and after UV irradiation. *J. Mol. Struct.*, **825**, 143–150.
- Y. Fujiwara, Y. Katsumoto, Y. Ohishi, M. Koyama, K. Ohno, M. Akita, K. Inoue, and Y. Tanimoto (2006) Polymerization of *N*-isopropylacrylamide under magnetic levitation. *J. Phys.: Conference Series*, **51**, 458–461.
- A. Padermshoke, Y. Katsumoto, and M. Aida (2006) Dimerization and double proton transfer-induced tautomerism of 4(3H)-pyrimidinone in solution studied by IR spectroscopy and quantum chemical calculations. *J. Phys. Chem. B*, **110**, 26388–26395.
- Y. Morishita, Y. Tamenori, K. Okada, T. Oyama, K. Yamamoto, K. Tabayashi, T. Ibuki, K. Moribayashi, and I. H. Suzuki (2006) Formation mechanisms of multi-charged Kr ions through 2p shell photoionization using a coincidence technique. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **39**(6), 1323–1335.
- M. Kato, Y. Morishita, F. Koike, S. Fritzsche, H. Yamaoka, Y. Tamenori, K. Okada, T. Matsudo, T. Gejo, I. H. Suzuki, and N. Saito (2006) High-resolution absolute photoabsorption cross sections for Ne in the 1s2s and 1s2p resonant double excitation. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **39**(8), 2059–2069.
- T. Ibuki, Y. Tamenori, K. Okada, M. Takemoto, S. Nagaoka, Y. Morishita, and I. H. Suzuki (2006) On the ionization energy of CF_3SF_5 in the valence region measured by angle-resolved photoelectron spectroscopy. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.*, **152**(1-2), 96–99.
- I. H. Suzuki, Y. Tamenori, Y. Morishita, K. Okada, T. Oyama, K. Yamamoto, K. Tabayashi, T. Ibuki, and K. Moribayashi (2006) Formation of multi-charged Kr ions through photoionization of 2p electrons

studied with a coincidence technique. *Radiat. Phys. Chem.*, **75**(11), 1778–1783.

Y. Tamenori, K. Okada, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma (2006) Formation of H_3O^+ by the soft X-ray ionization of ethanol clusters. *Chem. Phys. Lett.*, **433**(1-3), 43–47.

○国際会議・国際学会

M. Kato, Y. Morishita, 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 region of inner-shell ionization. The 9th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (May-June, 2006, Deagu, Korea) (ポスター)

M. Kato, Y. Morishita, M. Oura, H. Yamaoka, Y. Tamenori, K. Okada, T. Matsudo, T. Gejo, I. H. Suzuki, and N. Saito: Absolute intensity of soft X-ray measured with an ion chamber and a cryogenic radiometer. The 9th International Conference on Synchrotron Radiation Instrumentation (May-June, 2006, Deagu, Korea) (ポスター)

○国内学会

岡田和正：比較的大きな気体分子の内殻励起と解離ダイナミクス。次世代を担う若手研究者共同研究ネットワークの構築－分子研共同利用装置・大型計算機を軸とした分野横断型研究の新展開－（2007年1月，岡崎）（依頼講演）

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 CF_3SF_5 の超高速解離ダイナミクス－ドップラー・シフト－。第22回化学反応討論会（2006年5月，岡崎）（一般講演）

小松裕之，勝本之晶，大野啓一：赤外分光法による 2-Butoxyethanol の水溶液中における水和状態とコンホメーションの研究。分子構造討論会 2006（2006年9月，静岡）（一般講演）

長谷川傑，勝本之晶，赤井伸行，相田美砂子，大野啓一：2-pyridone とその誘導体の溶液中における会合状態および互変異性。分子構造討論会 2006（2006年9月，静岡）（一般講演）

小松裕之，勝本之晶，大野啓一：2-Butoxyethanol の水溶液中における水和状態とコンホメーション変化。2006年日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

勝本之晶，小山美沙緒，大野啓一：立体制御された poly(*N*-isopropylacrylamide)の溶液中における局所構造と転移挙動。日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

長谷川傑，勝本之晶，赤井伸行，相田美砂子，大野啓一：赤外分光法による 2-pyridone とその誘導体の溶液中における会合状態および互変異性化。2006年日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

下赤卓史，勝本之晶，大野啓一：メタノールの水素結合様式と CO 伸縮バンドの相関。2006年日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

光岡広樹，勝本之晶，大野啓一：Matrix 単離赤外分光法による 2-pyridone 及びその誘導体の研究。2006年日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

衛藤由希，勝本之晶，大野啓一：立体規則性を有する poly(*N,N*-diethylacrylamide)の相分離挙動。2006年日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

岡田和正，堺 真通，岩崎義己，河本 尚，大野啓一：単環化合物の内殻励起と解離－シクロブタン環とピリジン環の反応。2006年日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

堺 真通，岡田和正，大野啓一，伊吹紀男：内殻励起で誘起される置換ピリジン化合物の解離。2006年日本化学会西日本大会（2006年11月，沖縄）（一般講演）

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 の水和挙動およびコンホメーション変化。第3回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2006

- 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 小山美沙緒, 勝本之晶, 大野啓一: 立体制御された poly(*N*-isopropylacrylamide) の溶液中における局所構造と相分離。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 竹本真唯, 長岡伸一, 日野めぐみ, Georg Prümper, 為則雄祐, James Harries, 鈴木 功, 岡田和正, 田林清彦, Xiao-Jing Liu, Toralf 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イオンペア生成。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (一般講演)
- 光岡広樹, 長谷川傑, 勝本之晶, 相田美砂子, 大野啓一: Matrix 単離赤外分光法を用いた 2-pyridone 及びその誘導体の互変異性化に関する研究。日本化学会第 87 春季年会 (2007 年 3 月, 吹田) (一般講演)
- 下赤卓史, 勝本之晶, 大野啓一: メタノールの水素結合による分子間相互作用と CH 伸縮バンドの波数シフトの関連。日本化学会第 87 春季年会 (2007 年 3 月, 吹田) (一般講演)
- 小山美沙緒, 奥村雄也, 平野朋広, 勝本之晶: 赤外分光法による立体制御された poly(*N*-isopropylacrylamide) の溶液中における局所構造の研究。第 55 回高分子学会年次大会 (2006 年 5 月, 名古屋) (ポスター)
- 佐藤仁美, 勝本之晶, 大野啓一: 四塩化炭素溶液中におけるビニルエーテル系高分子と水分子の会合挙動。第 55 回高分子学会年次大会 (2006 年 5 月, 名古屋) (ポスター)
- 堺 真通, 岡田和正, 大野啓一, 伊吹紀男: 電子衝撃法による分子の内殻励起・反応装置の開発。第 22 回化学反応討論会 (2006 年 5 月, 岡崎) (ポスター)
- 伊勢田満弘, 田村 孝, 下條竜夫, 本間健二, 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦: 軟 X 線励起クラスター内反応による H_3O^+ 生成過程の研究。第 22 回化学反応討論会 (2006 年 5 月, 岡崎) (ポスター)
- 堺 真通, 岡田和正, 大野啓一, 伊吹紀男: 置換ピリジン化合物の内殻励起と選択的解離。分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)
- 竹本真唯, 長岡伸一, 日野めぐみ, Georg Prümper, 為則雄祐, James Harries, 鈴木 功, 岡田和正, 田林清彦, Xiao-Jing Liu, Toralf Lischke, 上田 潔: $\text{F}_3\text{SiCH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ 気体のサイト選択的解離の内殻準位依存性。分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)
- 小山美沙緒, 奥村雄也, 平野朋広, 田中丈幸, 勝本之晶: 立体制御された poly(*N*-isopropylacrylamide) の溶液中における局所構造。第 55 高分子討論会 (2006 年 9 月, 富山) (ポスター)
- 勝本之晶, 大野啓一: 赤外分光法と量子化学計算によるビニルエーテル系高分子と水の会合挙動の研究。第 55 高分子討論会 (2006 年 9 月, 富山) (ポスター)
- 岩崎義己, 岡田和正, 田林清彦, 鈴木 功, 下條竜夫, 為則雄祐, 大野啓一: パーフルオロシクロブタンとパーフルオロブタンの軟 X 線励起・解離。2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (ポスター)
- 加藤昌弘, 森下雄一郎, 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: Ar, Xe, N_2 における内殻励起共鳴状態の自然幅と内殻イオン化しきい値の高精度決定。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 平谷篤也, 田村 孝, 伊勢田満広, 下條竜夫, 本間健二: 酸素 1s 内殻電子励起エタノールクラスターの多価イオン化解離過程の観測。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2007 年 1 月, 広島) (ポスター)
- 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 平谷篤也, 国分美希, 伊勢田満広, 森田敦志, 下條竜夫, 本間健二: 分子-希ガスヘテロクラスターの内殻励起過程の研究に向けたピックアップ型分子

線装置の製作。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2007 年 1 月，広島）（ポスター）

山本恵輔，丸山友絵，田林清彦，岡田和正，為則雄祐，鈴木 功，伊勢田満広，田村 孝，下條竜夫，本間健二：酢酸クラスターの O1s 内殻励起と光誘起反応過程。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2007 年 1 月，広島）（ポスター）

