

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19年度
(2007年度)

平成20年7月

目 次

はじめに	1
1. 化 学 専 攻	2
1-1 専攻の理念と目標	2
1-2 専攻の組織と運営	2
1-2-1 教職員.....	5
1-2-2 教職員の異動.....	6
1-3 専攻の大学院教育	7
1-3-1 大学院教育の目標とアドミッション・ポリシー	7
1-3-2 大学院教育の成果とその検証	8
1-3-3 大学院生の国内学会発表実績	12
1-3-4 大学院生の国際学会発表実績	12
1-3-5 修士論文発表実績	13
1-3-6 博士学位.....	14
1-3-7 TAの実績	16
1-3-8 大学院教育の国際化.....	16
1-4 専攻の研究活動	17
1-4-1 研究活動の概要.....	17
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.....	23
分子構造化学講座	23
構造物理化学研究グループ	23
固体物性化学研究グループ	26
錯体化学研究グループ	32
分析化学研究グループ	35
構造有機化学研究グループ	39
分子反応化学講座	43
反応物理化学研究グループ	43
有機典型元素化学研究グループ	46
反応有機化学研究グループ	52
集積化学研究グループ	57
量子化学研究グループ	62
1-4-3 各種研究員と外国人留学生の受け入れ状況.....	67
1-4-4 研究助成金の受け入れ状況.....	68

1-4-5	学会ならびに社会での活動.....	69
1-5	その他特記事項	76
1-5-1	量子生命科学プロジェクト研究センター	76
2. 化 学 科		82
2-1	学科の理念と目標	82
2-2	学科の組織	83
2-3	学科の学士課程教育	85
2-3-1	アドミッション・ポリシーとその目標.....	85
2-3-2	学士課程教育の理念と達成のための具体策.....	85
2-3-3	学士課程教育の成果とその検証.....	86
2-3-4	卒業論文発表実績	95
2-4	その他特記事項	98
2-4-1	学生の表彰.....	98
報告書作成ワーキンググループ		99

はじめに

平成19年度化学専攻長

井上 克也

化学専攻では平成16年度-21年度にかけて「分子認識と分子設計」、「量子生命科学」に関する研究を中期目標に掲げて進めてきました。来年度は中期目標・中期計画の達成状況の本格的な検証を行うこととなります。世の中の説明責任の明確化の流れの中で、大学、大学院も変貌を遂げつつありますが、さらなる研究・教育の充実化が必要になってきております。研究・教育内容も学問の分野の枠を超えた融合化が必要との意識が高まりつつあり、大学院では主専攻の「化学プログラム」および「化学と生命」副専攻プログラムが昨年度立ち上げられ、順調に進められております。また理学研究科付属センターとして理学融合教育研究センターが化学専攻を含めて本年度設立され、1年間で4回の理学融合教育研究セミナー、4回のシンポジウム、さらに59回のセミナーが開催されました。

化学専攻では本年度、構造有機化学研究グループに灰野 岳晴教授、反応有機化学研究グループに安倍 学教授、集積化学研究グループに田林 清彦教授、反応物理科学研究グループに高口 博志准教授がご着任され、今後の化学専攻の研究・教育の方向性が示されようとうとしています。

この報告書は、化学専攻および化学科の平成19年度における教育・研究の成果をまとめたものです。アカウンタビリティの嵐の中、大学のあり方もけして例外ではなく、今後大学の性格付けも進められて行くものと考えられます。我々が今後生き延びて行くには、研究・教育への努力と、その成果の正確な発信が重要です。我々はこの成果を自ら吟味し、外部からの評価を受け、今後の研究・教育を一層推進させて行かなければなりません。我々の研究・教育の最新情報は、下記ホームページをご参照ください。

化学専攻

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

化学科

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

NaBiT プログラム

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

理学融合教育研究センター

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

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19年度化学専攻長	井上 克也
化学副専攻長	田林 清彦
化学専攻長補佐	井口 佳哉

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 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	江幡 井上
人事交流委員会	井上
教務委員	小島*
評価委員	藤原（照）** 江幡*
安全衛生委員	◎●田林
広報委員	秋田**
大学院委員	江幡 井上
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	井上
教育交流委員	水田
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 井上 山本（委員長）

◎は委員長 ●全学委員

*は 任期2年（H18年度～）

**は任期2年（H17年度～）

化学専攻教員の理学研究科および全学での活動

評価組織連絡協議会	江幡 孝之	平成 19 年 4 月 1 日～
入学者成績追跡調査委員会	灰野 岳晴	平成 19 年 4 月 1 日～
国際交流推進会議	山本 陽介	平成 18 年 6 月 1 日～
学術戦略会議 設備マスタープラン策定 WG	山本 陽介	平成 19 年 4 月 26 日
技術センター運営会議	山本 陽介	平成 18 年 4 月 1 日～
学術室センター等推進部門会議	江幡 孝之	平成 19 年 7 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～
	山本 陽介	平成 19 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～
図書館リポジトリ・アドバイザー	山崎 勝義	平成 19 年 8 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 19 年 4 月 1 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	平成 16 年 4 月 1 日～
	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	平成 16 年 4 月 1 日～
	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	田林 清彦	平成 19 年 4 月 1 日～
環境部会 環境連絡会議	江幡 孝之	平成 19 年 7 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～
附属高等学校スーパーサイエンスハイスクール運営指導委員会	泉 俊輔	平成 19 年 4 月 1 日～
男女共同参画推進委員会	相田 美砂子	平成 19 年 5 月 21 日～
	平田 敏文	平成 19 年 2 月 1 日～

1－2－1 教職員

平成 20 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	灰野	岳晴
教授	藤原	照文
教授	三吉	克彦
准教授	井口	佳哉
准教授	齋藤	健一（併任）
准教授	塚原	聡
准教授	速水	真也
准教授	水田	勉
助教	秋田	素子
助教	岩本	啓
助教	岡本	泰明
助教	久保	和幸
助教	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	安倍	学
教授	田林	清彦
教授	山崎	勝義
教授	山本	陽介
教授	中島	覚（併任）
准教授	石橋	孝章
准教授	岡田	和正
准教授	河内	敦
准教授	小島	聡志
助教	勝本	之晶
助教	高木	隆吉
助教	高橋	修
助教	仲	一成
助教	平賀	良知
助教	松川	史郎

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19年度の非常勤講師

- 鈴木 正樹 (金沢大学・大学院自然科学研究科・教授)
 授業科目名：生物無機化学特論
 担当：錯体化学研究グループ
- 富宅 喜代一 (神戸大学・大学院理学研究科・教授)
 授業科目名：分子分光化学特論
 担当：構造物理化学研究グループ
- 相田 卓三 (東京大学・大学院工学系研究科・教授)
 授業科目名：自己組織化と機能性ナノ材料
 担当：有機典型元素化学研究グループ

1-2-2 教職員の異動

平成19年

- | | | | |
|-------|-------|---------------------------|----|
| 4月 1日 | 田林 清彦 | (分子反応化学講座教授) | 昇任 |
| 4月 1日 | 灰野 岳晴 | (分子構造化学講座教授) | 昇任 |
| 4月 1日 | 安倍 学 | (分子反応化学講座教授) | |
| | | 大阪大学大学院工学研究科応用化学専攻助教授より採用 | |
| 4月 1日 | 松川 史郎 | (分子反応化学講座助教) | |
| | | 先進機能物質研究センター博士研究員より採用 | |

平成20年

- | | | | |
|-------|-------|---------------------|--|
| 2月 1日 | 高口 博志 | (分子反応化学講座准教授) | |
| | | 理化学研究所鈴木化学反応研究室より採用 | |

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19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	35 (7) [1]	5
平成17年度	30 (9)	3
平成16年度		9 (1) {1}
平成15年度以前		4
合計	65 (16) [1]	21 (1) {1}

() 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19年度生	相田, 水田	灰野
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

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	
	無機化学概論	2	2							三吉, 藤原(照)	
	有機化学概論	2	2							山本	
	化学特別研究	2	6	2	6	2	6	2	6	各教員	
選	現代英語			2	2					小島	
	構造物理化学Ⅰ	2	2							井口	
	構造物理化学Ⅱ			2	2					開講しない	
	固体物性化学Ⅰ	2	2							開講しない	
	固体物性化学Ⅱ			2	2					開講しない	
	錯体化学Ⅰ	2	2							三吉, 水田	
	錯体化学Ⅱ			2	2					三吉, 水田	
	分析化学Ⅰ	2	2							藤原(照) , 塚原	
	分析化学Ⅱ			2	2					藤原(照) , 塚原	
	構造有機化学Ⅰ	2	2							開講しない	
	構造有機化学Ⅱ			2	2					開講しない	
	光機能化学			2	2					開講しない	
	放射線反応化学	2	2							中島(自然科学研究支援開発センター)	
	量子化学			2	2					相田, 石橋	
	集積化学	2	2							開講しない	
	反応物理化学Ⅰ	2	2							山崎	
	反応物理化学Ⅱ			2	2					山崎	
	反応有機化学Ⅰ	2	2							小島(旧:天然物有機化学Ⅰ)	
	反応有機化学Ⅱ			2	2					安倍(旧:天然物有機化学Ⅱ)	
	有機典型元素化学Ⅰ	2	2							開講しない(旧:反応有機化学Ⅰ)	
	有機典型元素化学Ⅱ			2	2					開講しない(旧:反応有機化学Ⅱ)	
	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	2							神沼(予定) , 相田	
	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, 速水	
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	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	
反応有機化学セミナー		1	2	1	2	1	2	1	2	安倍, 小島(旧:天然物有機化学セミナー)	
有機典型元素化学セミナー		1	2	1	2	1	2	1	2	山本, 河内(旧:反応有機化学セミナー)	
集積化学セミナー		1	2	1	2	1	2	1	2	田林, 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)	
放射線反応化学セミナー		1	2	1	2	1	2	1	2	中島(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			山本	
特別講義		自己組織化と機能性ナノ材料(1単位, 前期集中)									相田卓三(東京大学)
	分子分光光学特論(1単位, 後期集中)									富宅喜代一(神戸大学)	
	生物無機化学特論(1単位, 後期集中)									鈴木正樹(金沢大学)	

・平成19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Ⅰ	井口	光吸収・発光・散乱、Maxwell 方程式、時間を含む摂動論、群論
錯体化学Ⅰ	三吉, 水田	金属錯体の結合、配位数と価電子数、18 電子則、角重なり模型
錯体化学Ⅱ	三吉, 水田	有機金属錯体の反応
分析化学Ⅰ	藤原(照), 塚原	水溶液, ミセル溶液, 非水溶媒, 溶媒和, ソルバトクロミズム
分析化学Ⅱ	藤原(照), 塚原	溶液内反応, 溶媒和, 溶媒効果, 表面・界面, 蛍光分光分析法
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	小島	立体選択性, 不斉合成反応
反応有機化学Ⅱ	安倍	有機反応機構, 中間体の化学, 有機光反応, 励起状態有機分子の化学, 有機合成
放射線反応化学	中島	放射線, 放射線利用
量子化学	相田, 石橋	量子力学, 量子化学, 分子軌道法, 分光法
反応物理化学Ⅰ	山崎	微視的可逆性, 詳細釣り合いの原理, RRKM 理論, 遷移状態理論
反応物理化学Ⅱ	山崎	反応速度論, 化学反応動力学
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, 励起クラスター, イオンクラスター, エネルギー移動
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, 関係データベース Postgresql
物理化学概論	相田, 田林	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	三吉, 藤原(照)	単な分子の分子軌道による結合と構造の解釈, 溶液化学, 溶媒和イオンの構造
有機化学概論	山本	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

・各研究グループの在籍学生数

(平成19年 4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	1	0	0	0	0	0
固体物性化学研究グループ	5	0	1	0	2	0	1*
錯体化学研究グループ	4	4	0	0	0	0	0
分析化学研究グループ	3	1	0	0	1	0	1
構造有機化学研究グループ	3	4	0	0	1	0	0
光機能化学研究グループ	2	0	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	0	1	1	0	0	0	0
有機典型元素化学研究グループ	5	5	1	2	1	0	0
反応有機化学研究グループ	5	7	0	0	2	0	0
集積化学研究グループ	4	3	0	0	0	0	0
量子化学研究グループ	2	4	2	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	35	30	5	3	8	2	2

* D6

・博士課程修了者の進路

(平成20年5月現在)

平成20年度研究員											
	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(10)	21(8)	0	1(1)	22(9)	1(0)	0	1(0)	6(1)	0	1(0)
後期修了*	7(1)	1(0)	1(1)	0	2(1)	0	1(0)	1(0)	－	1(0)	3(0)

() 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⁾	1 1 8
博士課程後期 ⁽²⁾	2 9
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	1 3

(2007(H19)年度の発表について記載：2007(H19)年4月から2008(H20)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⁾	1 2
博士課程後期 ⁽²⁾	1 9
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	2

(2007(H19)年度の発表について記載：2007(H19)年4月から2008(H20)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。