岡田和正，岩崎義己，河本 尚，田林清彦，鈴木 功，下條竜夫，為則雄祐，大野啓一：パーフルオロシクロブタンの内殻励起・解離過程。第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2007 年 1 月，広島）（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(A)，「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，分担 大野啓一，岡田和正，勝本之晶

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

池谷科学技術振興財団研究助成，「量子化学的分子デザインによる生体親和性高分子材料の親水性制御」代表 勝本之晶

○その他特記事項

学生の表彰

小松裕之， 広島大学学長賞

小松裕之， 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム学生賞

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。

今年度の主な成果を次にまとめる。

①水クラスターの水素結合パターン安定性

溶媒としての水は、ある温度において非常にゆるやかな集積体を構成している。MC 法と水素結合パターンの概念を併用することによって、水 8 量体の自由エネルギーやエントロピーを求めた。構造最適化およびその構造での基準振動解析という物理化学のこれまでの常套的手法によって求めた結果とは、大きく異なる描像を得た。

②DNA 塩基の活性酸素による酸素付加体

突然変異を引き起こす修飾塩基としてよく知られている 8-オキソグアニンは、それがどのようなメカニズムで突然変異をひき起こすのか、これまで数多くの研究がなされているにもかかわらず、よくわかっていなかった。そこで、非常に高いレベルの非経験的分子軌道法計算を適用することによって、この互変異性体の相対的安定性が、グアニンとは大きく異なり、このことが突然変異能の一つの原因であることを明らかにした。また、8-オキソグアニンが形成されることによって、DNA の糖部分やリン酸部分の安定構造が変化し、これが DNA の高次構造の変化をもたらす可能性があることを見出した。

③表面和周波分光法の測定手法開発と応用

電子振動二重共鳴和周波分光は、界面種の振動および電子状態を選択的に測定できる手法である。二重共鳴和周波分光を有効に利用するには、赤外プローブおよび紫外／可視プローブの波長をなるべく自由に選択できる必要がある。紫外／可視プローブに関して、昨年度の 235-390 nm の紫外域で拡張作業につづき、今年度は可視域での拡張作業を進めた。その結果、235-390, 400, 420-790 nm という紫外から可視のほぼ全域を波長可変範囲とすることができた。

二重共鳴和周波分光の有用性を検討するモデル系として、典型的な色素分子であるフルオレセイン誘導体(FITC)をプラチナ基板上に固定した単分子膜を取り上げた。キサンテン環の骨格振動に基づく 2 つの振動バンド ($\sim 1640\text{ cm}^{-1}$, $\sim 1610\text{ cm}^{-1}$) に関して、SFG 振動バンドの振幅を SFG 信号波長に対してプロットした二重共鳴 SFG 励起スペクトルを測定した。励起スペクトルから FITC が基板上で二種類の異なる電荷状態をとっていると結論した。

○発表原著論文

N. Akai, T. Harada, K. Shin-ya, K. Ohno and M. Aida (2006) Photoinduced amino-imino tautomerism: An infrared study of 2-amino-5-methylpyridine in a low-temperature argon matrix. *Journal of Physical Chemistry A*, **110**, 6016–6022.

A. Padermshoke, Y. Katsumoto and M. Aida (2006) Dimerization and Double Proton Transfer-Induced Tautomerism of 4(3H)-Pyrimidinone in Solution Studied by IR Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations. *Journal of Physical Chemistry B*, **110**, 26388–26395.

T. Miyake and M. Aida (2006) H-bond patterns and structure distributions of water octamer (H_2O)₈ at finite temperatures. *Chemical Physics Letters*, **427**, 215–220.

T. Yoshida and M. Aida (2006) Population of 6-Enol Form is Higher in 8-Oxoguanine than in Guanine.

- Chemistry Letters*, **35**(8), 924–925.
- M. Tanaka and M. Aida (2006) Ab initio MO and quasi-classical direct ab initio MD studies on the nitrogen inversion of trimethylamine. *Chemical Physics Letters*, **417**, 316–319.
- S. A. Wahab, T. Harada, T. Matsubara and M. Aida (2006) Quantum Chemical Study of the Interaction of the Short-Chain Poly(oxyethylene)s $\text{CH}_3(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_m\text{OCH}_3$ ($\text{C}_1\text{E}_m\text{C}_1$; $m=1$ and 2) with a Water Molecule in the Gas Phase and the Solutions. *Journal of Physical Chemistry A*, **110** (3), 1052–1059.
- T. Matsubara, M. Ishikura and M. Aida (2006) A Quantum Chemical Study of the Catalysis for Cytidine Deaminase: Contribution of the extra water molecule. *Journal of Chemical Information and Modeling*, **46**(3), 1276–1285.
- S. Fujiyoshi, T. Ishibashi, H. Onishi (2006) Molecular Vibrations at A Liquid-Liquid Interface Observed by Fourth-Order Raman Spectroscopy. *Journal of Physical Chemistry B*, **110**, 9571–9578.
- K. Takeshita, A. Yamakata, T. Ishibashi, H. Onishi, K. Nishijima, T. Ohno (2006) Transient IR Absorption Study of Charge Carriers Photogenerated in Sulfur-doped TiO_2 . *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **177**, 269–275.

○国際会議・国際学会

- M. Aida: Quasi-Classical Direct ab initio MD Studies on Large Molecules, XIIth International Congress of Quantum Chemistry Satellite Symposium ‘Large Molecular Systems’ (May 2006, Okazaki, Japan) (招待講演)
- T. Ishibashi: Doubly resonant SFG spectroscopy of organic films with widely wavelength-tunable visible probe, ACS the 232nd ACS National Meeting (Sep. 2006, San Francisco, USA) (招待講演)
- T. Ishibashi: Vibrationally-electronically doubly resonant sum-frequency generation spectroscopy with widely tunable VIS/UV probe, International Conference on Raman Spectroscopy 2006 (ICORS2006) (Aug. 2006, Yokohama, Japan) (招待講演)
- A. Padermshoke, Y. Katsumoto and M. Aida: Tautomerism and Structure of 4(3H)-Pyrimidinone Studied by IR Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations, 2nd International Symposium on Biomolecules and Related Compounds (2nd ISB) (Nov. 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- M. Tanaka and M. Aida: Ab initio MO study on the nitrogen inversion of trimethylamine and quasi-classical direct ab initio MD, XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- T. Miyake and M. Aida: Temperature dependent structure of water cutamer: XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- T. Yoshida, H. Doi, M. Aida: H. Kono, S. Kumar, M. M. Gromiha, A. Sarai: Free Energy Landscape for Interactions between DNA bases and Protein Side Chains, EABS & BSJ 2006 Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (Nov. 2006, Okinawa, Japan) (ポスター)
- M. Jieli, T. Miyake and M. Aida: Theoretical study on protonated water cluster $(\text{H}_3\text{O})^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ with graph representation, XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (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 in Aqueous Solution, XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- K. Sakamune and M. Aida: Conformational Isomerization of Ethylene Glycol by Direct ab initio MD Calculation, XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (ポ

スター)

- T. Yamada, M. Aida: Fundamental frequencies of triatomic molecules by quasi-classical direct ab initio MD, XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- T. Yamada, M. Aida: Raman and IR Intensities from Quasi-Classical Direct Ab Initio MD, 20th International Conference on Raman Spectroscopy 2006 (Aug. 2006, Yokohama, Japan) (ポスター)
- D. Zhao, S. Iwata and M. Aida: An ab initio MO and Monte Carlo study on the hydration of uracil, XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- D. Zhao, S. Iwata and M. Aida: Ab initio MO and QM/MM studies on hydration of nucleic acid bases. Sanibel Symposium (Feb. 2007, Georgia, USA) (ポスター)
- T. Matsubara and M. Aida: Application of the QM/MM Molecular Dynamics Method to the Enzymatic Deamination of Cytidine, 232nd American Chemical Society (ACS) National Meeting (Sep. 2006, San Francisco, USA) (ポスター)
- T. Matsubara and M. Aida: Development of the QM/MM Molecular Dynamics Method and an Application to the Enzymatic Deamination of Cytidine, XIIth International Congress of Quantum Chemistry 2006 (May 2006, Kyoto, Japan) (ポスター)
- T. Nomoto, S. Fujiyoshi, T. Ishibashi, H. Onishi: Fourth-order Raman observation of organic molecules adsorbed on TiO₂, ACS the 232nd ACS National Meeting (Sep. 2006, San Francisco, USA)
- H. Onishi, T. Nomoto, S. Fujiyoshi, T. Ishibashi: Low-Frequency Vibrations at Buried Interfaces Observed with Fourth-Order Raman Scattering, 46th IUUVSTA Workshop & 5th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics, (May 2006, Abashiri, Hokkaido)

○国内学会

- 相田 美砂子: 生体高分子を対象とした分子軌道法計算の展開。第 13 回理論化学シンポジウム「10 年後の理論化学を考える」(2006 年 9 月 16 日, 葉山) (招待講演)
- 石橋 孝章, 前田 俊樹, 永原 哲彦, 相田 美砂子: 有機単分子膜の電子振動二重共鳴和周波分光。分子研研究会「生体機能理解の基礎としての複雑分子系の階層構造的分子間相互作用」(2006 年 12 月, 岡崎) (招待講演)
- 石橋 孝章: Doubly resonant SFG spectroscopy of organic monolayers on metal substrates。分子研研究会「和周波分光で拓く分子科学の新展開」: 第 3 回 SFG 研究会 (招待講演) (2006 年 12 月, 岡崎) (招待講演)
- 石橋 孝章: 有機単分子膜の赤外可視和周波分光。日本化学会中国四国支部講演会 (2006 年 12 月, 松江) (招待講演)
- 石橋 孝章: 電子振動二重共鳴 SFG 分光 - 装置開発と有機単分子膜への応用。日本分光学会中国四国支部広島地区講演会「非線形レーザー分光の表面探索・反応制御への応用」(2006 年 11 月, 東広島) (招待講演)
- 石橋 孝章: 有機分子膜の電子振動二重共鳴 SFG 分光。日本光学会年次学術講演会・日本分光学会秋季講演会 Optics & Photonics Japan 2006 (2006 年 11 月, 東京) (招待講演)
- 長谷川 傑, 勝本 之晶, 赤井 伸行, 相田 美砂子, 大野 啓一: 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, 神奈川) (一般講演)
- 長谷川 傑, 勝本 之晶, 赤井 伸行, 相田 美砂子, 大野 啓一: 2-pyridone とその誘導体の溶液中における会合 状態および互変異性。分子構造討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (一般講演)
- 長谷川 傑, 勝本 之晶, 赤井 伸行, 相田 美砂子, 大野 啓一: 赤外分光法による 2-pyridone とその誘導体の溶液中における会合状態および互変異性化。日本化学会西日本大会 (2006 年 11

- 月, 沖縄) (一般講演)
- 三宅 敏子, 相田 美砂子: 水 8 量体の安定構造と自由エネルギー。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 (2006 年 12 月, 札幌) (一般講演)
- 吉田 智喜, 相田 美砂子: 8-Oxoguanine のケト-エノール安定性に関する理論化学的研究。日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (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($\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$) の安定構造。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 大久 真幸, 相田 美砂子, 山高 博: 水溶液中における置換反応の QM/MM-MC 法による自由エネルギーマップ。分子構造討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (一般講演)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: 水および水クラスターの IR および Raman スペクトル。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 (2006 年 12 月, 札幌) (一般講演)
- 宮本 秀範, 相田 美砂子: 溶媒水分子を含むグリシンのプロトン移動についての理論化学的研究。日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄) (一般講演)
- 正木 竜太, 相田 美砂子: 5-ホルミルウラシルとその互変異性体についての非経験的分子軌道法による研究。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 安藤 広司, 相田 美砂子: 1,2-diethoxyethane の平均構造についての理論化学的研究。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 小林 彰, 相田 美砂子: 溶媒環境下におけるシトシンおよびその異性体についての理論化学的研究。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 末益 匠, 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: 金基板上のアデニン単分子膜の作製とその振動スペクトル。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 前田 俊樹, 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: 赤外可視二重共鳴 SFG 分光による白金上のフルオレセイン単分子膜の研究。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: カイラルな分子会合体薄膜の電子振動二重共鳴 SFG 分光。第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 前田 俊樹, 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: フルオロセイン誘導体単分子膜の電子振動二重共鳴 SFG 分光。分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (一般講演)
- 赤井 伸行, 大野 啓一, 相田 美砂子: マトリックス単離した 2-(メチルアミノ)ピリジンの光異性化。分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)
- 三宅 敏子, 相田 美砂子: 水クラスターの構造の温度依存性。分子構造討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)
- 吉田 智喜, 相田 美砂子, 皿井 明倫: アミノ酸側鎖による核酸塩基対認識: 相互作用自由エネルギーマップ。第 13 回理論化学シンポジウム (2006 年 9 月, 神奈川) (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反応経路。第 18 回基礎有機化学連合討論会 (2006 年 10 月, 福岡) (ポスター)
- 坂宗 和明, 相田 美砂子: Direct ab initio MD 法計算による相空間上のエチレングリコールの構造異性化の条件についての研究。分子構造討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: Quasi-classical direct ab initio MD を用いた振動解析: 水の基本音と IR および Raman スペクトル。分子構造討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)
- 土居 英男, 相田 美砂子, 河野 秀俊, Kumar Shaji, M. Gromiha Michael: マルチカノニカルモンテカルロ法を用いたアミノ酸側鎖と核酸塩基対との相互作用の計算。分子構造討論会 2006

(2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)

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 29 回情報化学討論会 (2006 年 11 月, 新潟) (ポスター)

永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: ポルフィリン会合体薄膜のカイラル SFG。日本化学会第 87 春季年会 (2006 年 3 月, 大阪) (ポスター)

永原 哲彦, 相田 美砂子, 福島 均, 大西 洋, 石橋 孝章: シアノターフェニル SAM 膜の紫外・赤外二重共鳴和周波分光。分子構造総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡) (ポスター)

前田 俊樹, 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: 芳香族有機単分子膜の電子振動二重共鳴 SFG の紫外/可視プローブ波長依存性。平成 18 年度日本分光学会春季講演会 (2006 年 5 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 特定領域研究 計画研究

「溶液内反応の QM/MM-MC および MD シミュレーション」 (代表: 相田 美砂子)

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)

学長裁量経費 晝馬研究支援金

「金属基板上の有機単分子膜の電子および振動状態の二重共鳴和周波発生分光による研究」 (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ックスに関する理論的研究
受入教員	相田 美砂子

外国人客員研究員（私費）

氏 名	蘭 春蕾（中華人民共和国）
受入期間	平成 18 年 4 月 1 日 から 平成 20 年 3 月 31 日まで
研究課題	天然物有機化学に関連した有機化学的研究
受入教員	大方 勝男, 小島 聡志

氏 名	Md. Ruhul Matin（バングラディッシュ）
受入期間	平成 18 年 4 月 1 日 から 平成 20 年 3 月 31 日まで
研究課題	機能性分子の赤外分光研究
受入教員	大野 啓一

・外国人留学生の受け入れ状況

平成 18 年度は、博士課程前期に 2 名、後期に 2 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 18 年度（2006 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	4
	基盤研究(A)	4
	基盤研究(B)	6
	基盤研究(C)	3
	若手研究(A)	2
その他の研究費（公募）		7
委任経理金		6

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

- 井口佳哉, 分子科学総合討論会 2006 (2006 年 9 月, 静岡)
- 井口佳哉, 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島)
- 水田 勉, 日本化学会第 87 春季年会 (2007 年 3 月, 大阪)
- 久保和幸, 2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄)
- 藤原照文, 日本分析化学会第 67 回分析化学討論会 (2006 年 5 月, 秋田)
- 塚原 聡, 日本分析化学会第 67 回分析化学討論会 (2006 年 5 月, 秋田)
- 岡本泰明, 日本分析化学会第 67 回分析化学討論会 (2006 年 5 月, 秋田)
- 塚原 聡, 日本分析化学会第 55 年会 (2006 年 9 月, 大阪)
- 塚原 聡, 日本溶媒抽出学会第 25 回日本溶媒抽出討論会 (2006 年 9 月, 金沢)
- 灰野岳晴, 第 1 回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2006 年 5 月, 筑波)
- 灰野岳晴, 日本化学会第 87 春季年会 (2007 年 3 月, 大阪)
- 岩本 啓, 日本化学会第 87 春季年会 (2007 年 3 月, 大阪)
- 山崎勝義, 第 22 回化学反応討論会 (2006 年 6 月, 岡崎)
- 田林清彦, 第 44 回燃焼シンポジウム (2006 年 12 月, 広島)
- 田林清彦, 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島)
- 山本陽介, 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」第 2 回国際シンポジウム, (2006 年 8 月)
- 山本陽介, 第 18 回基礎有機化学連合討論会 (2006 年 10 月, 福岡)
- 山本陽介, 2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄)
- 河内 敦, 日本化学会第 87 春季年会 (2007 年 3 月, 大阪)
- 小島聡志, 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島)
- 勝本之晶, 2006 年日本化学会西日本大会 (2006 年 11 月, 沖縄)
- 岡田和正, 第 3 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2006 年 12 月, 東広島)
- 相田美砂子, XIIth International Congress of Quantum Chemistry Satellite Symposium 'Large Molecular Systems' (May 2006, Okazaki, Japan)
- 石橋孝章, 分子研研究会「生体機能理解の基礎としての複雑分子系の階層構造的分子間相互作用」(2006 年 12 月, 岡崎)
- 石橋孝章, 分子研研究会「和周波分光で拓く分子科学の新展開」: 第 3 回 SFG 研究会 (2006 年 12 月, 岡崎)