迫平 洋輔	新規リン試剤を触媒として用いる反応の検討
堺 真通	電子衝撃法を用いたピリジン環化合物の特異的解離
富岡 正雄	リン・ホウ素間に二重結合性を有するメタラホスフィノボランモノマーの合成と構造的特徴
中川 玲	新規ケイ素およびリン試剤を利用した高Z選択的オレフィン合成の研究と応用
中津留 可乃	抽出剤混合逆ミセルを用いた有価金属の選択的抽出分離とナノ粒子資源化
下赤 卓史	凝縮状態にあるメタノールの水素結合様式と振動バンド形の解析
伊東 孝文	L-フェニルアラニンとその水和クラスターの超音速ジェットレーザー分光
井上 祐太	連続的 Michael 反応を鍵反応とした Plukenetione A の中心骨格合成
宮地 ちひろ	4 族と 10 族の金属中心による共同的基質活性化を利用した高効率なダブルホスフィニレーション反応触媒系の開発
碓田 真也	Determination of the nascent vibrational distributions of $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ generated in the photodissociation of ozone. (オゾン光解離で生成する $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ の初期振動分布決定)
青谷 朋之	大環状ポリホスフィノフェロセンの合成と反応性 ～金属への配位による大環状骨格の立体制御～
飯田 裕美	光回復酵素の反応機構についての理論化学的研究
TRIANA WIDIANTI	リン酸基を有するプロリン誘導体の合成と不斉有機触媒能に関する研究
高柳 麗	ブタジインで結合したクレフト型テトラキスボルフィリン分子の合成と自己集合
音成 洋彰	カルボジホスホラン $Ph_3P=C=PPh_3$ とパラジウム及び白金との錯体合成と C-H 結合、P-C 結合活性化反応
塩 秀美	金属配位により集合したカリックス[4]アレーントリプルヘリケイトのキラルゲスト包接による分子不斉の誘起
岩本 明久	新規不斉有機触媒を用いた不斉 Michael 反応及びフラン環形成反応による不斉 4 級炭素の構築に関する研究
佐原 伸哉	ベンゾジチオフェン骨格を有するかさ高い新規配位子の合成とその応用
前田 晃宏	時間分解赤外分光法による二酸化チタン光触媒の研究
佐藤 仁美	π 供与性基を有する嵩高い新規配位子の開発と典型元素化合物への応用
鳥龍 明子	1) 渦鞭毛藻 <i>Heterocapsa circularisquama</i> から単離された二枚貝致死活性物質の部分構造解析 2) 酵母菌 <i>Cryptococcus</i> sp S-2 から単離されたリパーゼによる 1,3,5-ペンタントリオール類の不斉エステル化反応に関する研究
平野 雄一	超原子価化合物の合成および結合エネルギー評価系の構築を目的とした窒素系新規配位子の合成とその応用
宮本 秀範	グリシンの水和構造についての理論化学的研究
榊原 裕	カロテノイド、アスタキサンチンの熱異性化における溶媒効果に関する研究
財間 政智	<i>o</i> -ボリル (ヒドロシリル) ベンゼン類の合成と反応

坂元 克司	テトラキスカリックス[5]アレーンとダンベル型フラーレンの連続的ホスト-ゲスト相互作用を利用した超分子集合体の会合挙動
西 沙織	カリックス[4]アレーンとポルフィリンを二つのアミド結合で架橋したホスト分子の有機小分子に対する包接挙動
田中 俊広	超原子価 4 配位酸素化合物(10-0-4) 合成の試み

1-3-6 博士学位

授与年月日を〔 〕内に記す。

山根 庸平 〔平成 20 年 3 月 4 日〕(甲)

Order-disorder phase transition and ionic conductivity in solid solution (CsHSO₄)-(CsH₂PO₄) system and RbPbF₃

((CsHSO₄)-(CsH₂PO₄)系固溶体と RbPbF₃ における秩序-無秩序相転移とイオン伝導性)

主査：井上 克也 教授

副査：相田 美砂子 教授，藤原 照文 教授，山田 康治 (日大) 教授

田邊 和久 〔平成 20 年 3 月 19 日〕(乙)

Studies Related to the Synthesis of the Core Structure of Daphnezomine C

(Daphnezomine C の骨格合成に向けた研究)

主査：小島 聡志 准教授

副査：安倍 学 教授，灰野 岳晴 教授，山本 陽介 教授

松村 修二 〔平成 20 年 3 月 19 日〕(乙)

MO Calculation Studies on Selectivity in Ring-Formation Involving Michael Addition

(分子軌道計算によるマイケル付加を経た環形成における選択性に関する研究)

主査：小島 聡志 准教授

副査：相田 美砂子 教授，安倍 学 教授，山本 陽介 教授

柏木 公一 〔平成 20 年 3 月 23 日〕(甲)

Study of the Catalytic Dimerization of Acrylonitrile using Ruthenium-Based Catalyst

(ルテニウム系触媒を用いるアクリロニトリル触媒二量化反応の研究)

主査：小島 聡志 准教授

副査：三吉 克彦 教授，山本 陽介 教授，安倍 学 教授

増原 直治 〔平成 20 年 3 月 23 日〕(甲)

The Studies on Engineering the Structures and Physical Properties of Crystalline Solids by the Assembly of Versatile Molecular Building Units

(多様な分子ビルディングユニットの集積化による結晶個体の構造と物性の設計に関する研究)

主査：井上 克也 教授

副査：三吉 克彦 教授，灰野 岳晴 教授

田中 正洋 〔平成 20 年 3 月 23 日〕(甲)

Synthesis and Property of Functional Assembly Based on 3,5-Diphenylisoxazole

(3,5-ジフェニルイソオキサゾールを基盤とした機能性分子集合体の合成と性質)

主査：灰野 岳晴 教授

副査：山本 陽介 教授，山本 陽介 教授，深澤 義正 教授

山口 虎彦 [平成 20 年 3 月 23 日] (甲)

Development of a Novel Tridentate Ligand with the Thioxanthene Skeleton and Its Application to Synthesis of Hypervalent Compounds

(チオキサンテン骨格を有する新規な三座配位子の開発とその超原子価化合物合成への応用)

主査：山本 陽介 教授

副査：安倍 学 教授，灰野 岳晴 教授

姜 新東 [平成 20 年 3 月 23 日] (甲)

Synthesis, Isomerization, and Reactivity of Hypervalent Pentacoordinate Spirophosphoranes and Spiroarsoranes Bearing Bulky Bidentate Ligands

(嵩高い二座配位子を持つ五配位スピロ型リン及びヒ素化合物の合成、異性化、反応性)

主査：山本 陽介 教授

副査：三吉 克彦 教授，灰野 岳晴 教授，小島 聡志 准教授

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19年度のTA

氏名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
片岡 紘子	化学実験	分析化学	D3
渡辺 信嗣	化学実験	反応物理化学	D1
沖本 真広	化学実験	有機典型元素化学	D2
山道 秀映	化学実験	有機典型元素化学	D2
中辻 淳也	化学実験	有機典型元素化学	D1
東川 大志	化学実験	固体物性化学	D1
山田 朋範	化学実験	量子化学	D1
坂宗 和明	化学実験	量子化学	D2
前田 俊樹	化学実験	量子化学	D1
下赤 卓史	化学実験	集積化学	M2
堺 真道	化学実験	集積化学	M2
平野 雄一	化学実験	有機典型元素化学	M2

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：4月16日（月）15:30

場所：理学部 B101 教室

講師：Vitalii Berdinskii 教授（Orenburg State University）

演題：Theoretical Studies for Spin Frustrations and Spin Correlations in Mn and Cr Containing High Spin Molecular Magnets

担当：固体物性化学研究グループ

日時：4月16日（月）16:30

場所：理学部 B101 教室

講師：Roman Morgunov 教授（Institute of Problems of Chemical Physics）

演題：Spin Solitons in Molecular Magnetic Materials With The Chiral Structure

担当：固体物性化学研究グループ

日時：12月7日（月）15:00

場所：理学部 C104 教室

講師：Mohamedally Kurmoo 博士（Universite Louis Pasteur Strasbourg）

演題：Multifunctional Materials: Molecular Porous Magnets

担当：固体物性化学研究グループ

日時：2007年5月22日(火) 15:00～16:30

場所：理学部 E002 講義室

講師：相田 卓三 教授（東京大学工学研究科）

演題：機能性ナノマテリアル創成の分子プログラミング

担当：有機典型元素研究グループ

日時：2008年2月22日(金) 15:00～16:30

場所：理学部 B305 号室

講師：Roger Guillard 教授（Institut de Chimie Moléculaire de l'Université de Brougogne）

演題：Exceptional affinity of nanostructured organic-inorganic hybrid materials towards gases due to the confinement of copper complexes

担当：有機典型元素研究グループ

日時：2008年3月10日(月) 16:00～17:30

場所：理学部 E210 号室

講師：Mats Tilset 教授（University of Oslo）

演題：Platinum complexes for reactions with hydrocarbons: From molecular species to macromolecular structures

担当：有機典型元素研究グループ

日時：2007 年 7 月 23 日

場所：理学部 E210

講師：Sibi 教授

演題：A Tale from the Start: Stereoselective Radical Reactions using Chiral Auxiliaries, Chiral Lewis Acids and Organocatalysts

担当：反応有機研究グループ

日時：2007 年 11 月 20 日

場所：理学部 E002

講師：Meyer 教授

演題：Tripodal Carbene Chelators for Small Molecule Activation at Electron-Rich Iron and Cobalt Centers

担当：反応有機研究グループ

日時：2007 年 11 月 20 日

場所：理学部 E301

講師：Siehl 教授

演題：Experimental and Computational NMR Spectroscopy

担当：反応有機研究グループ

日時：2008 年 11 月 17 日

場所：理学部 E002

名称：有機合成化学協会中国四国支部奨励賞受賞講演会並びに特別招待講演会（主催：有機合成化学協会中国四国支部）

担当：反応有機研究グループ

・ 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。数理分子生命科学研究科（化学系）と共催で開催している。平成19年度の世話人は藤原好恒准教授である。

平成19年度の講師と題目を次にあげる。

第72回 2007年6月11日

『超原子価15族元素化合物の研究』

松川 史郎 （化学専攻分子反応化学講座）

・ セミナー等開催実績

中国四国化学と工業懇話会第46回産学連携セミナー

日時：2007年4月13日

場所：広島大学理学部

担当：山本 陽介

第57回有機反応化学討論会開催

日時：2007年9月29日－30日

場所：広島大学理学部

担当：山本 陽介，河内 敦，松川 史郎

第3回分子情報ダイナミクス研究会を開催

日時：2007年8月30～31日

場所：ホテル阪急エキスポパーク(大阪)

主催：分子情報ダイナミクス研究会

担当：反応有機研究グループ

CBI 学会 2007 年大会

日時： 2007 年 10 月

場所： 理学部

担当： 相田美砂子

第4回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム

日時： 2007 年 12 月

場所： 広島大学学士会館

担当： 相田美砂子

第5回 QuLiS シンポジウム「融合領域の科学」

日時： 2008 年 3 月

場所： 広島大学学士会館

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（2007(H19)年1月～12月）と国際会議・国内学会（2007(H19)年4月～2008(H20)年3月）における発表件数の総数を示す。ただし、国内学会の発表件数は、招待・依頼・特別講演のいずれかに該当するものとした。

項 目	数
論文	79
著書	6
総説	2
国際会議	58
国内学会（招待・依頼・特別講演）	24
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23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 27 回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞	灰野 岳晴
2007 年度 (平成 19 年度)	広島大学学長賞	江幡 孝之
2007 年度 (平成 19 年度)	第 25 回日本化学会学術賞	江幡 孝之
2007 年度 (平成 19 年度)	日本分析化学会フローインジェクシ ョン分析研究懇談会フローインジェ クション分析学術賞	藤原 照文
2007 年度 (平成 19 年度)	野副記念奨励賞	安倍 学

・ 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19年度のRA

大学院生氏名	東川 大志	所属研究グループ	固体物性化学
学年	D 1	指導教員	井上 克也 教授
研究プロジェクト名	キラル磁性体の合成と物性		

大学院生氏名	渡辺 信嗣	所属研究グループ	反応物理化学
学年	D 1	指導教員	山崎 勝義 教授
研究プロジェクト名	振動エネルギー移動過程の速度決定と機構解明		

大学院生氏名	前田 俊樹	所属研究グループ	量子化学
学年	D 1	指導教員	石橋 孝章 准教授
研究プロジェクト名	表面和周波分光による有機薄膜の研究		

大学院生氏名	中辻 淳也	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	超原子価炭素化合物の合成		

大学院生氏名	増原 直治	所属研究グループ	固体物性化学
学年	D 3	指導教員	井上 克也 教授
研究プロジェクト名	強誘電液晶錯体の合成と物性		

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 (准教授), 福原 幸一 (助教)

○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や質量分析計を組み合わせることで, 気相孤立分子やその水素結合クラスター, 分子クラスターイオンの構造, 化学反応, 振動エネルギー緩和の研究を行っている。研究対象分子は芳香族分子, アミノ酸, 包接化合物, カルボン酸, 二酸化炭素などである。加えて, 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。また, 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 19 年度の研究活動は次のとおりである。

まず, 包接化合物として有名なクラウンエーテル (benzo-18-crown-6-ether および dibenzo-18-crown-6-ether) 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, それぞれのエーテルの詳細な電子スペクトルを観測することができ, それにより複数のコンフォメーションの存在が明らかとなった。さらに, 水分子を内包したクラウンエーテルクラスターのレーザー分光にも成功し, その水分子の取り込み様式を明らかにすることができた。また, 包接化合物の一種であるカリックスアレンについて超音速ジェットレーザー分光を行い, 希ガス原子など比較的分子間相互作用の弱いゲスト分子 (Ar, Ne, N₂) を非常に効率的にトラップする能力があることを明らかにした。

また, 質量選別赤外光解離分光法を用いて, プロトン付加ギ酸-水混合クラスターの構造を明らかにした。この系の質量スペクトルを観測すると, [H₂O•(HCOOH)₅]•H⁺がマジックナンバーとして非常に安定に存在していることがわかった。このクラスターの赤外光解離スペクトルを観測した結果, このクラスターの特異的な安定性は, ギ酸 5 分子で形成された環状クラスターのキャビティー内にヒドロニウムイオン H₃O⁺が安定にトラップされた結果であることが明らかとなった。また, 二酸化炭素クラスターイオン(CO₂)_n⁺, 二硫化炭素クラスターイオン(CS₂)_n⁺の赤外光解離スペクトルを観測し, これらのイオンがダイマーイオンコアを持つこと, そのイオンコアの構造がサイズにより変化することがわかった。

○発表原著論文

Y. Yamada, Y. Katsumoto, and T. Ebata (2007) Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study on the vibrational energy flow in isolated molecules and clusters. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 1170–1185 (invited, PCCP の表紙を飾る)。

T. Ebata, Y. Hodono, T. Ito, and Y. Inokuchi (2007) Electronic spectra of jet-cooled calix[4]arene and its van der Waals clusters: Encapsulation of a neutral atom in a molecular bowl. *J. Chem. Phys.* **126**, 141101.