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, 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(2003～2007)
- 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, 分子科学会幹事(2001～)
- 井口佳哉, 分子科学会総務委員会委員(2006～)
- 福原幸一, 日本熱測定学会委員(2005～)
- 井上克也, 日本化学会学術賞進歩賞等審査委員 (2005～)
- 井上克也, 日本学術振興会科学研究費審査委員(2005～)
- 井上克也, 磁性国際会議(ICM)分子磁性分野プログラム委員
- 三吉克彦, 日本化学会オブザーバー理事
- 三吉克彦, 錯体化学討論会運営委員
- 水田 勉, 日本化学会中国四国支部会計幹事
- 水田 勉, 錯体化学会理事, 錯体化学討論会運営委員
- 藤原照文, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2004)
- 藤原照文, 日本分析化学会中国四国支部庶務幹事 (1989～2005)
- 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 (2005～2006)
- 灰野岳晴, 生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事 (2004～2005)
- 灰野岳晴, 新規素材探索研究会幹事 (2002～)
- 山崎勝義, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2006)
- 山崎勝義, 日本分光学会中国支部会計監査 (2006)
- 山崎勝義, 日本分光学会代議員 (2004)
- 田林清彦, 日本化学会中国四国支部幹事 (2001)
- 田林清彦, 日本化学会中国四国支部幹事, 事務局長 (2000)
- 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 (2005～2006)
 大方勝男, 有機合成化学協会中国四国支部幹事 (1999～2006)
 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～)
 小島聡志, 日本化学会中国四国支部幹事 庶務 (2006)
 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～)
 相田美砂子, 日本化学会中国四国支部幹事 (2002～)
 相田美砂子, 情報計算化学生物学会 (CBI 学会) 理事 (2002～)
 石橋孝章, 日本分光学会企画委員会委員 (1999～)

・ 学会・討論会の組織委員

江幡孝之, 日本学術振興会 日仏共同研究代表 (2006 年 4 月～2008 年 3 月)
 井上克也, 科学研究費基盤研究(A)『結晶と磁性のChirality』2006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, 磁性国際会議(ICM)分子磁性分野評価委員
 三吉克彦, 第56回錯体化学討論会広島実行委員長
 水田 勉, 第56回錯体化学討論会広島実行委員
 久保和幸, 第56回錯体化学討論会広島実行委員
 藤原照文, 日本分析化学会第 64 回分析化学討論会実行委員会委員 (2002～2003)
 藤原照文, 日本化学会西日本大会実行委員会委員 (2003)
 藤原照文, 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～)
 藤原照文, 日本分析化学会第 56 年会実行委員会委員 (2006～)
 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)
 塚原 聡, 日本分析化学会第 56 年会実行委員会委員 (2006～)
 深澤義正, 11th International Symposium on Supramolecular Chemistry, Fukuoka (Japan), August 2000
 (組織委員)
 深澤義正, 第 15 回シクロファン研究会, 2000 (組織委員)
 深澤義正, 第 16 回シクロファン研究会, 2001 (組織委員)
 深澤義正, 第 17 回シクロファン研究会, 2002 (組織委員)
 深澤義正, 第 18 回シクロファン研究会, 2003 (組織委員)
 深澤義正, 第 19 回シクロファン研究会, 2004 (組織委員)
 深澤義正, 第 20 回シクロファン研究会, 2005 (組織委員)
 深澤義正, 第 21 回シクロファン研究会, 2006 (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実行委員長, 2005年
 田林清彦, 第 20 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 (2005～
 2007)
 田林清彦, 第 44 回燃焼シンポジウム実行委員会委員 (2005～2006)
 田林清彦, 2004 分子構造総合討論会準備委員会委員 (2002～2004)
 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, 広島地区化学講演会(日本化学会中国四国支部) (2001)
 田林清彦, 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, 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)
 山本陽介, 第 4 1 回有機反応若手の会
 河内 敦, 第 4 1 回有機反応若手の会
 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 (2005～2007)
 相田美砂子, ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員長 (2004～)
 相田美砂子, 第 4 回 QuLiS シンポジウム「水」オーガナイザー(2007 年 3 月)

・その他の委員

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)
 山崎勝義, 「夢・化学 21」広島大学化学研究グループ 代表 (2006)
 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

江幡孝之, 東京工業大学大学院, 非常勤講師, 2006 年 7 月 11 日
 山崎 勝義, 放送大学面接授業(集中型)講師「大気化学」(2001 年 2 月, 放送大学新潟学習センター)
 山本陽介, 福岡大学理学部化学科, 非常勤講師, 2006 年 9 月 6 日～2007 年 9 月 7 日
 平賀良知, 広島工業大学情報学部, 非常勤講師, 2006 年 9 月 20 日～2007 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～)

・高大連携事業

水田 勉, 鳥取県立鳥取東高等学校 SSH 自然化学実験 (2006 年 9 月, 広島大学)
 久保和幸, 鳥取県立鳥取東高等学校 SSH 自然化学実験 (2006 年 9 月, 広島大学)
 藤原照文, 模擬授業, 2005 年 10 月, 広島県立廿日市高等学校 (廿日市)
 山崎勝義, 大学模擬講義「大学の化学と物理化学の楽しみ方」(2006 年 9 月, 広島県立広島中・高等学校)
 山崎勝義, 大学模擬講義「分子に光をあてると化学結合の長さや強さがわかる」(2005 年 10 月, 広島県立広島皆実高等学校)
 呉屋博, 太田隆夫, 三好隆博, 草野完也, 田島文子, 中久喜伴益, 野々村真規子, 三村昌泰,

高橋修，SPP 先行的調査研究，科学技術・理科学習プログラム「科学シミュレーションに挑戦しよう ～中高生のためのコンピュータプログラミング基礎講座～」
(2002 年 7-9 月，広島大学附属福山中・高等学校)

山本陽介，広島大学附属高等学校 SSH 事業 (2006 年 8 月 2 日)

山本陽介，出張講義，(2006 年 10 月 26 日，広島県立皆実高等学校)

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

相田美砂子，KAMO Academic Week「コンピュータで化学する」(2006 年 7 月 27 日，広島県立賀茂高等学校，東広島市)

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，楯 真一，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

工学研究科

森本 康彦，大倉 和博

理学研究科特任教員（常勤の非常勤）

岩田 末廣，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

神沼 二真

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

赤井 伸行，永原 哲彦，山本 竜也，田中 雅人，三宅 敏子

Adchara Padermshoke

受託研究員

中島 宏樹，中家 修一

○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 18 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 31 回）。毎週金曜日 14:35~16:05 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 2006 年 4 月 14 日（金）

題目：ガイダンス

講師：相田 美砂子（広島大学大学院理学研究科 教授）

第 2 回 （若手研究者シリーズ(3)）2006 年 4 月 21 日（金）

題目：*ab initio* MO 法と分子シミュレーション法を組み合わせた計算手法とその応用

講師：田中 雅人（広島大学大学院理学研究科 研究員）

第 3 回 2006 年 4 月 28 日（金）

題目：計算機で化学する（その 2）

講師：岩田 末廣（広島大学大学院理学研究科 特任教授）

第 4 回 （企業人材シリーズ（19））2006 年 5 月 12 日（金）

題目：計算化学をどこで使うか？ ー難しい？ だからやるんですー

講師：岩崎 秀治（株式会社クラレ オプトデバイス商品開発センター）

第 5 回 （院生シリーズ（5））2006 年 5 月 19 日（金）

題目：大腸菌由来ジヒドロ葉酸還元酵素のループ部位欠失変異体の構造・安定性・機能

講師：堀内 裕司（広島大学大学院理学研究科）

- 第6回 2006年5月26日(金)
 題目：ストロイドホルモンとニューロステロイド：ホルモンの古典的機能と新しい姿
 講師：山崎 岳（広島大学大学院総合科学研究科）
- 第7回 （企業人材シリーズ（20））2006年6月2日(金)
 題目：セルロース ―古い素材が提供する新しい機能―
 講師：柴田 徹（ダイセル化学工業 セルロースカンパニー）
- 第8回 2006年6月9日(金)
 題目：地球・月・太陽の情報を人はどのように獲得したか
 講師：細矢 治夫（広島大学客員教授，お茶の水女子大学名誉教授）
- 第9回 （若手研究者シリーズ（4））2006年6月16日(金)
 題目：質量分析法による蛋白質のH/D交換の研究
 講師：山本 竜也（広島大学大学院理学研究科 博士研究員）
- 第10回 2006年6月23日(金)
 題目：NMR化学シフトとその意義
 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11回 （企業人材シリーズ（21））2006年6月30日(金)
 題目：製薬企業における計算科学
 講師：高岡 雄司（大正製薬株式会社）
- 第12回 2006年7月7日(金)
 題目：計算分子分光學計算分子分光學
 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 （企業人材シリーズ（22））2006年7月14日(金)
 題目：冷却水系におけるスケール障害について ―影響因子選択の重要性について―
 講師：西田 育子（栗田工業株式会社）
- 第14回 2006年7月21日(金)
 題目：ポストゲノム時代の必須アイテム・・・コンピュータ
 講師：寺内 かえで（広島工業大学情報学部健康情報学科）
- 第15回 2006年7月28日(金)
 題目：酒類総合研究所での講演会および見学会
 講師：岩下 和裕（酒類総合研究所）
- 第16回 2006年10月6日(金)
 題目：構造生物学の産業的インパクト
 講師：鈴木 榮一郎（味の素株式会社）
- 第17回 2006年10月13日(金)
 題目：アカデミアにおける計算創薬の可能性：核内受容体を標的として
 講師：神沼 二眞（広島大 QuLiS 客員研究員）
- 第18回 2006年10月20日(金)
 題目：科学者をめざす人の作文術
 講師：青山 聖子（サイエンスライター）
- 第19回 2006年10月27日(金)
 題目：大振幅変角振動の取り扱い：理論からの提言
 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 20 回 2006 年 11 月 10 日 (金)