Y. Inokuchi, Y. Kobayashi, T. Ito, and T. Ebata (2007) Conformation of L-tyrosine studied by fluorescence-detected UV-UV and IR-UV double-resonance spectroscopy. *J. Phys. Chem. A* **111**, 3209–3215.

R. Kusaka, Y. Inokuchi, and T. Ebata (2007) Laser spectroscopic study on the conformations and hydrated structures of benzo-18-crown-6-ether and dibenzo-18-crown-6-ether in supersonic jets. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**, 4452–4459 (invited, PCCP の表紙を飾る).

A. Furuya, M. Tsuruta, F. Misaizu, K. Ohno, Y. Inokuchi, K. Judai, and N. Nishi (2007) Infrared photodissociation spectroscopy of $\text{Al}^+(\text{CH}_3\text{OH})_n$ ($n = 1-4$). *J. Phys. Chem. A* **111**, 5995–6002.

○国際会議

T. Ebata: Conformation and photodynamics of amino acids and their hydrated clusters studied by time and frequency domain spectroscopy. International Conference on Laser Applications in Life Sciences (June 11–14, 2007, Moscow, Russia) (招待講演)

T. Ebata: Laser spectroscopic study on the conformation and the encapsulation of functional molecules in supersonic jets. Second Russian-Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (September 11–14, 2007, Orenburg, Russia) (招待講演)

○国内学会

江幡孝之: レーザー二重共鳴振動分光による機能性分子や分子クラスターの構造の解明。第 8 日本化学会春季年会 学術賞受賞講演 (2008 年 3 月, 東京) (特別講演)

江幡孝之: 機能性分子の超音速ジェット分光 – 新たな機能の発見を目指して –。(2007 年 9 月, 仙台) (招待講演)

井口佳哉: 分子クラスターイオンの赤外光解離分光。2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (依頼講演)

井口佳哉: 二酸化炭素クラスターイオンの赤外光解離分光。第 1 回分子科学討論会 (仙台) 2007 (2007 年 9 月, 仙台) (一般講演)

小林悠亮, 井口佳哉, 伊東孝文, 江幡孝之: 超音速ジェットレーザー分光による L-チロシン及びその水和クラスターの安定コンフォーマーの研究。第 1 回分子科学討論会 (仙台) 2007 (2007 年 9 月, 仙台) (一般講演)

日下良二, 井口佳哉, 江幡孝之: レーザー分光を用いた超音速ジェット中の Benzo-18-crown-6-ether と Dibenzo-18-crown-6-ether のコンフォーマーと水和構造の研究。第 1 回分子科学討論会 (仙台) 2007 (2007 年 9 月, 仙台) (一般講演)

小林悠亮, 井口佳哉, 伊東孝文, 江幡孝之: 超音速ジェットレーザー分光による L-チロシン及びその水和クラスターの安定コンフォーマーの研究。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 広島) (一般講演)

日下良二, 井口佳哉, 川崎謙司, 江幡孝之: レーザー分光を用いた超音速ジェット中の Benzo-18-crown-6-ether と Dibenzo-18-crown-6-ether のコンフォーマーと水和構造の研究。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 広島) (一般講演)

西本孝太郎, 本玉直哉, 井口佳哉, 江幡孝之: 超音速ジェットレーザー分光を用いたカリックスアレンの包接能力の検証。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 広島) (一般講演)

本玉直哉, 西本孝太郎, 井口佳哉, 江幡孝之, C. Juvet, C. Dedonder-Lardeux: カリックスアレン包接クラスターの超音速ジェットレーザー分光。日本化学会第 88 春季年会 (2008) (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)

伊東孝文, 井口佳哉, 江幡孝之: アミノ酸水和クラスターにおける双性イオンの存在の検証とその構造。第 1 回分子科学討論会 (仙台) 2007 (2007 年 9 月, 仙台) (ポスター)

○産学連携実績

福原幸一，第46回中国四国産学連携化学フォーラム(2007年4月13日，広島)

○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

科学研究費補助金 萌芽研究「超音速ジェット・量子化学計算を用いたカリックスアレンのキラルタリゼーション」(代表) 江幡孝之

科学研究費補助金 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

○受賞状況 (職員)

江幡 孝之，広島大学学長賞 (2007)

江幡 孝之，第25回日本化学会学術賞 (2007)

○受賞状況 (学生)

日下良二 第4回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (広島) 学生賞 「レーザー分光を用いた超音速ジェット中の Benzo-18-crown-6-ether と Dibenzo-18-crown-6-ether のコンフォーマーと水和構造の研究」(2007)

固体物性化学研究グループ

スタッフ 井上 克也 (教授), 速水 真也 (准教授), 秋田 素子 (助教)

○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。

外場誘起相転移化合物に関する研究：スピントロニクス、原子価異性、磁性体などの双安定性を用いることにより、光や磁場あるいは電場などの外場誘起相転移現象を観測することを目的としている。またその熱力学パラメーターおよびトンネリング速度などを求め、物性評価を行うことにより、外場スイッチング分子を構築する上での設計指針を明らかにすることができる。

強誘電性金属錯体液晶の開発：強誘電性液晶はその特異な構造と電場応答性から、液晶材料のみならず、強誘電メモリ材料、非線形光学材料など種々の次世代電子デバイスの重要な基幹材料の一つである。一方、金属錯体を組み込んだ金属錯体液晶は、その機能性から興味を持たれるが発展途上の分野である。そこで金属錯体特有の動的電子状態に起因した強誘電性の発現および液晶性を兼ね備えた多機能性化合物として、動的電子状態に基づいた金属錯体液晶の研究開発を行っている。

○発表原著論文

- Spin-density distribution in the partially magnetized organic quantum magnet F2PNNNO, Zheludev, A., Garlea, V. O., Nishihara, S., Hosokoshi, Y., Cousson, A., Gukasov, A., Inoue, K., Phys. Rev. B, 2007, 75, 104427.
- Synthesis, crystal structure and magnetic properties of a cyclic dimer of [$\{\text{Co}(\text{hfac})_2\} \cdot \text{BNOt-Bu}\}_2$, Y. Numata, K. Inoue, J. Mag. Mag. Mat., 2007, 310, 1847-1848.
- Magnetic phase diagram of the quasi-two-dimensional S=1 antiferromagnet F2PNNNO, Tsujii H, Andraka B, Hosokoshi Y, Inoue K, Takano Y, J. Mag. Mag. Mat., 2007, 310, E415-E417.
- Effect of pressure on a chiral two-dimensional ferrimagnet, K. Iriguchi, Y. Komorida, I. Akiyama, M. Mito, J. Kishine, H. Deguchi, Y. Yoshida, K. Inoue, J. Phys. Soc. Jpn., 2007, 76, Suppl. A, 192-193.
- Masaki Atsuchi, Hiroyuki Higashikawa, Yusuke Yoshida, Satoru Nakashima, Katsuya Inoue (2007) Novel 2D interpenetrated structure and occurrence of the spin-crossover phenomena of assembled complexes, $\text{Fe}(\text{NCX})_2(\text{bpp})_2$ (X = S, Se, BH_3 ; bpp = 1,3-bis(4-pyridyl)propane), *Chemistry Letters*, **36**, 1064-1065.
- Hiroyuki Higashikawa, Kazuki Okuda, Jun-ichiro Kishine, Naoji Masuhara, Katsuya Inoue (2007) Chiral effects on magnetic properties for chiral and racemic WV-CuII Prussian blue analogues, *Chemistry Letters*, **36**, 1022-1023.
- Shinya Hayami, Reiko Moriyama, Aya Shuto, Yonezo Maeda, Kazuchika Ohta, Katsuya Inoue (2007) Spin Transition at the Mesophase Transition Temperature in a Cobalt(II) Compound with Branched

- Alkyl Chains, *Inorganic Chemistry*, **46**, 7692-7694.
- Youhei Numata, Katsuya Inoue, Nikolai Baranov, Mohamedally Kurmoo, Koichi Kikuchi (2007) Field-induced ferrimagnetic state in a molecule-based magnet consisting of a CoII ion and a chiral triplet bis(nitroxide) radical, *Journal of the American Chemical Society*, **129**, 9902-9909.
- Hitoshi Kumagai, Motoko Akita-Tanaka, Katsuya Inoue, Kazuyuki Takahashi, Hayao Kobayashi, Serge Vilminot, Mohamedally Kurmoo (2007) Metal-Organic Frameworks from Copper Dimers with cis- and trans-1,4-Cyclohexanedicarboxylate and cis,cis-1,3,5-Cyclohexanetricarboxylate, *Inorganic Chemistry*, **46**, 5949-5956.
- Shinya Hayami, Natsuko Motokawa, Aya Shuto, Reiko Moriyama, Naoji Masuhara, Katsuya Inoue, Yonezo Maeda (2007) Spin-crossover iron(II) compounds with liquid-crystal properties, *Polyhedron*, **26**, 2375-2380.
- Bin Zhang, Zheming Wang, Yan Zhang, Hayao Kobayashi, Mohamedally Kurmoo, Takehiko Mori (2007) Francis L. Pratt, Katsuya Inoue, Daoben Zhu, Dual-function molecular crystal containing the magnetic chain anion $[\text{Fe}^{\text{III}}(\text{C}_2\text{O}_4)\text{Cl}_2]_n$, *Polyhedron*, **26**, 1800-1804.
- Youhei Numata, Katsuya Inoue (2007) Studies for direction dependences of magnetizations and magnetic structure of chiral molecule-based metamagnet, $[\text{Mn}(\text{hfac})_2]\cdot\text{BNO}^*$, *Chemistry Letters*, **36**, 534-535.
- Bin Zhang, Zheming Wang, Mohamedally Kurmoo, Song Gao, Katsuya Inoue, Hayao Kobayashi (2007) Guest-induced chirality in the ferrimagnetic nanoporous diamond framework $\text{Mn}_3(\text{HCOO})_6$, *Advanced Functional Materials*, **17**, 577-584.
- Yuko Hosokoshi, Yusaku Konishi, Sadafumi Nishihara, Katsuya Inoue (2007) Magnetic properties of a spin-1 ladder under pressure, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **310**, 420-422.
- Jun-ichiro Kishine, Katsuya Inoue, Koichi Kikuchi (2007) Static and dynamical anomalies caused by chiral soliton lattice in molecular-based chiral magnets, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **310**, 1386-1388.
- Motoko Akita-Tanaka, Hitoshi Kumagai, Ashot Markosyan, Katsuya Inoue (2007) Synthesis and characterization of a novel chiral molecular-based ferrimagnet prepared from a chiral nitronyl nitroxide radical and manganese(II) ion, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **80**, 204-207.
- Wen-Tong Chen, Guo-Cong Guo, Ming-Sheng Wang, Gang Xu, Li-Zhen Cai, Takashi Akitsu, Motoko Akita-Tanaka, Akiyuki Matsushita, Jin-Shun Huang (2007) Self-Assembly and Characterization of Cyano-Bridged Bimetallic $[\text{Ln}-\text{Fe}]$ and $[\text{Ln}-\text{Co}]$ Complexes ($\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}$ and Sm). Nature of the Magnetic Interactions between the Ln^{3+} and Fe^{3+} Ions., *Inorganic Chemistry*, **46**, 2105-2114.
- Shinya Hayami, Natsuko Motokawa, Aya Shuto, Naoji Masuhara, Takehiro Someya, Yoshihiro Ogawa, Katsuya Inoue, Yonezo Maeda (2007) Photoinduced Spin Transition for Iron(II) Compounds with Liquid-Crystal Properties, *Inorganic Chemistry*, **46**, 1789-1794.
- Naoji Masuhara, Shinya Hayami, Natsuko Motokawa, Aya Shuto, Katsuya Inoue, Yonezo Maeda (2007) Crystal structure and magnetic property of two novel 1-D cobalt(II) assemblies, *Chemistry Letters*, **36**, 90-91.
- Zheming Wang, Bin Zhang, Katsuya Inoue, Hideki Fujiwara, Takeo Otsuka, Hayao Kobayashi, Mohamedally Kurmoo (2007), Occurrence of a Rare 49-66 Structural Topology, Chirality, and Weak Ferromagnetism in the $[\text{NH}_4][\text{M}^{\text{II}}(\text{HCOO})_3]$ ($\text{M} = \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}$) Frameworks, *Inorganic Chemistry*, **46**, 437-445.

- Katsuya INOUE, Magnetic and Crystal Chirality-Structures and Properties of Transparent Chiral Magnets-, Novosibirsk, Russia, 2007.6.30 (招待講演)
- Katsuya INOUE, MAGNETS IN WONDERLAND-Structures and Properties of Transparent Chiral Magnets-, Orenburg, Russia, 2007.9.12 (招待講演)
- Katsuya INOUE, Magnetism in Molecular Systems, Mumbai, India, 2008.3.7 (招待講演)
- Katsuya INOUE, MAGNETS IN WONDERLAND-Structures and Properties of Transparent Asymmetry Magnets-, Mumbai, India, 2008.3.8 (招待講演)
- Katsuya INOUE, Multiferroic Materials, Mumbai, India, 2008.3.9 (招待講演)
- Shinya Hayami, Multifunction materials with long alkyl chains, Mini Symposium on Metallomesogens, Ueda, 2007.10.10. (招待講演)
- Shinya Hayami, Molecular functions based on intermolecular interactions, 分子情報ダイナミクス研究会, Osaka, 2007.8.30-31. (招待講演)
- Shinya Hayami, Multifunctions Materials with Long Alkyl Chains, ACC, Kuala Lumpur, 2007.8.23-25. (一般講演)
- Shinya Hayami, Reiko Moriyama, Yonezo Maeda, Magnetic and Mesogenic Property for Cobalt(II) Compounds with Long Alkyl Chains, ACCC, Okazaki, 2007.7.29-8.2. (ポスター)
- Hiroyuki Higashikawa, Katsuya Inoue, Magnetic Structure of Chiral and Racemic W-Cu Based Prussian Blue Analogs, ACCC, Okazaki, 2007.7.29-8.2. (ポスター)
- Shinya Hayami, Molecular Functions Based on Intermolecular Interactions, E-MRS, Strasbourg, 2007.5.28-6.1. (一般講演)
- Katsuya Inoue, Yusuke Yoshida, Hiroyuki Higashikawa, Hirohumi Honda, Junichiro Kishine, Koichi Kikuchi, Masaki Mito, Synthesis, Structure and Magnetism of Chiral Molecule-Based Magnets" E-MRS, Strasbourg, 2007.5.28-6.1. (一般講演)

○国内学会

- 速水真也、分子間相互作用に基づいた金属錯体のスピン転移挙動、日本化学会第 88 春季年会、東京、2008.3.26-30. (若い世代の特別講演)
- 浦上大輔、東川大志、速水真也、秋田素子、井上克也、希土類金属とキラルな配位子を含むブルシアンプル型錯体の合成と測定、日本化学会第 88 春季年会、東京、2008.3.26-30. (ポスター)
- 小島由寛、速水真也、秋田素子、井上克也、市原正寛、太田和親、石川謙、竹添秀男、動的電子状態に起因した強誘電性金属錯体液晶の創製、日本化学会第 88 春季年会、東京、2008.3.26-30. (ポスター)
- 村田和久、速水真也、秋田素子、井上克也、長鎖アルキル駆動型 Co(II)錯体のスピン転移現象、日本化学会第 88 春季年会、東京、2008.3.26-30. (ポスター)
- 園尾将人、秋田素子、速水真也、井上克也、高スピンニトロキシドラジカルを架橋配位子とする有機磁性体の合成と物性、日本化学会第 88 春季年会、東京、2008.3.26-30. (ポスター)
- 速水真也、動的電子状態に基づいた強誘電性金属錯体液晶、エレクトロニクス基礎研究所ワークショップ、大阪、2008.3.11.(依頼講演)
- 井上克也、キラル磁性体の物性と展望、学術創成研究会、仙台、2008.3.14-16. (依頼講演)
- 速水真也、分子間相互作用に基づいた金属錯体の機能発現、学術創成研究会、仙台、2008.3.14-16. (依頼講演)
- 秋田素子、井上克也、 π 共役系トリスニトロキシドラジカルの変移金属錯体の構造と磁気的性質、有機 π 電子系シンポジウム、東京、2007.12.7-8. (ポスター)

- 浦上大輔、東川大志、速水真也、秋田素子、鈴木孝至、井上克也、有機・無機ハイブリット化合物のマルチフェロイクスへの展開、ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム、広島、2007.12.1-2. (一般講演)
- 小島由寛、速水真也、秋田素子、井上克也、動的電子状態に基づいた強誘電性液晶の創製、ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム、広島、2007.12.1-2. (一般講演)
- 園尾将人、秋田素子、速水真也、井上克也、ニトロキシドラジカルを架橋配位子とする新規キラル磁性体の合成と磁氣的性質、ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム、広島、2007.12.1-2. (一般講演)
- 村田和久、速水真也、秋田素子、井上克也、長鎖アルキル駆動型 Co(II)錯体のスピン転移現象、ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム、広島、2007.12.1-2. (一般講演)
- 東川大志、井上克也、キラルアミドを用いた W-Cu シアノ架橋型錯体の合成と物性、日本化学会西日本大会、岡山、2007.11.10-11. (一般講演)
- 浦上大輔、東川大志、速水真也、秋田素子、鈴木孝至、井上克也、マルチフェロイクスを指向した有機・無機ハイブリット化合物の合成と測定、日本化学会西日本大会、岡山、2007.11.10-11. (一般講演)
- 園尾将人、秋田素子、速水真也、井上克也、高スピンニトロキシドラジカルを架橋配位子とする有機磁性体の合成と物性、日本化学会西日本大会、岡山、2007 年 11 月 10-11 日. (ポスター)
- 小島由寛、本川菜津子、速水真也、秋田素子、井上克也、強誘電性金属錯体液晶の合成と物性、日本化学会西日本大会、岡山、2007 年 11 月 10-11 日 (一般講演).
- 速水真也、金属錯体液晶の開発、JST Innovation Bridge 広島大学研究発表会、東京、2007.10.31. (招待講演)
- 秋田素子、井上克也、 π -共役系トリスニトロキシドラジカルのコバルト(II)錯体の構造と磁氣的性質、第 37 回構造有機化学討論会、札幌、2007.10.27-29. (ポスター)
- 速水真也、マルチフェロイック化合物の開発、錯体誘電研究会、札幌、2007.10.12-13. (依頼講演)
- 速水真也、森山麗子、前田米蔵、井上克也、コバルト(II)化合物のスピン転移現象、錯体化学討論会、名古屋、2007.9.25-27. (一般講演)
- 東川大志、井上克也、キラルアミドおよび W(V)を含むキラル磁性体の合成と物性、錯体化学討論会、名古屋、2007.9.25-27. (一般講演)
- 首藤綾、前田米蔵、速水真也、terpy 骨格を有する Co(II)錯体の相転移現象、錯体化学討論会、名古屋、2007.9.25-27. (ポスター)
- 本田博文、東川大志、井上克也、メタ磁性を示す 2 次元キラル分子磁性体におけるキラルなスピン構造の推測、錯体化学討論会、名古屋、2007.9.25-27. (一般講演)
- 長沢健司、速水真也、小島由寛、秋田素子、井上克也、強誘電性金属錯体液晶の構築および誘電特性、錯体化学討論会、名古屋、2007.9.25-27. (ポスター)
- 中尾康次、速水真也、井上克也、電場応答性スピנקロスオーバー化合物の合成と性質、錯体化学討論会、名古屋、2007.9.25-27. (ポスター)
- 速水真也、浦上大輔、井上克也、有機-無機ハイブリッド化合物のマルチフェロイック特性、放射化学討論会、静岡、2007.9.24-26. (一般講演)
- 速水真也、中尾康次、井上克也、スピנקロスオーバー鉄化合物の光誘起スピン転移現象、配位化合物の光化学討論会、兵庫、2007.8.7-9. (一般講演)
- 速水真也、柔軟な配位空間場が創製する金属錯体の物性現象、特定領域-配位空間の化学-全体会議、福岡、2007.5.21. (一般講演)
- 速水真也、強誘電性金属錯体液晶、錯体誘電研究会、福岡、2007.5.21. (依頼講演)
- 速水真也、新しいマルチフェロイック周辺化合物の合成と物性、-複合強秩序相の物理と化学-

研究会、広島、2007.5.7-8. (一般講演)

東川大志、井上克也、吉田祐輔、本田博文、岸根順一郎、キラル磁気構造を持つ新キラル磁性体の合成と物性、-複合強秩序相の物理と化学-研究会、2007.5.7-8. (一般講演)

○産学官連携実績

速水真也、ナノパターンニングの強誘電評価、東陽テクニカとの共同研究

速水真也、強誘電デバイスの作製、山中ヒューテックとの共同研究

○国際共同研究・国際会議開催実績

井上克也、2nd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, 副組織委員長 Novosibirsk, Russia, 2007.6.28-7.2

井上克也、2nd, Russia-Japan Seminar “Spin Chemistry”, 国際組織委員, Orenburg, Russia, 2007.9.12-14

井上克也、日本化学会春期年会、特別企画「シングレットビラジカルの化学と展望」、提案代表者、2007.3.30

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-

○特許公報

速水真也、井上克也、有機金属錯体、その製造方法、該有機金属錯体溶液組成物、液晶素材、および、液晶素子、ならびに、非破壊読み出し可能メモリー素子、特願 2007-271574, 平成 19 年 10 月 18 日

速水真也、井上克也、有機金属錯体、その製造方法、該有機金属錯体溶液組成物、液晶素材、および、液晶素子、ならびに、非破壊読み出し可能メモリー素子、特願 2007-280325, 平成 19 年 10 月 29 日

○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-

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：九工大工、高木教授、美籾助教授、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-

○他研究機関での講義・客員（2007年4月から2008年3月まで）

速水真也、九州大学先端物質化学研究所 非常勤講師、2007-

○研究助成の受け入れ状況

井上克也、科学研究費補助金基盤研究(A)、「結晶と磁性の Chirality」、(代表者)

井上克也、科学研究費補助金萌芽研究、「絶対不斉合成の研究」、(代表者)

井上克也、JST シーズ発掘研究「高性能有機ラジカル電池の開発」、(代表者)

秋田素子、科学研究費補助金若手研究(B)、「ナノ磁性空間を利用した磁場特異的反応の開拓」、(代表者)

速水真也、NEDO 若手グラント、「強誘電性金属錯体液晶を用いた分子デバイスの開発」、(代表者)

速水真也、村田学術振興財団、「強誘電性金属錯体液晶の分子デバイスの開発」、(代表者)

速水真也、マツダ財団、「強誘電性金属錯体液晶のデバイス開発」、(代表者)

速水真也、三菱化学研究奨励基金、「マルチフェロイクスの創製」、(代表者)

○受賞状況（職員）

速水真也、若い世代の特別講演、分子間相互作用に基づいた金属錯体のスピン転移挙動（2008）

錯体化学研究グループ

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

○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。

高周期典型元素を含む多重結合性化合物は極めて活性であり、付加反応や遷移金属への配位などを容易に起こす。したがって、このような反応性フラグメントを、小分子の骨格変換などの多彩な反応性を示す遷移金属錯体に導入することによって、それらの協同作用・相乗効果を伴った新しい反応性が発現すると期待される。我々は、P-メタラホスフィンイミド ($M-P(=NR)R_2$) と P-メタラホスフィノボラン ($M-P(=BR_2)R$) に注目し、その有効な合成ルートの開発に成功した。また、これら活性フラグメントの協同作用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。さらに、これらを金属配位子として用いた二核金属錯体の合成とその反応性の研究へと展開した。

大環状リン配位子は、対応するアザ配位子に比べて研究が立ち遅れている。この1つの原因は、配位リン原子周りの立体制御が困難な点にある。我々は、キレート鎖としてフェロセンを用いた2座および3座の大環状リン配位子を合成した。この配位子には、それぞれ *syn* および *anti*, および C_3 および C_s の2種の異性体が存在する。通常、これらの異性体間の相互変換は、100℃近くまで加熱することによって初めて可能になるが、この配位子では、 Ag^+ イオンを共存させることにより、室温でも多座配位可能な異性体へ誘導できることを見出した。これにより、通常は困難な大環状リン配位子の立体制御を温和な条件で可能にする糸口が見つかった。

前周期と後周期の金属からなる異核2核錯体は、性質が大きく異なる2つの金属の協同効果により、単核では実現困難な反応が可能になると期待されている。様々な、錯体が合成されてきたが、突出した触媒反応性を示した例は未だ限られている。我々は、4族の金属とPdをOPPh₂で架橋した錯体を合成し、これをHP(O)Ar₂の付加反応触媒として用いた。その結果、既存の単核Pd錯体では、付加する官能基の嵩高さのためアルキンに対して1等量の付加しか起こらないが、我々の用いた異核2核錯体では、ハードな4族金属サイトがP=O基をむしろ積極的に取り込むことにより1等量の付加生成物に対する更なる付加が優先的に進行することを見出した。これにより、温和な条件で、アルキル鎖にリン官能基を2つ導入することが可能になり、金属錯体触媒を用いたリン2座配位子の新しい合成法として期待される。

○発表原著論文

T. Mizuta, Y. Iwakuni, T. Nakazono, K. Kubo and K. Miyoshi, "Preparation and reaction of phosphorus peri-bridged naphthalenes and their adducts with Lewis acids", *J. Organometal. Chem.*, **692**(1-3), 184-193 (2007).