題目：Tailoring functionality of clusters and their complexes with biomolecules by size, structures and lasers

講師：Prof. Dr. Vlasta Bonacic-Koutecky (Humboldt-Universitat zu Berlin, Department of Chemistry)

第 21 回 2006 年 11 月 17 日 (金)

題目：質量分析法と化学修飾法を用いた膜タンパク質のトポロジー解析

講師：水野 初 (広島大学大学院理学研究科 博士課程後期)

第 22 回 2006 年 11 月 24 日 (金)

題目：科学者をめざす人の作文術 (その 2)

講師：青山 聖子 (サイエンスライター)

第 23 回 2006 年 12 月 1 日 (金)

題目：計算化学から見た化学反応

講師：酒井 章吾 (岐阜大学工学部応用化学科 教授)

第 24 回 2006 年 12 月 8 日 (金)

題目：「バイオインフォマティクス」授業内容

講師：石野 洋子 (広島大学大学院理学研究科 特任助教授)

第 25 回 2006 年 12 月 15 日 (金)

題目：スピン相互作用とその意義：双極子相互作用

講師：齊藤 肇 (姫路工業大学 (兵庫県立大学) 名誉教授, 広島大学客員教授)

第 26 回 2006 年 12 月 22 日 (金)

題目：1 分子時系列情報から解読される背後に潜む生体分子系の動態構造

講師：小松崎 民樹 (神戸大学理学部地球惑星科学科 (非線形科学分野)・JST/CREST)

第 27 回 2007 年 1 月 12 日 (金)

題目：計算機で化学する (その 3)

講師：岩田 末廣 (広島大学大学院理学研究科 特任教授, 広島大 QuLiS)

第 28 回 2007 年 1 月 19 日 (金)

題目：院生の研究発表

(1) 堤 大輔 (数理分子生命理学専攻・M2)

『Human synphilin-1 の X 線結晶構造解析』

(2) 福重 隆之 (数理分子生命理学専攻・M2)

『二次構造パーツ並べ換え体タンパク質 S2354 の X 線構造解析』

(3) 南 孝将 (化学専攻・M2)

『金ナノ粒子ネットワーク構造の創製とその分光・ナノ構造観測ならびに理論的考察』

(4) 堀川 裕加 (物理科学専攻・M2)

『高効率軟 X 線発光分光器の開発とグリシン水溶液の電子状態』

第 29 回 2007 年 1 月 26 日 (金)

題目：院生の研究発表

(1) 渡部 浩史 (数理分子生命理学専攻・M2)

『質量分析法によるジヒドロ葉酸還元酵素ループ部位欠失変異体の H/D 交換の研究』

(2) 長谷川 傑 (化学専攻・M2)

『2-pyridone とその誘導体の溶液中における会合状態および互変異性』

(3) 山田 朋範 (化学専攻・M2)

『Quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた IR および Raman スペクトルの計算』

(4) 前田 俊樹 (化学専攻・M2)

『芳香族有機単分子膜の IR-VIS 電子振動二重共鳴 SFG 分光』

第 30 回 2007 年 2 月 2 日 (金)

題目：オーファン受容体研究が切り開く新しい生命現象

講師：斎藤 祐見子 (広島大学総合科学研究科・行動科学講座 教授)

第 31 回 2007 年 2 月 9 日 (金)

題目：ダイヤモンド・チップを利用した DNA 保存

講師：高橋 浩二郎 (広島国際大学大学院総合人間科学研究科医療工学専攻 教授)

②第 4 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 4 回 QuLiS シンポジウム「水」

日時：2007 年 3 月 9 日 (金) 13:00～17:20

場所：広島大学理学部 E002 室

プログラム：

1. 13:00～14:00 Dr. Sotiris Xantheas (Pacific Northwest National Laboratory)
“A quantitative account of quantum effects in liquid water”
2. 14:00～15:00 岡崎 進 (自然科学研究機構岡崎共通研究施設計算科学研究センター)
「水中におけるミセル生成の自由エネルギー」
3. 15:20～16:20 田中 秀樹 (岡山大学理学部)
「カーボンナノチューブ内の疎水性ゲストを内包する氷の生成」
4. 16:20～17:20 齋藤 肇 (広島大学量子生命科学プロジェクト研究センター)
「膜タンパク質機能における水和の寄与」

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 2006 年 8 月 10 日

講演題目：ゲノムからタンパク質へ：そのプロセスに観る生物の世界

講師：郷 通子 (お茶の水女子大学 学長)

第 2 回 NaBiT セミナー 2006 年 9 月 28 日

講演題目：Computational Studies in Chemical Physics, Catalysis, and Biochemistry, Parts I

講師：Michel Dupuis (Pacific Northwest National Laboratory)

第 3 回 NaBiT セミナー 2006 年 9 月 28 日

講演題目：Computational Studies in Chemical Physics, Catalysis, and Biochemistry, Parts II

講師：Michel Dupuis (Pacific Northwest National Laboratory)

第 4 回 NaBiT セミナー 2006 年 10 月 11 日

講演題目：Understanding Molecular Structures of Polymers and Biomolecules at Interfaces

講師：Zhan CHEN (Associate Professor of Chemistry, Applied Physics and Macromolecular Science and Engineering, Associate Faculty of Biophysics Department of Chemistry, University of Michigan)

第 5 回 NaBiT セミナー 2006 年 10 月 30 日

講演題目：天文学と化学：星間 H_3^+ の天体物理化学

講師：岡 武史 (シカゴ大学 化学教室, 天体物理教室, エンリコフェルミ研究所)

第 6 回 NaBiT セミナー 2007 年 3 月 8 日

講演題目：Development of a new interaction potential for water from first principles: Structural and thermodynamic properties of water clusters, clathrate hydrates, liquid water and ice

講師：Dr. Sotiris S. Xantheas (Pacific Northwest National Laboratory)

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。

⑥2006 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19年3月1日現在）および平成18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
	大野 啓一	化学専攻分子反応化学講座
	楯 真一	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	谷本 能文	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	富岡 清 (非常勤)	京都大学大学院薬学研究科
	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
	井口 佳哉	化学専攻分子構造化学講座
	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
	小松崎 民樹 (非常勤)	神戸大学理学部地球惑星科学科
	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
	速水 真也	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
助手	水田 勉	化学専攻分子構造化学講座
	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18年度 化学科長 山本 陽介
 副化学科長 大方 勝男・山崎 勝義
 化学科長補佐 塚原 聡

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18年度の各種委員会の委員一覧を次にあげる。

図書委員	◎ 谷本 相田 楯 井口 岡田 河内 小島 灰野 秋田 芦田 岡本 久保
化学実験委員	◎ 水田 秋田 大前 岡本 高橋 平賀 福原
教務問題検討委員	◎ 小島 井上 江幡 山本 石橋 水田
情報処理委員	◎ 相田 芦田 岡本 久保 高木 高橋
野外研修企画委員	◎ 山本 山崎 石橋 岩本 岡本 久保
当番教室	量子化学研究グループ
廃液処理指導員	石橋 河内 藤原（昌）
危険薬品庫管理者	岩本
シリンダーキャビネット室管理者	高木
就職担当	藤原（照） H17年10月～H18年9月末 江幡 H18年10月～H19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18年度化学科在籍学生数

平成18年5月1日現在

入 学 年 度	在 籍 学 生 数
平成18年度	69(15)
平成17年度	65(17)
平成16年度	62(13)
平成15年度	68(19)
平成14年度	8(2)
平成13年度	2(0)
平成12年度	1(0)
平成11年度	1(0)
合計	276(66)

() 内は女子で内数

・チューター

入 学 年 度	チューター
平成18年度	山本, 塚原, 石橋
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18年度化学科開講授業科目