○国際学会での講演

T. Mizuta: Reactions of Ring-Slipped Iron Complexes Derived from Phosphorus-Bridged [1]Ferrocenophane. The 10th Osaka City University International Conference (July, 2007, Osaka, Japan) (招待講演)

T. Mizuta, T. Aotani, Y. Imamura, K. Miyoshi: Steric Inversion of a Phosphorus Center Induced by Coordination to a Metal Fragment—Regulation of Configuration on Macrocyclic

- Polyphosphinoferrocenes—. 1st Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC) 2007 (July-Aug., 2007, Okazaki, Japan) (一般講演)
- K. Kubo, T. Akimoto, T. Nomura, T. Mizuta, K. Miyoshi: Synthesis of Bis-iminophosphorane Complexes and Their Utility as Metallochelates. 1st Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC) 2007 (July-Aug., 2007, Okazaki, Japan) (ポスター)
- C. Miyaji, T. Mizuta, K. Miyoshi: Synthesis of $\text{Cp}_2\text{M}(\text{OPPh}_2)_2\text{PdMe}_2$ (M=Ti, Zr, Hf) and Catalytic Activity in Double-Hydrophosphination Reaction. 14th IUPAC Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS14) (Aug., 2007, Nara, Japan) (ポスター)
- K. Kubo, T. Akimoto, S. Tagawa, T. Nomura, M. Urakaki, T. Mizuta, K. Miyoshi: Utility of Bis(iminophosphorane)iron Complexes as Chelating Ligands. The 1st International Symposium on Synergy of Elements (Nov., 2007, Tokyo, Japan) (ポスター)

○国内学会

- 水田 勉, 青谷朋之, 宮地ちひろ, 三吉克彦: メタロホスフィンキレート合成と配位子としての機能。第57回錯体化学討論会(2007年9月, 名古屋)(依頼講演)
- 音成洋彰, 久保和幸, 水田 勉, 三吉克彦: カルボジホスホラン $\text{Ph}_3\text{P}=\text{C}=\text{PPh}_3$ とパラジウム錯体の反応におけるC-HならびにP-C活性化反応。第57回錯体化学討論会(2007年9月, 名古屋)(一般講演)
- 宮地ちひろ, 久保和幸, 水田 勉, 三吉克彦: 4族メタロセンからのCp環脱離反応を利用した6座メタラホスフィン配位子の合成。第57回錯体化学討論会(2007年9月, 名古屋)(一般講演)
- 青谷朋之, 今村友紀, 水田 勉, 三吉克彦: 大環状ホスフィノフェロセンにおける空間を介した3IPスピンスピンカップリング現象。第57回錯体化学討論会(2007年9月, 名古屋)(ポスター)
- 稲見裕太, 今村友紀, 水田 勉, 三吉克彦: 2つの[1.1]フェロセノファンを組み込んだ大環状リン配位子の合成〜2つの金属を内包可能な骨格の構築〜。第57回錯体化学討論会(2007年9月, 名古屋)(ポスター)
- 水田 勉, 宮地ちひろ, 片山貴文, 久保和幸, 三吉克彦: 2級ホスフィンオキサイドとアルキンとのダブルホスフィニレーション反応に及ぼす4族と10族の金属中心の共同効果。第54回有機金属化学討論会(2007年10月, 広島)(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: ホスフィノボランを配位子とする鉄錯体の合成と構造および反応性。第54回有機金属化学討論会(2007年10月, 広島)(ポスター)
- 川本慎二, 水田 勉, 三吉克彦: 種々の置換基をもつリン架橋[1.1]フェロセノファン配位子を補助配位子としたパラジウム錯体の合成と触媒能。2007年日本化学会西日本大会(2007年11月, 岡山)(一般講演)
- 野村昂生, 浦垣充朗, 久保和幸, 水田 勉, 三吉克彦: ホスフィンイミドと鉄とのビス錯体を新規なメタロリガンドとして用いた鉄-アルミニウム二核金属錯体の合成。日本化学会第88春季年会(2008)(2008年3月, 東京)(一般講演)
- 吉田明美, 久保和幸, 水田 勉, 三吉克彦: BINAP骨格を有するカルボジホスホランとそれを配位子にもつ白金錯体の合成。日本化学会第88春季年会(2008)(2008年3月, 東京)(一般講演)

○研究助成の受け入れ状況

- 科学研究費補助金 基盤研究(C)「金属への配位により誘起された不斉リン中心の異常立体反転現象の解明」 代表 三吉克彦

科学研究費補助金 基盤研究(B) 「多様なメタロホスフィンキレートの合成法の開発と配位子としての機能の解明」 代表 水田 勉

科学研究費補助金 基盤研究(C) 「高機能性遷移金属錯体の構築を目指した新型炭素系配位子の開発」 代表 久保和幸

科学研究費補助金 特定領域研究 「活性多重結合を有する高周期典型元素－遷移金属複合錯体の構造と機能」 代表 久保和幸

○受賞状況（学生）

高木一人 広島大学学生表彰 課外活動 「第26回全日本心身統一合気道競技大会 選択体技 銅賞 武器選択体技 第4位 杖技 第4位」

分析化学研究グループ

スタッフ 藤原 照文（教授），塚原 聡（准教授），岡本 泰明（助教）

○研究活動の概要

近年，ナノテクノロジーの著しい発展とともに，種々の異相界面など，ナノメートルサイズの微小域を対象とする先端的な研究分野において，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となっており，そのための計測技術に関する研究が盛んに押し進められている。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。一方，微小域の溶液が有する特異な構造や性質の本質はあまり解明されておらず，溶液化学の分野においても関心が向けられている。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

以下に平成 19 年度の研究成果を示す。

(a) 逆ミセルメディア化学発光(CL)反応とフロー分析法：ナノ界面場を有する逆ミセル中での CL 反応に対する鉄(II)-ビピリジン錯体 $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ の特異な触媒能は，そのミセル界面で $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ が解離することによって生成する CL 活性種 Fe^{2+} に起因することを明らかにし， $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ を用いて過塩素酸イオンをイオン会合抽出しフローインジェクションCL法により間接定量する方法を開発した。

(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：液体クロマトグラフ分離における新規な固定相の開発をめざして，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用いてポリアミドを合成する方法を確立した。生成量を TGA 測定により求め，その最適条件を検討するとともに，原子間力顕微鏡観測を行い，ガラス表面に合成したポリアミドのナノ構造を明らかにした。

(c) 液液界面に生成した酸形ポルフィリン会合体の局所直流電場による泳動の *in situ* 顕微測定：液液界面に生成した規則的な酸形ポルフィリン会合体に対して，局所直流電場を印加したところ，陰極に向かう泳動が観察された。比較のため，液液界面近傍に存在させた負の電荷を有するポリスチレンに対して同様に直流電場を印加したところ，陽極に向かう泳動が観察された。両者の泳動速度を求め，界面近傍の電場強度と比較して，この新しい泳動挙動について考察した。

(d) 単一 DNA の *in situ* 顕微泳動測定：作用電極およびプローブ電極を配した自作のセルを用いて，166,000 bp (bp:塩基対)の巨大な DNA に直流電場を印加し，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19年度は，ICP-AESによる鉄鋼試料の直接定量法を開発した。通常ICPで鉄鋼を分析する場合，試料を酸分解して水溶液とする必要がある。本研究では，鉄鋼試料の分解・溶液化の操作を行わず，固体試料を直接加熱気化導入する迅速な測定方法を開発した。即ち，ETV装置の加熱炉の直上に，鉄鋼試料を磁石にした針先に付けた。輻射熱で鉄鋼試料がキュリー温度まで上がり磁性を失ったとき，試料は加熱炉上に落下し，直ちに熔融する。熔融した鉄は炉材のタングステンと良くぬれるので，加熱炉の表面に薄く均一に広がり，この広がった表面から揮発性元素である硫黄，セレン，アンチモンは瞬時に気化しICPへ導入できる。このような装置を開発し，固体試料を溶液にすることなく気化温度の低い目的元素をICPへ選択的に効率よく気化導入させることに成功した。

○発表原著論文

T. Fujiwara, I. U. Mohammadzai, K. Kitayama, Y. Funazumi, and T. Kumamaru (2007) Catalytic behavior of tris(2,2'-bipyridine)iron(II) complex in chemiluminescence reaction of luminol in reversed micellar medium of cetyltrimethylammonium chloride. *J. Colloid Interface Sci.*, **310**, 682-685.

S. Tsukahara, M. Suehara, and T. Fujiwara (2007) High Magnification Microscopic System Focusing on Transparent Liquid/Liquid Interface Formed in Thin-Layer Two-Phase Microcell. *Anal. Sci.*, **23**, 375-378.

Y. Kamiya, S. Tsukahara, and T. Fujiwara (2007) Ordered Microdomain of Diprotonated Tetraphenylporphine Aggregate Formed at Dodecane/Aqueous H₂SO₄ Interface Measured by Microspectrophotometry. *Chem. Lett.*, **36**, 344-345.

S. Tsukahara, H. Kitaguchi, and H. Watarai (2007) In Situ Measurement of Individual W/O Microemulsions of Aerosol OT in Dodecane/Water Extraction System by Total Internal Reflection Laser Light Scattering Microscopy. *Chem. Lett.*, **36**, 148-149.

○著書

藤原 照文：基礎からの分析化学（熊丸尚宏，河寫拓治，田端正明，中野恵文編著），朝倉書店，2007.

藤原 照文，塚原 聡（分担執筆）：第5版実験化学講座 20-1 分析化学（日本化学会編），丸善，2007.

○総説

藤原 照文 (2007) 逆ミセルの形成と性質－分析への応用のために－。ぶんせき, 128-135.

○国際会議

T. Tsuruta, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Microscopic measurement of deformation of liquid surface induced by localized direct current electric field. Joint Conference of JMLG/EMLG Meeting 2007 and 30th Symposium on Solution Chemistry of Japan, (Nov., 2007, Fukuoka, Japan) (ポスター)

S. Tsukahara, Y. Kamiya, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Emission Characteristics of Ordered Microdomain of Diprotonated Tetraphenylporphine Aggregate Formed at Dodecane/Aqueous H₂SO₄ Interface. Joint Conference of JMLG/EMLG Meeting 2007 and 30th Symposium on Solution Chemistry of Japan, (Nov., 2007, Fukuoka, Japan) (ポスター)

S. Tsukahara, M. Suehara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: In Situ Measurements for Single Giant DNA Molecules at Toluene-Trioctylamine/Water Interface by Total-Internal Reflection Fluorescence Microscopy. Joint Conference of JMLG/EMLG Meeting 2007 and 30th Symposium on Solution Chemistry of Japan, (Nov., 2007, Fukuoka, Japan) (ポスター)

○国内学会

塚原 聡：液液界面に生成する分子集積体の電場内における泳動の in situ 顕微測定。日本分析化学会第56年会（2007年9月，徳島）（依頼講演）

岡本泰明：着脱できるメタル炉を用いた加熱気化導入法による固体材料の ICP 原子スペクトル分析。東北大学金属材料研究所ワークショップ（2007年12月，仙台）（招待講演）

神谷幸男，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：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。第 68 回分析化学討論会（2007 年 5 月，宇都宮）（一般講演）
- 片岡紘子，小森裕美，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：メタル炉加熱気化導入－ICP 質量分析法によるプラスチック中の臭素の定量。第 68 回分析化学討論会（2007 年 5 月，宇都宮）（一般講演）
- 岡本泰明，松下孝也，片岡紘子，塚原 聡，藤原照文，阪倉誠司，池田昌彦，内原 博：直接試料導入－加熱気化 ICP 発光分析法による鉄鋼中硫黄の迅速定量。第 68 回分析化学討論会（2007 年 5 月，宇都宮）（一般講演）
- 井下翔平，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：交流および直流電場内における単一 DNA 分子の泳動挙動の顕微蛍光測定。日本分析化学会第 56 年会（2007 年 9 月，徳島）（一般講演）
- 浦崎真吾，松本裕史，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：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測定。日本分析化学会第 56 年会（2007 年 9 月，徳島）（一般講演）
- 鶴田剛士，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：局所電場による気液界面の微小変位の顕微測定と解析。日本分析化学会第 56 年会（2007 年 9 月，徳島）（一般講演）
- 塚原 聡，末原道教，岡本泰明，藤原照文：全内部反射蛍光顕微法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と解析。第 26 回日本溶媒抽出討論会（2007 年 11 月，北九州）（一般講演）
- 中津留可乃，下条晃司郎，長縄弘親，塚原 聡，藤原照文：抽出剤混合逆ミセルを用いた金の抽出とナノ粒子資源化。第 18 回日本化学会関東支部茨城地区研究交流会（2007 年 11 月，水戸）（一般講演）
- 井下翔平，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：酸およびスぺルミジン存在下における単一 DNA 分子の電気泳動挙動の *in situ* 顕微蛍光測定。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2007 年 12 月，東広島）（一般講演）
- 松本裕史，浦崎真吾，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：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局所内における泳動挙動。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2007 年 12 月，東広島）（一般講演）
- 中津留可乃，下条晃司郎，長縄弘親，塚原 聡，藤原照文：AOT/抽出剤混合逆ミセルによる金の抽出・分離とナノ粒子資源化。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2007 年 12 月，東広島）（一般講演）
- 中津留可乃，下条晃司郎，長縄弘親，塚原 聡，藤原照文：AOT/抽出剤混合逆ミセルによる金の抽出・分離とナノ粒子資源化。第 4 回茨城地区分析技術交流会（2007 年 12 月，東海村）（一般講演）
- 井下翔平，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：種々の条件下における単一 DNA 分子の電気泳動挙動の *in situ* 顕微蛍光測定。平成 19 年度広島地区分析技術講演会（2008 年 2 月，東広島）（一般講演）
- 井下翔平，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：顕微蛍光測定法による単一 DNA 分子の電気泳動挙動の測定。第 13 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2007 年 8 月，岡山県玉野）（ポスター）
- 松本裕史，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面近傍に存在するポリスチレン粒子の電場内における泳動挙動。第 13 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2007 年 8 月，岡山県玉野）（ポスター）
- 宮本 彩，片岡紘子，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：局所電場による気液界面の微小変位の顕微測定と解析。日本分析化学会第 56 年会（2007 年 9 月，徳島）（ポスター）