科目区分	開設期	履修指定	授業科目名	担当教員	授業のキーワード
教養	1 前	必修	情報活用演習	藤原(好)	コンピューター, インターネット, 電子メール, WWW, ワープロ, 表計算, プレゼンテーション
教養	1 後	他学科用	現代社会と自然科学	谷本, 大野, 深澤	
教養	1 前	他学科用	化学概説A	藤原(照)	原子・分子, 化学結合, 量子化学, 化学熱力学, 化学平衡, 化学反応
教養	1 後	他学科用	化学概説B	平田	有機化学・生物有機化学・生物化学
教養	3 前	必修	化学英語演習	小島, 大野, 三吉	化学英語, 物理化学, 無機化学, 有機化学, リーディング, 英作文
教養	1 前	必修	教養ゼミ	山本	化学的情報の収集・整理・提供
専門	3 後	選択必修	先端化学	山本	先端化学, 卒業研究ガイダンス
専門	4 前	選択	化学演習	相田, 岡田	統計熱力学, 化学平衡, 反応論, 量子論, 分子構造
専門	2 前	選択	化学数学	石橋	行列式, 固有値と固有方程式, 全微分と偏微分, ラグランジェの未定係数法, 微分方程式
専門	3 前	選択	化学インターンシップ	山本	
専門	1 後	必修	基礎物理化学A	藤原(好)	化学熱力学, 熱力学第一法則, 熱力学第二法則, 熱力学第三法則
専門	1 後	必修	基礎物理化学B	江幡, 岡田	量子化, 波動・粒子二重性, シュレーディンガー方程式, 不確定性原理
専門	3 前	選択	光機能化学	齋藤	凝縮相, 光物性, 分子分光学, ナノ物性, レーザー
専門	3 前	選択	システムバイオロジー	泉, 石野	代謝生化学, 情報化学, 反応速度論, 情報生命科学, ネットワーク理論
専門	3 後	選択	バイオインフォマティクス	泉, 石野	計算化学, 情報化学, 理論分子生物学, 情報生命科学, 生物情報学
専門	3 後	選択	計算化学・同実習	相田, 松原	量子化学, 計算化学, 情報化学, 計算機
専門	3 後	選択	化学英語演習	山本, 楯, 相田	化学英語
専門	2 後	必修	物理化学 II	山崎	分子運動論, 分配関数, 反応速度
専門	2 後	必修	物理化学 III	相田	原子構造, 分子構造, 量子化学
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	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 後	選択	生体物質化学	泉	糖, 脂質, アミノ酸, タンパク質, 酵素, 補酵素, 立体化学
専門	2 前	必修	物理化学演習 I	片柳, 井口	熱力学, 化学平衡, 相平衡, 演算子とシュレーディンガー方程式
専門	2 後	必修	物理化学演習 II	石橋, 岡田, 齋藤	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
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	泉, 深澤, 河内, 平田	有機化学・演習・有機反応・有機構造・生体物質・有機反応機構
専門	3 前後	必修	化学実験	水田	化学実験・無機・分析化学・物理化学・有機・生物化学
専門	3 前	選択	反応動力学	田林	化学反応速度, ポテンシャル曲面, 反応座標, 遷移状態理論, 化学反応ダイナミクス
専門	3 前	選択	分子構造化学	江幡	調和振動, 回転, 基準振動, 赤外吸収

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	楯	生体高分子構造, 生体高分子計測技術, 分子運動性, 蛋白質構造機能相関, 蛋白質分子認識
専門	3 後	選択	分子光化学	谷本	電磁波, 光, 電子スペクトル, 光化学反応, 励起状態
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	機器分析化学	藤原(照)	分配平衡, 溶媒抽出, イオン交換, クロマトグラフィー, 分光分析法, 電気化学分析法
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 後	選択	有機金属化学	水田	典型元素および遷移金属の有機金属化学, 18 電子則, 酸化付加, 還元的脱離, 挿入反応, 金属錯体触媒
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, 放射線計測, 原子核反応
専門	2 後	選択	有機分析化学	河内	構造解析, 機器分析, 核磁気共鳴法 (NMR), 質量分析法 (MS), 赤外分光法 (IR)
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	3 前	選択	構造有機化学	深澤	立体化学・キラリティ・立体配座・高ひずみ化合物・芳香族性
専門	3 前	選択	生物化学	平田	生体反応・生合成・生体内代謝・酵素化学・生体機能化学・細胞化学
専門	3 後	選択	反応有機化学	山本	転位反応, 軌道相互作用, Woodward-Hoffmann 則
専門	3 後	選択	天然物有機化学	小島	天然物・有機反応機構・選択的有機反応・不斉合成・全合成
専門	1 前	必修	基礎化学 A	江幡	力学、エネルギー、波動、電気、物質の性質と構造
専門	1 前	必修	基礎化学 B	小島	有機化学・命名法・官能基・立体化学・有機反応
専門	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	1 後	必修	基礎有機化学	小島	有機電子論, 反応機構, 付加反応, 求核置換反応, 脱離反応, アルケン, アルキン
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・電子の流れ図・求核攻撃・求電子反応・共役付加・カルボニル縮合反応
専門	2 後	必修	有機化学 III	深澤	・芳香族求電子置換反応・芳香族求核置換反応・多核芳香族化合物・複素環式化合物・ペリ環状反応
専門	2 前	必修	無機化学 I	井上	最密充填、結晶構造、格子エネルギー、化学結合、X線回折
専門	2 前	必修	無機化学 II	塚原	化学量論, 化学平衡, 活量, 酸塩基, 酸化還元, 錯形成, 沈殿生成
専門	4 前後	必修	卒業研究	各指導教員	課題研究
教職	3 前		化学実験 A	水田	基礎化学実験, 実験技能・操作, 中学校教諭(理科)一種免許状
教職	2 後		総合演習	山本	人類及び社会全体にかかわる課題, 生徒指導方法と技術
教職	4 前		総合演習	山本	人類及び社会全体にかかわる課題, 生徒指導方法と技術
専門		留学生用	Modern Chemistry	山本	

集中講義 富岡 清 (京都大学大学院薬学研究科教授)

授業科目名: 有機合成化学 (3・4 年次生対象)

(担当: 数理分子生命理学専攻生命理学講座生物化学研究グループ)

小松崎 民樹 (神戸大学理学部地球惑星科学科准教授・JST/CREST)

授業科目名: 化学反応における選択性と統計性 (3・4 年次生対象)

(担当: 化学専攻分子反応化学講座量子化学研究グループ)

・担当授業科目一覧

平成18年度担当授業科目					
職	氏名	講義	演習	化学 実験	卒業 研究
教授	相田 美砂子	教養ゼミ，物理化学 III，量子化学，計算化学	化学演習，化学英語演習 (分担)		◎
	井上 克也	無機固体化学，無機化学 I	無機化学演習 (分担)		◎
	江幡 孝之	基礎化学 A，分子構造化学，基礎物理化学 B			◎
	大野 啓一	集積化学	化学英語演習 (分担)		◎
	楯 真一	生体高分子化学	化学英語演習 (分担)		◎
	谷本 能文	分子光化学，現代社会と自然科学			◎
	富岡 清	有機合成化学			
	平田 敏文	化学概説 B，生物化学	有機化学演習 (分担)		◎
	深澤 義正	教養ゼミ，有機化学 III，構造有機化学	有機化学演習 (分担)		◎
	藤原 照文	教養ゼミ，機器分析化学，化学概説 A			◎
	三吉 克彦	教養ゼミ，基礎無機化学，無機化学 III	無機化学演習，化学英語 演習 (分担)		◎
	山崎 勝義	教養ゼミ，物理化学 II			◎
	山本 陽介	教養ゼミ，有機化学 I，反応有機化学，Modern Chemistry，化学インターンシップ，先端化学	化学英語演習，総合演習		◎
助教授	石橋 孝章	教養ゼミ (分担)，化学数学	物理化学演習 II	○	◎
	泉 俊輔	生体物質化学，システムバイオロジー，バイオ インフォマティクス，	有機化学演習	○	◎
	井口 佳哉		物理化学演習 I (分担)	○	◎
	岡田 和正	物理化学 I，基礎物理化学 B (分担)	物理化学演習 II (分担)， 化学演習 (分担)	○	◎
	片柳 克夫	生物構造化学	物理化学演習 I	○	◎
	河内 敦	有機分析化学	有機化学演習 (分担)	○	◎
	小島 聡志	基礎有機化学，基礎化学 B，天然物有機化学	化学英語演習	○	◎
	小松崎 民樹	化学反応における選択性と統計性			
	斎藤 健一	光機能化学	物理化学演習 II (分担)		
	田林 清彦	反応動力学		○	◎
	塚原 聡	教養ゼミ (分担)，無機化学 II	無機化学演習 (分担)	○	◎
	中島 覚	放射化学			
	灰野 岳晴	有機化学 II		○	◎
	藤原 好恒	基礎物理化学 A，情報活用演習		○	◎
	水田 勉	化学実験，化学実験 A，有機金属化学	無機化学演習 (分担)	◎	◎
助手	秋田 素子		無機化学演習 (補助)	○	○
	芦田 嘉之			○	○
	岩本 啓			○	○
	大前 英司		物理化学演習 I (補助)	○	○
	岡本 泰明		無機化学演習 (補助)	○	○
	勝本 之晶		物理化学演習 II (補助)	○	○
	久保 和幸	教養ゼミ (補助)	無機化学演習 (補助)	○	○
	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)	○	○

¹内地研究員○：分担・補助 ◎：担
当

・平成18年度新入生用化学プログラム履修要領

化学プログラムでは専門教育科目が体系的かつ効果的に履修できるように、専門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 教養教育科目は3年次後期(6セメスター)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 教養教育科目「領域科目」で卒業の要件として修得すべき単位（以下、卒業要件単位）にできるのは、自然科学領域以外の科目に限る。

5 教養教育科目「基盤科目」のうち数学、理科系の「概説」科目としては「物理学概説A」「物理学概説B」を履修することが望ましい。「概説」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が、「科目区分を問わない」科目の単位にすることができる。