中津留可乃，下条晃司郎，長縄弘親，塚原 聡，藤原照文：抽出剤混合逆ミセルを用いた有価金属の抽出・分離とナノ粒子化。第 26 回日本溶媒抽出討論会（2007 年 11 月，北九州）（ポスター）

○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)「極微プローブを用いる液液界面の in situ 深さ分析法の開発」 代表者 塚原 聡

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

○受賞状況（職員）

藤原 照文，日本分析化学会フローインジェクション分析研究懇談会フローインジェクション分析学術賞「新規フローインジェクション化学発光分析法の開発」（2007）

○受賞状況（学生）

中津留 可乃(M2)，日本溶媒抽出学会第 26 回溶媒抽出討論会ポスター賞「抽出剤混合逆ミセルを用いた有価金属の抽出・分離とナノ粒子化」（2007）

中津留 可乃(M2)，第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム学生賞「AOT/抽出剤混合逆ミセルによる金の抽出・分離とナノ粒子資源化」（2007）

中津留 可乃(M2)，平成 19 年度日本化学会中国四国支部支部長賞(2008)

構造有機化学研究グループ

スタッフ 灰野 岳晴（教授），岩本 啓（助教）

○研究活動の概要

当研究グループは、有機化合物の三次元的な立体構造と、それらが示す様々な機能や反応性との相関を調べることを研究の基本としており、さらにその結果をもとにして、興味ある機能性化合物の合成を目指している。生体内の酵素などが行っている分子認識の機構や様式を明らかにするため酵素機能をモデル化したホスト化合物の合成と、そのホスト-ゲスト錯体の三次元的な構造の解析を行っている。

2007年度の研究成果の概要を以下に示す。

1. ジフェニルイソオキサゾールを基盤とした新規液晶性化合物のコンビナトリアル合成によりライブラリーを構築した。得られたライブラリーの液晶性を評価することにより、ネマティックやスメクティック相を示す新規イソオキサゾール液晶を発見することに成功した。また、この液晶相の構造について X 線解析を用いて詳細に検討したところ、二層構造をとっていることが明らかになった。

2. カリックス [5] アレーンを基盤とした光学活性な環状アミドを認識する人口レセプターの合成を行った。得られた人工レセプター分子は、環状アミドの不斉を認識して選択的に一方のエナンチオマーを包接することを明らかにした。

3. 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。

○発表原著論文

M. Tanaka, T. Haino, K. Ideta, K. Kubo, A. Mori, and Y. Fukazawa (2007) Combinatorial synthesis of isoxazole library and their liquid crystalline properties. *Tetrahedron*, **63**, 652-665.

T. Haino, H. Fukuoka, M. Katayama, and Y. Fukazawa (2007) Enantioselective recognition of calix[5]arene-based artificial receptor bearing chiral macrocycle for chiral ethyltrimethylammonium salts. *Chemistry Letters*, **36**, 1054-1055.

T. Kawaguchi, H. Ohki, K. Yamada, T. Okuda, T. Haino, and Y. Fukazawa (2007) Structure and guest dynamics for calix[4]arene derivative inclusion compounds. *Journal of Molecular Structure*, **833**, 108-113.

T. Haino, C. Fukunaga, and Y. Fukazawa (2007) Complexation of higher fullerenes by calix[5]arene-based host molecules. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, **7**, 1386-1388.

○国際会議

T. Haino: Molecular Recognition of Self-Assembled Capsules. 9th International Conference on Calixarene Chemistry (August, 2007, College Park, MD, USA)（依頼講演）

T. Haino: Construction of supramolecular architectures via self-assembly. IUPAC 3rd International Symposium on Novel Materials and Synthesis (NMS-III) & 17th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP-XVII) (October, 2007, Shanghai, China)（依頼講演）

T. Haino, K. Sakamoto, Y. Matsumoto, and Y. Fukazawa: Supramolecular Polymer Formed by Self-Assembly of Ditopic Calix[5]arene and Dumbbellshaped-C60. 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-12) (July, 2007, Awaji Island, Japan)（ポスター）

H. Iwamoto, Y. Hidaka, H. Takeharu, and Y. Fukazawa: Conformational Control of Molecular Tweezers by Redox Reaction. 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-12) (July, 2007, Awaji Island, Japan) (ポスター)

○国内学会

灰野岳晴：自己組織化超分子集合体の合成と機能。2007 年日本化学会西日本大会（2007 年 11 月，岡山）（依頼講演）

灰野岳晴：一次元に組織化された超分子集合体の合成と機能。第 1 回有機 π 電子系シンポジウム（2007 年 12 月，東京）（依頼講演）

岩本啓，八和田雪美，大宅徹，灰野岳晴，深澤義正：[3] ロタキサン合成における環状構造単位を連結した効果。第 2 回ホスト・ゲスト化学シンポジウム（2007 年 5 月，大阪）（一般講演）

田中正洋，灰野岳晴，深澤義正：1, 3, 5, -トリス(フェニルイソオキサゾイル)ベンゼン誘導体の自己集積化による超分子ファイバーの形成。第 37 回構造有機化学討論会（2007 年 10 月，札幌）（一般講演）

西沙織，日浦紗喜，山口泰生，岩本啓，深澤義正，灰野岳晴：カリックスアレーンとポルフィリンにより形成される空孔を持つホスト分子の合成とその包接挙動。2007 年日本化学会西日本大会（2007 年 11 月，岡山）（一般講演）

高柳麗，藤井隆吏，灰野岳晴：四つのポルフィリンをもつクレフト型ホスト分子の自己組織化。2007 年日本化学会西日本大会（2007 年 11 月，岡山）（一般講演）

塩秀美，高野竜士，灰野岳晴，深澤義正：キラルゲストの包接により生じるカリックス[4]アレーン自己集合超分子のキラリティー。2007 年日本化学会西日本大会（2007 年 11 月，岡山）（一般講演）

西沙織，日浦紗喜，山口泰生，岩本啓，深澤義正，灰野岳晴：カリックス[n]アレーンでキャブしたポルフィリンホスト分子の合成とその包接挙動。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2007 年 12 月，東広島）（一般講演）

三木絵梨子，小林憂佳，岩本啓，灰野岳晴，深澤義正：金属キレートによる不斉補助試薬の配座制御を利用した二級アルコールの絶対配置決定。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2007 年 12 月，東広島）（一般講演）

塩秀美，高野竜士，灰野岳晴，深澤義正：キラルゲストの包接による自己集合カリックス[4]アレーン金属錯体の超分子キラリティー。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2007 年 12 月，広島）（一般講演）

齋藤博史，田中正洋，灰野岳晴：オキシエチレン鎖をもつトリイソオキサゾイルベンゼン誘導体の自己集合挙動。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム（2007 年 12 月，広島）（一般講演）

西沙織，岩本啓，深澤義正，灰野岳晴：カリックス[4]アレーンでキャブしたポルフィリンホスト分子のゲスト包接挙動。日本化学会第 88 春季年会（2008 年 3 月，池袋）（一般講演）

三木絵梨子，小林憂佳，岩本啓，灰野岳晴，深澤義正：金属キレーションによる不斉補助試薬の配座制御を利用した二級アルコールの絶対配置決定。日本化学会第 88 春季年会（2008 年 3 月，池袋）（一般講演）

田中正洋，灰野岳晴，深澤義正：トリス(フェニルイソオキサゾイル)ベンゼンを用いた分子集合体の構築。日本化学会第 88 春季年会（2008 年 3 月，池袋）（一般講演）

塩秀美，灰野岳晴，高野竜二，深澤義正：キラルゲストの包接により制御されるカリックス[4]アレーン自己集合錯体の超分子キラリティー。日本化学会第 88 春季年会（2008 年 3 月，

池袋) (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] アレーンホストのキラルゲスト包接挙動。第2回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2007年5月, 大阪) (ポスター)

灰野岳晴, 福田克哲, 水田達也, 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認識。第2回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2007年5月, 大阪) (ポスター)

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分子の合成と会合挙動。第2回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2007年5月, 大阪) (ポスター)

西沙織: カリックスアレーンとポルフィリンから成る空孔をもつホスト分子の合成。第23回若手化学者のための化学道場(若手研究者のためのセミナー) (2007年9月, 東広島) (ポスター)

塩秀美: カリックス[4]アレーン自己集合ホストのジアステレオ選択的なゲストの包接挙動。第23回若手化学者のための化学道場(若手研究者のためのセミナー) (2007年9月, 東広島) (ポスター)

田中正洋: トリス(フェニルイソオキサゾイル)ベンゼン誘導体の自己集積化を利用した超分子ファイバーの形成。第23回若手化学者のための化学道場(若手研究者のためのセミナー) (2007年9月, 東広島) (ポスター)

三木絵梨子, 小林憂佳, 岩本啓, 灰野岳晴, 深澤義正: 新規不斉補助試薬を用いた二級アルコールの絶対配置決定法。第37回構造有機化学討論会 (2007年10月, 札幌) (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

材料科学研究助成金 研究助成, 超分子化学を基盤とする新規フラーレンナノ材料の開発, 灰野岳晴

稲盛財団 研究助成, カリックス[5]アレーンとフラーレンの超分子形成を利用したフラーレンナノ構造の構築と制御, 灰野岳晴

池谷科学技術振興財団 研究助成, フラーレンの自己組織化を利用した新規炭素材料の開発, 灰野岳晴

小笠原科学技術振興財団 研究助成, フラーレンを基盤とする超分子ポリマーの合成と炭素材料への応用, 灰野岳晴

村田学術振興財団 研究助成, 超分子フラーレンポリマーを基盤とする新規導電性ナノ炭素材料の開発, 灰野岳晴

倉田記念日立科学技術財団 海外渡航助成, IUPAC 3rd International Symposium on Novel Materials and Synthesis (NMS-III) & 17th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP-XVII), 灰野岳晴

科学研究費補助金 若手研究(B), 自己複製機能を持つインテリジェントロタキサン分子の創製, 岩本啓

泉科学技術振興財団 研究助成, 機械的結合の運動性により発現する光学表示素子の開発, 岩本啓

○その他

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), 高口 博志 (准教授), 高橋 修 (助教)

○研究活動の概要

1. 高振動励起分子の反応素過程の研究

振動励起分子と他分子の衝突により引き起こる2つの過程(振動エネルギー移動過程と化学反応過程)の分岐比決定を目指した実験研究を行っている。前年度に稼働を開始した高感度レーザー誘起蛍光(LIF)検出システムを利用して、酸素分子 $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ の広範囲振動励起準位 $v = 6 - 14$ を選択的に検出することに成功した。各振動準位と O_2 との衝突による、占有数変化の実時間分解測定データを、独自に開発した「Profile 積分法」を用いて解析し、 $v = 9 - 13$ の振動エネルギー移動の速度定数を決定した。また、別の系として、単一振動励起一酸化硫黄 $SO(B^3\Sigma^-, v = 0 - 3)$ の Ar および N_2 との衝突による占有数変化の時間挙動を観測し、単一振動励起状態の動力学的情報として、輻射、消光、振動緩和の全過程の速度定数をすべての振動準位について決定した。特に、前者の研究は、学術雑誌 *Phys. Chem. Chem. Phys.* の特集号“Synergies between Experimental and Theoretical Studies of Gas Phase Reactions”への投稿を依頼され、同誌第9巻第31号(2007)に日本からの唯一の研究報告として掲載された。

2. イオン・分子反応ダイナミクス研究のための量子状態選別分子イオン源の開発

イオン・分子反応の動力学的性質を実験的に検証することを目的として、単一量子状態をもつ分子イオンビーム源の開発を行っている。イオン・分子反応が有機反応論の微視的モデルとして広く受け入れられていることに着目して、本研究では、新規イオンビーム源を用いた散乱法を開発し、有機反応論を反応動力学的見地から検証することを目的としている。これまでにイオン発生チェンバー、イオン軌道制御チェンバーおよび検出器チェンバーを構成要素とする真空装置全体を製作した。また、RF 駆動型の多重極イオンガイドを中心とした反応イオン分子制御、および反応セルからの生成イオン分子捕集に関するイオン経路の数値シミュレーションを行い、当初設計に対して 30 - 50% の捕集効率を示す結果が得られた。

3. 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

- T. Hatano, S. Watanabe, H. Fujii, I. Tokue, and K. Yamasaki (2007) Quenching and Vibrational Relaxation of $SO(B^3\Sigma^-, v' \leq 3)$ by Collisions with Ar and N_2 . *J. Phys. Chem. A*, **111**(7), 1200-1206.
- S. Watanabe, S.-y. Usuda, H. Fujii, H. Hatano, I. Tokue, and K. Yamasaki (2007) Vibrational Relaxation of $O_2(X^3\Sigma_g^-, v = 9 - 13)$ by Collisions with O_2 . *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **9**(31), 4407-4413.
- K. Shin-ya, O. Takahashi, Y. Katsumoto, and K. Ohno (2007) Conformational Stability of Bbenzyl Mmethyl Ether Connected with CH/ π Interaction Studied by Matrix-Isolation Infrared Spectroscopy and Theoretical Calculations. *J. Mol. Struct.* **827**(1-3), 155-164.