ただし、「化学概説A」「化学概説B」は卒業要件単位に算入することができない。

6 授業担当教員の下承が得られれば、化学プログラムで開講する上位セメスターの専門教育科目を履修することができる。

7 特別講義は、一定期間に集中的に開講される講義である。

化学プログラムでは、「化学特別講義」又は「理学部他プログラムの特別講義」から、最大2単位まで専門科目(選択)として認めることができる。

8 理学部他プログラムの専門基礎及び専門科目は、8単位まで専門科目(選択)の要修得単位にできる。

なお、「理学部他プログラムの特別講義」の単位を卒業要件単位とする場合、理学部他プログラムの単位で専門科目（選択）の卒業要件単位とできる単位数は、8単位から「理学部他プログラムの特別講義」の単位数を引いた数が上限となる。

9 「科目区分を問わない」科目として6単位必要である。この6単位は、以下の科目の単位から振り替えることができる。詳細についてはチューターと相談のこと。

- ・自然科学領域以外の「領域科目」
- ・「基盤科目」の数学、理科系の「概説」科目（「化学概説A、B」を除く）
- ・理学部他プログラムの「専門基礎科目」及び「専門科目（「特別講義」を除く）」

10 「教職に関する科目」は、卒業要件単位に算入することができない。

・平成18年度新入生用化学プログラム専門教育科目受講基準

1 化学実験(5, 6セメスター)を履修するためには、各科目群において次に示す単位数以上(合計63単位)を修得していなければならない。(括弧内の数字は、4セメスター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)	スポーツ実習科目	2単位(2)
外国語科目	9単位(10)	基盤科目	12単位*1(16)
情報科目	2単位(2)	専門基礎科目	28単位(34)
パッケージ別科目	4単位(6)	科目区分を問わない科目	2単位(6)
領域科目	2単位(2)		

*1 物理学実験, 化学実験法・同実験, 及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セメスター)を履修するためには、各科目群において次に示す単位数以上(合計108単位)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)	基盤科目	16単位(18)
外国語科目	10単位(10)	専門基礎科目	28単位(34)
情報科目	2単位(2)	先端理学科目	2単位(2)
パッケージ別科目	6単位(6)	化学実験	10単位(10)
総合科目	2単位(2)	専門科目(選択)	22単位(24)
領域科目	2単位(2)	科目区分を問わない科目	4単位(6)
スポーツ実習科目	2単位(2)		

上記受講基準1及び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申合せ』第3第2項により適格の認定を受けた学生(早期卒業希望者)及び編入・転入生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。

付記 この履修要領は、平成18年度入学生から適用する。

平成 18 年度新入生用化学科授業科目履修表

化学プログラム履修表

履修に関する条件は、化学プログラム履修要領に記載されているので注意すること。
編入学、転学部転学科等の特殊な事例の場合、この表に掲げる授業科目の他、他プログラム・他学部又は他大学等で修得した授業科目で化学プログラム担当教員会が認めるものについて、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。
ただし、「教職に関する科目」及び「副専攻プログラムで認定された科目」の単位は、卒業要件単位に算入することはできない。

※ 本プログラムに加えて所定の単位(詳細は学生便覧を参照のこと)を修得すれば、中学校教諭一種免許状(理科)、高等学校教諭一種免許状(理科)、毒物劇物取扱責任者、学芸員となる資格の取得が可能である。
さらに、本プログラムを卒業すれば、危険物取扱者(甲種)資格の受験が可能となる。

(教養教育)

区分	科 目 区 分			要修得 単位数	授 業 科 目	単 位 数	履修指定	履 修 年 次（下記の数字はセメスターを示す）							
								1年次		2年次		3年次		4年次	
								前期	後期	前期	後期	前期	後期	前期	後期
								1	2	3	4	5	6	7	8
共通科目	教 養 ゼ ミ			2	教養ゼミ	2	必修	②							
	外国語科目	英語 (注1)	コミュニケーションⅠ	4	コミュニケーションⅠA	1	必修	①							
					コミュニケーションⅠB	1		①							
			コミュニケーションⅡ		コミュニケーションⅡA	1			①						
					コミュニケーションⅡB	1			①						
		コミュニケーションⅢ	コミュニケーション・ライティング	1	選択必修			○	○						
			エクステンシブ・リーディング	1				○	○						
			オーラル・プレゼンテーション	1				○	○						
			インターミディエイト・カンパセーション	1				○	○						
			メディア・リスニング	1				○	○						
			チャレンジングTOEIC(R)	1				○	○						
上記6科目のうちから2科目2単位															
英語以外の外国語 (ドイツ語、フランス語、ス ペイン語、ロシア語、中国語、 韓国語のうちから1言語選 択)	4			ベーシック外国語Ⅰ	2	選択必修	○								
				ベーシック外国語Ⅱ	2			○							
教養教育				Ⅰ、Ⅱは同一言語を選択すること											
	情 報 科 目			2	情報活用演習	2	必修	②							
	パッケージ別科目			6	「パッケージ別科目」の1パッケージ のうちから	各2	選択必修		○	○					
	総合科目			2	「総合科目」のうちから	2	選択必修			○	○				
	領域科目			2	領域科目のうちから（注2）	1 また は 2	選択必修	○	○	○	○				
	基礎科目	11		微分学	2	必修	②								
				積分学	2			②							
				線形代数学Ⅰ	2		②								
				線形代数学Ⅱ	2			②							
				物理学実験	1			①							
				化学実験法・同実験	2					②					
18		1		生物学実験または地学実験から1科 目	各1	選択必修			○						
				数学概説	2		○								
		4	情報数理概説	2	選択必修		○								
			物理学概説A	2		○									
			物理学概説B	2			○								
			生物科学概説A	2		○									
			生物科学概説B	2			○								
			地球惑星科学概説A	2			○								
	地球惑星科学概説B		2			○									
	上記8科目のうちから2科目4単位														
2	化学英語演習（2科目）			各1	必修						①	①			
スポーツ実習科目			2	「スポーツ実習科目」から	各1	必修			①	①					
教養教育科目小計			44												

(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教育の英語に関する項を参照のこと。

(注2) 『領域科目』で卒業の要件として修得すべき単位にできるのは、自然科学領域以外の科目に限る。

(専門教育)

区分	科 目 区 分	要修得 単位数	授 業 科 目	単 位 数	履修指定	履 修 年 次 （下段の数字はセメスターを示す）								
						1年次		2年次		3年次		4年次		
						前期	後期	前期	後期	前期	後期	前期	後期	
						1	2	3	4	5	6	7	8	
専門教育	専門基礎科目	34	基礎化学A	2	必修	②								
			基礎化学B	2		②								
			基礎物理化学A	2			②							
			基礎物理化学B	2			②							
			基礎無機化学	2			②							
			基礎有機化学	2			②							
			物理化学ⅠA	2				②						
			物理化学ⅠB	2				②						
			物理化学ⅡA	2					②					
			物理化学ⅡB	2					②					
			無機化学Ⅰ	2				②						
			無機化学Ⅱ	2				②						
			無機化学Ⅲ	2					②					
			有機化学Ⅰ	2				②						
			有機化学Ⅱ	2				②						
			有機化学Ⅲ	2					②					
			無機化学演習	1					①					
			有機化学演習	1					①					
	専門科目	2	先端数学	2	選択必修					○				
			先端物理科学	2						○				
			先端化学	2						○				
			先端生物学	2						○				
			先端地球惑星科学	2						○				
		上記5科目の「先端理学科目」から1科目2単位												
		44 16 以上	生物構造化学	2	選択					○				
			生体物質化学	2						○				
			有機分析化学	2						○				
			反応動力学	2							○			
			物理化学演習	1							○			
			分子構造化学	2							○			
			量子化学	2							○			
			無機固体化学	2							○			
			機器分析化学	2							○			
			構造有機化学	2							○			
			生物化学	2							○			
			光機能化学	2							○			
			システムバイオロジー	2							○			
			生体高分子化学	2								○		
			分子光化学	2								○		
			集積化学	2								○		
			有機金属化学	2								○		
			放射化学	2								○		
			反応有機化学	2								○		
			天然物有機化学	2								○		
			バイオインフォマティクス	2								○		
			計算化学・同実習	2								○		
			化学演習	1									○	
			化学インターンシップ	1							○			
			化学特別講義（注3）								○	○	○	○
		18	化学実験	10	必修					←10→				
			卒業研究	8								④	④	
		0 5 8	理学部他プログラムで開講される専門基礎科目及び専門科目の授業科目		選択	○	○	○	○	○	○	○		
	専門教育科目 小計		78											
科目区分を問わない		6	(注4)		制限付選択	○	○	○	○	○	○	○	○	
合計		128												

(注3) 「化学特別講義」は、一定期間(5セメスター以降)に集中形式で開講される。履修については化学プログラム履修要領を参照すること。

(注4) 卒業要件単位数は128であるので、各科目区分の要修得単位数(教養教育科目44単位、専門教育科目78単位 合計122単位)に加えて、科目区分を問わず、さらに6単位以上修得することが必要である。