- O. Takahashi, T. Matsui, A. Kawano, K. Tabayashi, K. Yamasaki (2007) Systematics of the Gradient on the Resonant Core-Hole State. *J. Mol. Struct. Theochem*, **808**, 35-40.
- S. Nagaoka, G. Prumper, M. Hino, M. Takemoto, Y. Tamenori, J. Harries, I. H. Suzuki, O. Takahashi, K. Okada, K. Tabayashi, X.-J. Liu, T. Lischke, K. Ueda (2007) Electron-Ion Coincidence Spectroscopic Study of Site-Specific Fragmentation Caused by Si:2p Core-Level Photoionization of $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$ Vapor. *Phys. Rev. A*, **75**, 020502(R).
- O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, R. Otaki, K. Ueda, H. Suezawa, Y. Umezawa, and M. Nishio (2007) The Anomeric Effect Revisited. A Possible Role of the CH/*n* Hydrogen Bond. *Carbohydr. Res.*, **342**, 1202-1209.
- O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, K. Ueda, H. Suezawa, and M. Nishio (2007) Origin of the Gauche Preference of *n*-Propyl Halides and Related Molecules Investigated by Ab Initio MO Calculations. Importance of the CH/*n* Hydrogen Bond. *Chem. Phys. Lett.*, **440**, 64-69.
- D. Nordlund, H. Ogasawara, H. Bluhm, O. Takahashi, M. Odelius, M. Nagasono, L.G.M. Pettersson, and A. Nilsson (2007) Probing the Electron Delocalization in Liquid Water and Ice at Attosecond Timescales", *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 217406-4.

○著書

- 山崎勝義 (2007) Clebsch-Gordan 係数と射影演算子。分子科学会 Web ジャーナル, *Mol. Sci.* **1**(1), AC0002.
- 山崎勝義 (2007) 電磁気学における単位系。分子科学会 Web ジャーナル, *Mol. Sci.* **1**(1), AC0003.
- 山崎勝義 (2007) 高振動励起分子の反応速度論。日本化学会 デイビジョンレポート, 2-3-14.
- 高口博志 (2007) 開殻系分子衝突。日本化学会 デイビジョンレポート, 2-3-7.

○国際会議

- S. Watanabe, S.-y. Usuda, and K. Yamasaki: Kinetic Study on the Vibrational Energy Transfer from $O_2(X^3\Sigma_g^-, \nu = 8 - 13)$ to O_2 . 1st International Symposium on Molecular Theory for Real Systems (Jul. 2007, Kyoto, Japan) (ポスター) 2007.7.27
- S. Arakawa, O. Takahashi, K. Yamasaki: Theoretical Studies for X-ray Absorption Spectra and Their Reactions of Alcohol Clusters. 1st International Symposium on Molecular Theory for Real Systems, (Jul. 2007, Kyoto, Japan) (ポスター) 2007.7.27

○国内学会

- 山崎勝義: 振動準位間緩和速度定数の決定と多量子緩和機構。第 23 回化学反応討論会 (2007 年 6 月, 神戸) (招待講演)
- 山崎勝義: Profile 積分解析による多段逐次反応速度の高精度測定。日本分光学会中国四国支部 広島地区講演会 (2007 年 12 月, 東広島) (依頼講演)
- 高橋修: 内殻励起化学反応に対する理論計算 PF 研究会「高輝度真空紫外・軟 X 線放射光を用いた機能性有機・生体分子薄膜研究の新展開」(2007 年 5 月, つくば) (依頼講演)
- 高橋修: 量子化学計算による内殻励起状態ダイナミクス。軟 X 線実験技術研究会 原子・分子の内殻励起研究会 合同研究会 (2007 年 10 月, Spring-8) (依頼講演) 渡辺信嗣, 碓田真也, 山崎勝義: 同一時間依存性を有する隣接 2 振動準位間緩和速度の Profile 積分法による解析。第 1 回分子科学討論会 (2007 年 9 月, 仙台) (一般講演)
- 渡辺信嗣, 碓田真也, 山崎勝義: 隣接 2 振動準位占有数の同一経時変化に対する Profile 積分法の適用。2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (一般講演)

碓田真也, 渡辺信嗣, 山崎勝義: 励起スペクトル強度法と緩和速度法を用いた光解離生成分子の初期振動状態分布決定。2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (一般講演)

渡辺信嗣・碓田真也・山崎勝義: 広範囲振動準位 $O_2(X^3\Sigma_g^-, v=6-13)$ の O_2 による緩和過程に関する Profile 積分解析。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 東広島) (一般講演)

碓田真也・渡辺信嗣・山崎勝義: 複数の手法による振動状態分布決定にもとづくオゾン光解離ダイナミクスの解明。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 東広島) (一般講演)

荒川貞弘, 高橋修, 山崎勝義: アルコールクラスタの内殻吸収スペクトルと反応に関する理論的研究 第 23 回化学反応討論会 (2007 年 6 月, 神戸) (ポスター)

碓田真也, 渡辺信嗣, 山崎勝義: $O_3/266nm$ 光解離系で生成する $O_2(X^3\Sigma_g^-, v)$ の初期振動状態分布。第 1 回分子科学討論会 (2007 年 9 月, 仙台) (ポスター)

○他研究機関での講義・客員

高口 博志, 理化学研究所, 客員研究員, 2008 年 2 月 1 日-2008 年 3 月 31 日

○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

科学研究費補助金 特定領域研究, 無極性分子間の振動エネルギー移動機構の解明, 研究代表者 山崎勝義

科学研究費補助金 特定領域研究, 有機イオンビーム法を用いた反応実験による有機反応論の検証, 研究代表者 高口博志

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 (准教授), 松川 史郎 (助教)

○研究活動の概要

2007 年度末に、博士 (理学) の学位を 2 名が取得した。研究面では、初めての超原子価 6 配位炭素化合物の合成に成功した。また、新規配位子を有する超原子価 5 配位リン、ヒ素、アンチモン化合物の合成に成功し、その異性化速度などの詳細な解析を行うことが出来た。

また、*o*-(フルオロシリル) フェニルリチウムと 14 族 2 価化学種との反応により、新規な含 14 族元素環状化合物の合成・単離に成功した。

○発表原著論文

Xin-Dong Jiang, Shiro Matsukawa, Hideaki Yamamichi, and Yohsuke Yamamoto (2007) First Isolation and Kinetic Study of Hypervalent 10-As-5 Organoarsenic Compounds with a C-apical O-equatorial Configuration. *Inorg. Chem.*, 46(14), 5480-5482.

Atsushi Kawachi, Atsushi Tani, Koji Machida, and Yohsuke Yamamoto (2007) *o*-(Fluorodimethylsilyl)phenyllithium as a Versatile Reagent for Preparation of Unsymmetrical, Silicon-Functionalized *o*-Disilylbenzenes. *Organometallics*, 26(19), 4697-4699.

Jun-ya Nakatsuji, Yuji Moriyama, Shiro Matsukawa, Yohsuke Yamamoto and Kin-ya Akiba, (2006) (2007 年 10 月出版) Synthesis and structure of hypervalent boron (10-B-5) compounds bearing a 2,6-(*p*-tolylloxymethyl)benzene tridentate ligand. *Main Group Chem.*, 5(4), 277-285.

Xin-Dong Jiang, Shiro Matsukawa, Hideaki Yamamichi, and Yohsuke Yamamoto (2007) Some Reactions of O-Equatorial Spirophosphoranes Bearing the Bidentate Ligand Based on Decafluoro-3-phenyl-3-pentanol, *Heterocycles*, 73 (Dr. Ugi's Memorial issue), 805-824.

Torahiko Yamaguchi and Yohsuke Yamamoto (2007) Synthesis and Structure of a Carbon Compound Bearing a Sterically Rigid 1,8-Dioxythioxanthylum (or Thioxanthene) Skeleton. *Chem. Lett.*, 36, 1438-1439.

Xin-Dong Jiang, Shiro Matsukawa, Hideaki Yamamichi, Ken-ichiro Kakuda, Satoshi Kojima, and Yohsuke Yamamoto (2008) Stereomutation and Experimental Determination of the Relative Stability of Diastereomeric O-equatorial Anti-Apicophilic Spirophosphoranes. *Eur. J. Org. Chem.*, 35, 1392-1405.

○国際会議

Yohsuke Yamamoto, Torahiko Yamaguchi, Daisuke Kinoshita, Kin-ya Akiba, Christopher A. Reed, Daisuke Hashizume, Fujiko Iwasaki : Synthesis of Hypervalent Pentacoordinate and Hexacoordinate Carbon Compounds. 8th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-8) (Aug., 2007, Riverside, USA) (招待講演)

Yohsuke Yamamoto, Xin-Dong Jiang, Ken-ichiro Kakuda, Shiro Matsukawa, Hideaki Yamamichi : Development of A Bidentate Ligand Based on Decafluoro-3-Phenyl-3-Pentanol: Steric Effect of Pentafluoroethyl Groups on the Stereomutation of O-Equatorial C-Apical Spirophosphoranes. The 17th International Conference on Phosphorus Chemistry (ICPC-2007) (Apr., 2007, Xiamen, China) (一般講演)

Yohsuke Yamamoto, Daigo Saito, and Chisato Dohi : Catalytic Allylation of Aldehydes with Allyltin by Palladium(II) Compounds Bearing Newly Prepared Tridentate Ligands. The 10th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (ICCST-10) (Jun., Lodz, Poland) (一般講演)

Atsushi Kawachi, Atsushi Tani, Takuya Teranishi, and Yohsuke Yamamoto : B,Si Bidentate Lewis Acids: o-Boryl(fluorosilyl)benzenes Derived from o-(Fluorosilyl)phenyllithiums and Their Fluoride Ion Affinity. 8th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-8) (Aug., 2007, Riverside, USA) (一般講演)

Hideaki Yamamichi, Shiro Matsukawa, Yohsuke Yamamoto : Synthesis of A Novel Apical-Equatorial-Equatorial Type Tridentate Ligand and Construction of Pentacoordinate Phosphorus Compounds. The 17th International Conference on Phosphorus Chemistry (ICPC-2007) (Apr., 2007, Xiamen, China) (ポスター発表)

Torahiko Yamaguchi and Yohsuke Yamamoto : Attempt to Synthesize an Anionic Hypervalent Pentacoordinate Carbon Compound Bearing a Thioxanthylum Skeleton. The 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-12) (Jul., 2007, Awaji Island, Japan) (ポスター発表)

Yusuke Hirata, Megumi Kodama and Yohsuke Yamamoto : Synthesis and Reactions of 16 pi Octaalkyltetraphenylporphyrins. The 12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-12) (Jul., 2007, Awaji Island, Japan) (ポスター発表)

Atsushi Kawachi, Takuya Teranishi, Atsushi Tani, and Yohsuke Yamamoto : Synthesis of Silicon-Functionalized 2,2'-Disilylbiphenyls by Oxidative Coupling of o-Silylphenylcuprates. The 14th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS 14) (Aug., 2007, Nara, Japan) (ポスター発表)

Shiro Matsukawa, Hideaki Yamamichi, Yohsuke Yamamoto, and Kaori Ando : Stereomutation of Pentacoordinate Organoantimony Compounds Bearing a Rigid Tridentate Ligand. 8th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-8) (Aug. , 2007, Riverside, USA) (ポスター発表)

Torahiko Yamaguchi and Yohsuke Yamamoto : Oxidation of the Allene Compound Bearing Two Thioxanthene Skeletons. 8th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-8) (Aug. , 2007, Riverside, USA) (ポスター発表)

Hideaki Yamamichi, Shiro Matsukawa, Yohsuke Yamamoto, and Kaori Ando : Synthesis of a Rigid Tridentate Ligand and Construction of Pentacoordinate Organoantimony Compounds. 8th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-8) (Aug. , 2007, Riverside, USA) (ポスター発表)

Yuichi Hirano and Yohsuke Yamamoto : Synthesis of a Novel Tridentate Ligand Bearing Two Pyrimidine (or Pyridine) Donors. 8th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-8) (Aug. , 2007, Riverside, USA) (ポスター発表)

Atsushi Kawachi, Masahiro Okimoto and Yohsuke Yamamoto : Photolysis and Thermolysis of Silicon-Functionalized 7-Silanorbornadienes. 1st Asian Silicon Symposium (2007 年 11 月, Zao, Miyagi, Japan) (ポスター発表)

○国内学会

山本陽介, 山口虎彦:超原子価有機典型元素の合成とその展開。理学研究流動機構シンポジウム「元素の個性～どう見るか、どうつくるか、どう使うか～」(2007 年 11 月, 東京) (招待講演)