ただし、パッケージ別科目は含まれず、以下の科目の単位に限定される。詳細についてはチューターと相談のこと。

- ・自然科学領域以外の「領域科目」
- ・「基盤科目」の数学、理科系の「概説」科目(「化学概説A、B」を除く)
- ・理学部他プログラムの「専門基礎科目」及び「専門科目(「特別講義」を除く)」

・平成18年度化学科卒業生進路状況

(平成19年5月現在)

() 内は女子で内数

卒業者総数	就職者										進学	その他	
	一 般 職								教 職			研究生	その他
	公務	製造業	情報通信業	教育・学習支援業	金融・保険業	小売り・卸売業	学校教育	小計	学校教育	小計			
61(19)	1 (1)	5 (2)	1 (1)	3 (1)	2 (1)	1 (1)	1 (0)	14(7)	1 (1)	1 (1)	44(11)	0	2(0)

2-3-4 卒業論文発表実績

【1】平成18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		
構造物理化学研究グループ	5	江幡, 井口, 福原
固体物性化学研究グループ	5	井上, 速水, 秋田
錯体化学研究グループ	4	三吉, 水田, 久保
分析化学研究グループ	5	藤原(照), 塚原, 岡本
構造有機化学研究グループ	5	深澤, 灰野, 岩本
化学専攻分子反応化学講座		
反応物理化学研究グループ	4	山崎, 田林, 高橋
有機典型元素化学研究グループ	5	山本, 河内
反応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	5	大野, 岡田, 勝本
量子化学研究グループ	5	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	5	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	楯, 片柳, 大前
計	63	

* 平成18年4月26日死去

【2】平成18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)

- 明田 和大「柑橘類に含まれる抗肥満活性物質の探索」(生物化学)
- 厚地 正樹「tmp あるいは dtp で架橋された集積型鉄錯体の構造とスピントロニクス現象」(固体物性化学)
- 荒川 貞弘「メタノール・エタノールクラスターの構造と内殻励起吸収スペクトル」(反応物理化学)
- 安藤 広司「有限温度における 1,2-diethoxyethane の平均構造についての理論化学的研究」(量子化学)
- 井形 直央「ジルコニウム錯体を用いた有機反応」(反応有機化学)
- 池田 純子「オキサアルカノール及びオキサアルカン酸の熱物性」(構造物理化学)
- 池本真理子「赤外分光法を用いた Dialkoxymethane と水分子の会合状態についての研究」(集積化学)
- 稲見 裕太「2つの[1.1]フェロセノファンを骨格とする大環状リン配位子の合成及び2つの金属を内包した大環状錯体への展開」(錯体化学)
- 井下 翔平「交流および直流電場内における巨大な単一 DNA 分子の泳動挙動の顕微鏡測定」(分析化学)
- 今田 愛子「高分子量蛋白質の分子形態変化 解析技術の開発」(分子生物物理学)
- 岩崎 義己「パーフルオロシクロブタンとパーフルオロブタンの軟 X 線励起・解離」(集積化学)
- 浦崎 真吾「液液界面に生成するテトラフェニルポルフィン会合体の電場内における泳動挙動の顕微鏡測定」(分析化学)
- 衛藤 由希「Poly(N,N-diethylacrylamide)水溶液の相分離挙動に対する高分子の立体規則性の影響」(集積化学)
- 大石 優香「磁気浮上環境中における高分子 polyNIPA の合成」(物理環境化学)
- 岡 祐児「キラルアミノピリジンの合成」(反応有機化学)
- 奥野 史子「深海微生物および近縁種からの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)
- 表 香菜子「電解重合ポリチオフェンの形態的キラリティーの磁気誘導」(物理環境化学)
- 角田 佳暁「微粒子の沈降に対する強磁場の影響」(物理環境化学)
- 川崎 梨絵「OIs 内殻励起による酢酸メチルのサイト・状態選択的解離」(反応物理化学)
- 川本 慎二「種々の置換基をもつリン架橋[1.1]フェロセノファンを補助配位子としたパラジウム錯体触媒の開発」(錯体化学)
- 河本 尚「解離イオン対の同時計測法による内殻励起 n-パーフルオロブタンの解離」(集積化学)
- 日下 良二「超音速ジェット中のクラウンエーテル類およびその水和クラスターのレーザー分光」(構造物理化学)

- 小林 彰「シトシンおよびイソシトシンの互変異性過程に関する理論化学的研究」(量子化学)
- 小林 悠亮「ジェット冷却を用いた L-チロシンの安定コンフォマーの研究」(構造物理化学)
- 小森 裕美「メタル炉加熱気化導入法を用いた ICP-MS によるプラスチック中の難燃剤由来臭素の定量」(分析化学)
- 近藤 広理「連続的 Michael 反応を鍵反応とした中員環合成に関する研究」(反応有機化学)
- 三宮 瑠美「ホスホニウムイリドを配位子とする高配位ケイ素化合物の合成研究」
(有機典型元素化学)
- 鈴川 直幸「p 位に tert-butyl 基を有する新規スフェランドの合成」(有機典型元素化学)
- 胤森 真人「質量分析法を用いた lipase 相互作用部位の解析」(生物化学)
- 塚田真太郎「オキサアルカノール二塩基酸ジエステルの熱物性」(構造物理化学)
- 鶴田 淳「非水系における含有機アミン Cr-Co プルシアンブルー型錯体の合成の試み」
(固体物性化学)
- 鶴田 剛士「局所電場による溶液表面の微小変位の顕微測定と解析」(分析化学)
- 寺西 拓也「ケイ素官能性 2,2'-ジシリルビフェニルの合成と高配位化に関する研究」
(有機典型元素化学)
- 土肥 千里「新規三座配位子を有する遷移金属触媒の合成と触媒反応の開発」
(有機典型元素化学)
- 中尾 康次「水熱合成法によるジカルボン酸を含む遷移金属錯体の合成と磁氣的性質」
(固体物性化学)
- 中尾 崇之「水中のニトロベンゼン液滴の形状に対する強磁場の影響」(物理環境化学)
- 長沢 健司「強誘電性を指向した新規金属錯体液晶の合成およびその物性」(固体物性化学)
- 中野 祥吾「タバコ由来同化型亜硝酸還元酵素群の X 線結晶構造解析」(分子生物物理学)
- 中山 和之「SFG 分光装置のプロブレーザーの安定化」(量子化学)
- 中山 浩彰「ホルムアミドの単分子分解反応における動力学的研究」(反応物理化学)
- 西 長彦「光学活性なリン酸を用いた交差共役シクロヘキサジエノンの Diels-Alder 反応における不斉誘起の検討」(反応有機化学)
- 野村 昂生「窒素上に大きな置換基を導入したホスフィンイミドと鉄とのビス錯体の合成とそのメタロリガンドとしての反応性」(錯体化学)
- 野村 英孝「シロイヌナズナ培養細胞を用いたエノン類の生物変換」(生物化学)
- 平井 恵梨「フラーレンをペンダントとしてもつポリマーの合成研究」(構造有機化学)
- 平田 祐介「16 π ポルフィリンの合成の試み」(有機典型元素化学)
- 藤野 貴子「ジャイアントベシクルの脂質二分子膜に取り込まれた蛍光分子の拡散挙動の顕微
蛍光測定」(分析化学)
- 古川 貴章「NMR によるジヒドロ葉酸還元酵素 (DHFR) の動的構造と酵素活性の相関解析」
(分子生物物理学)
- 程野 有貴「カリックス[4]アレーンとそのファンデルワールスクラスターの超音速ジェットレ
ーザー分光」(構造物理化学)

- 本田 博文「キラル2次元分子磁性体の構造と磁性」(固体物性化学)
- 正木 竜太「5-ホルミルウラシルの突然変異能についての理論化学的研究」(量子化学)
- 松本 裕史「強磁場中のポルフィリンナノロッドの磁気配向」(物理環境化学)
- 三木絵梨子「ナフタレンを母骨格とする新規不斉補助試薬の合成と二級アルコールの絶対配置決定への応用」(構造有機化学)
- 水田 達也「ビピリジンの金属イオンへの配位結合を用いたナノメートルサイズのカプセル型分子の合成研究」(構造有機化学)
- 三谷 理恵「ダイズ培養細胞において環境ストレスに応答する遺伝子のクローニング」(生物化学)
- 光岡 広樹「Matrix 単離赤外分光法を用いた 2-pyridone 及びその誘導体の互変異性化に関する研究」(集積化学)
- 宮内 拓也「8-フェニルメンチルアミンを不斉源とする立体選択的反応の検討」(反応有機化学)
- 元廣 春美「シロイヌナズナ培養細胞を用いたアミノ酸 turnover の網羅的解析」(生物化学)
- 森田小百合「ヒト由来酸化損傷 DNA 修復酵素 NTH1 の結晶学的研究」(分子生物物理学)
- 山中 剛志「クラスター形成に伴うニトロメタンの O (1s) 内殻励起状態変化と光誘起反応過程」(反応物理化学)
- 山村 知玄「金ナノ粒子の創製とその生成メカニズムの検討」(構造有機化学)
- 吉田 明美「BINAP 骨格を有する新規カルボジホスホラン配位子の合成」(錯体化学)

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

藤原	照文	(平成18年度化学科自己点検・評価委員)
久保	和幸	(化学専攻分子構造化学講座)
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)