山本陽介 : 超原子価 5 配位および 6 配位炭素化合物の合成とその展開。特定領域研究「元素相

- 乗系の化学」第2回シンポジウム(2007年6月, 福岡)(一般講演)
- 山道秀映: 回転柵機構による異性化の実験的証明を目指した新規三座配位子を有する5配位15族元素化合物の合成と異性化。第42回有機反応若手の会(2007年7月, 岐阜)(一般講演)
- 山口虎彦, 山本陽介, 木下大輔, 秋葉欣哉, C. A. Reed: 超原子価6配位炭素化合物の合成とその展開。第57回有機反応化学討論会(2007年9月, 東広島)(一般講演)
- 河内敦, 谷 厚志, 島田淳平, 山本陽介: 異核二座ルイス酸, *o*-(ボリル)(フルオロシリル)ベンゼンの合成とフッ化物イオンとの錯形成挙動 *Synthesis of Heteronuclear Bidentate Lewis Acids, o-(Boryl)(fluorosilyl)benzenes, and Their Complexation Behaviors with Fluoride Ion*. 第54回有機金属化学討論会(2007年10月, 東広島)(一般講演)
- 平田祐介, 小玉めぐみ, 山本陽介: 16π ポルフィリンの合成及び反応。2007年日本化学会西日本大会(ミニシンポジウム「有機合成化学の最前線」)(2007年11月, 岡山)(一般講演)
- 姜新東, 松川史郎, 山本陽介: C_2F_5 基を有する新規二座配位子(o -LiC₆H₄C(C₂F₅)₂ONa)を持つ超原子価5配位元素化合物の不安定位置異性体の単離、異性化、及び反応性。2007年日本化学会西日本大会(ミニシンポジウム「有機合成化学の最前線」)(2007年11月, 岡山)(一般講演)
- 佐藤仁美, 松川史郎, 山本陽介: 7員環を2つ縮環した新規ベンゼン誘導体骨格を有する新規典型元素化合物の合成。2007年日本化学会西日本大会(2007年11月, 岡山)(一般講演)
- 平野雄一, 伊藤純, 才木祐司, 山本陽介: ドナー原子として窒素原子を有する新規三座配位子の合成とその応用。2007年日本化学会西日本大会(2007年11月, 岡山)(一般講演)
- 鈴川直幸, 柏葉崇, 山本陽介: 新規スフェランドの合成と新規超原子価アート錯体合成の試み。2007年日本化学会西日本大会(2007年11月, 岡山)(一般講演)
- 河内敦, 財間政智, 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。2007年日本化学会西日本大会(2007年11月, 岡山)(一般講演)
- 平田祐介, 小玉めぐみ, 山本陽介: 非芳香族性 16π ポルフィリンの合成と性質。第4回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム(2007年12月, 東広島)(一般講演)
- 山本陽介, 鈴川直幸, 柏葉崇, 松川史郎: スフェランドの新規合成法の開発とその応用。第34回有機典型元素化学討論会(2007年12月, 大阪)(一般講演)
- 安藤香織, 山道秀映, 松川史郎, 山本陽介: 3座配位子で固定された5配位アンチモン化合物の立体異性化機構に関する研究: BPR vs. TR。第34回有機典型元素化学討論会(2007年12月, 大阪)(一般講演)
- 佐原伸哉, 松川史郎, 山本陽介: ベンゾジチオフェン骨格を有するかさ高い新規配位子の合成とその応用。日本化学会第88春季年会(2008年3月, 東京)(一般講演)
- 河内敦, 町田康士, 山本陽介: *o*-(フルオロシリル)フェニルリチウムとジクロロゲルミレンとの反応によるベンゾシラゲルマシクロブテンの合成。日本化学会第88春季年会(2008年3月, 東京)(一般講演)
- 河内敦, 長江沙織, 尾野上康裕, 山本陽介: TMP塩基によるホウ素原子置換ベンゼンのオルトメタル化反応。日本化学会第88春季年会(2008年3月, 東京)(一般講演)
- 山道秀映, 松川史郎, 山本陽介, 安藤香織: 強固な三座配位子を有する5配位アンチモン化合物の異性化機構の解明。日本化学会第88春季年会(2008年3月, 東京)(一般講演)
- 河内敦, 島田淳平, 山本陽介: *o*-(フルオロシリル)(ジメシチルボリル)ベンゼンのフッ化物イオンとの錯形成挙動。日本化学会第88春季年会(2008年3月, 東京)(一般講演)
- 矢野倫之, 山口虎彦, 山本陽介: 1,8-ジメトキシ-10-メチルアクリジニウム骨格を有する超原子価5配位ホウ素化合物の合成とその還元。日本化学会第88春季年会(2008年3月, 東京)(一般講演)

- 平田祐介, 小玉めぐみ, 山口虎彦, 山本陽介: 新規 16π ポルフィリンと金属または金属化合物の反応。日本化学会第 88 春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 村主拓弥, 土肥千里, 山田浩綱, 松川史郎, 山本陽介: ベンゼン環に 2 つの 7 員環を縮環した新規ピンサー型三座配位子の開発と遷移金属錯体合成への応用。日本化学会第 88 春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 沖本真広: 7-シラノルボルナジエン化合物の合成と分解反応。第 40 回有機金属若手の会 夏の学校 (2007 年 7 月, 筑波) (ポスター発表)
- 財間政智: *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 40 回有機金属若手の会夏の学校 (2007 年 7 月, 筑波) (ポスター発表)
- 寺西拓也: *o*- (シリル) フェニルクプラート類の酸化的カップリングによるケイ素官能性 2,2'-ジシリルビフェニルの合成。第 40 回有機金属若手の会夏の学校 (2007 年 7 月, 筑波) (ポスター発表)
- 山口虎彦: チオキサンテン骨格を有するオレフィン及びアレン化合物の酸化反応。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 中辻惇也: カルボニル配位子を有する新規三座配位子の合成と、その超原子価炭素、ホウ素化合物への応用。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 佐藤仁美: 7 員環を 2 つ縮環した新規ベンゼン誘導体骨格を有する新規典型元素化合物の合成。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 佐原伸哉: ベンゼン環にチオフエンを縮環した新規配位子前駆体の構築。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 田中俊広: 硫黄置換基の配座コントロールによる超原子価 4 配位酸素化合物合成の試み。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 平野雄一: 窒素原子を配位子とする新規三座配位子の合成とその応用。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 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。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 鈴木直幸: 新規スフェランドの合成と超原子価化合物合成への応用。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 土肥千里: 2 つの 7 員環を縮環したベンゼン骨格を有する新規三座配位子の合成とその触媒反応への応用。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 平田祐介: 16π ポルフィリンの合成と反応。第 42 回有機反応若手の会 (2007 年 7 月, 岐阜) (ポスター発表)
- 山道秀映, 松川史郎, 山本陽介, 安藤香織: 新規 3 座配位子を有する 5 配位アンチモンの異性化機構。第 3 回分子情報ダイナミクス研究会 (2007 年 8 月, 大阪) (ポスター発表)
- 村主拓弥: リンを配位原子とする 2 つの 7 員環を縮環したベンゼン系新規三座配位子の合成と遷移金属の導入。第 23 回若手化学者のための化学道場 (2007 年 9 月, 東広島) (ポスター発表)
- 土肥千里, 齊藤大悟, 村主拓弥, 山田浩綱, 山本陽介: 2 つの 7 員環を縮環したベンゼン骨格を有する遷移金属化合物の合成。第 24 回有機合成化学セミナー (2007 年 9 月, 淡路島) (ポスター発表)
- 河内敦, 寺西拓也, 谷厚志, 山本陽介: *o*- (シリル) フェニルクプラート類の酸化的カップリングによるケイ素官能性 2,2'-ジシリルビフェニルの合成
- Synthesis of Silicon-Functionalized 2,2'-Disilylbiphenyls by Oxidative Coupling of *o*-(Silyl)phenylcuprates. 第 54 回有機金属化学討論会 (2007 年 10 月, 東広島) (ポスター発表)
- 山道秀映, 松川史郎, 山本陽介, 安藤香織: 新規三座配位子を有する 5 配位アンチモン化合物

の合成とその異性化。第 34 回有機典型元素化学討論会 (2007 年 12 月, 大阪) (ポスター発表)
 佐藤仁美, 松川史郎, 山本陽介: π 供与性基を有する嵩高い新規配位子の開発と典型元素化合物合成への応用。第 34 回有機典型元素化学討論会 (2007 年 12 月, 大阪) (ポスター発表)
 姜新東, 松川史郎, 山本陽介: C2F5 基を有する二座配位子を用いたアリール基をもつ 5 配位リン不安定異性体の合成と異性化。第 34 回有機典型元素化学討論会 (2007 年 12 月, 大阪) (ポスター発表)
 田中俊広, 雲林院敏文, 山本陽介: 硫黄置換基を用いた超原子価 4 配位酸素化合物の合成とその証明の試み。第 34 回有機典型元素化学討論会 (2007 年 12 月, 大阪) (ポスター発表)
 山口虎彦, 山本陽介: 二つのチオキサンテン骨格を有するアレン化合物の酸化反応。第 34 回有機典型元素化学討論会 (2007 年 12 月, 大阪) (ポスター発表)
 平野雄一, 伊藤純, 才木祐司, 山本陽介: 結合エネルギーの評価を目的とした新規窒素系配位子の合成。第 34 回有機典型元素化学討論会 (2007 年 12 月, 大阪) (ポスター発表)
河内敦, 三宮瑠美, 吉岡敬裕, 山本陽介: 分子内配位子としてホスホニウムフルオレニリドを有する 5 配位ケイ素化合物の合成研究。第 34 回有機典型元素化学討論会 (2007 年 12 月, 大阪) (ポスター発表)

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内)

先端機能物質研究センター重点プロジェクト (分子集積デバイス材料開発リーダー: 播磨 裕 (工学研究科・教授)) 研究メンバー (2005-)

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金特定領域研究 (A), 「時空間制御」, 「炭素および高周期元素反応活性錯体の時空間制御」, 代表者 山本陽介
 科学研究費補助金基盤研究 (B), 超原子価 6 配位炭素化合物および新規安定炭素三重項種の創製, 代表者 山本 陽介
 科学研究費補助金特定領域研究, (フルオロシリル) フェニルメタル化合物を反応剤とする含典型元素パイ電子系の構築, 代表者 河内 敦
 科学研究費補助金若手研究 (スタートアップ), 新規三座配位子による動的機能制御, 代表者 松川 史郎

○受賞状況 (学生)

山道 秀映 (D2), International Conference on Phosphorus Chemistry The Best Poster Award 1st Prize
 “Synthesis of A Novel Apical-Equatorial-Equatorial Type Tridentate Ligand and Construction of Pentacoordinate Phosphorus Compounds”
 中辻 惇也 (D1), 第 42 回有機反応若手の会ポスター賞受賞「カルボニル配位子を有する新規三座配位子の合成と、その超原子価炭素、ホウ素化合物への応用」
 村主 拓弥 (B4), 第 23 回若手化学者のための化学道場ポスター賞受賞「リンを配位原子とする 2 つの 7 員環を縮環したベンゼン系新規三座配位子の合成と遷移金属の導入」
 姜 新東 (D3), 超原子価 15 族元素化合物に関する研究において学会で高い評価を受けたことに対する学長表彰受賞
 町田 康士 (B4), 日本化学会中国四国支部支部長賞受賞

○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，広島大学設備マスタープランワーキング委員(2007 年-)

山本 陽介，広島大学技術センター委員(2007 年)

山本 陽介，広島大学作業環境測定専門委員会委員（2006-）

山本 陽介，先端機能物質研究センター運営委員会委員（2005-）

反応有機化学研究グループ

スタッフ安倍 学 (教授), 小島 聡志 (准教授), 平賀 良知 (助教), 高木 隆吉 (助教)

○研究活動の概要

研究内容としては、反応性中間体の反応挙動精査、有機合成、酵素反応に関する研究を行っている。

反応性中間体の反応挙動精査に関しては、これまで反応挙動が精査されていない局在化 1, 3-および 1, 4-ビラジカルをターゲットとする研究を実施した。その結果、1, 3-ビラジカル of 最安定スピン多重度, 最安定電子配置, ならびに反応性に及ぼす顕著な 2 位のケイ素原子効果を見出した。また, 1, 4-ビラジカル of 化学では, その中間体を經由して生じるオキセタン環形成における立体選択性発現機構解明に関する大きな情報を得た。

立体特異的 2 段階 Peterson 反応を初めて共役電子求引基を有するオレフィンに拡張できた。また, 有機触媒反応としてシクロプロパン化反応および Michael 付加反応で高エナンチオ選択性を実現できた。さらに, ジアステレオ選択的フラン形成反応を見出した。

非プロトン性有機溶媒中で活性を有する有機不斉触媒について検討し, アルドール反応に対する触媒能を有する新規不斉有機触媒を合成した。赤潮プランクトンから二枚貝に対する致死活性物質として超炭素鎖有機分子を単離し, これらの構造解析を行っている。スピロ交差共役エノンの高面選択的環状付加反応およびタンデム Michael 反応によるビシクロ骨格構築法の有機分子触媒を用いた不斉反応への拡張を行った。タンデム Michael 反応を鍵反応として天然有機化合物 Plukenetione A の中心骨格合成法を見出した。

○発表原著論文

- M. Hamaguchi, M. Nakaishi, T. Nagai, T. Nakamura, and M. Abe (2007) Notable effect of an electron-withdrawing group at C3 on the selective formation of alkylidenecyclobutanes in the thermal denitrogenation of 4-spirocyclopropane-1-pyrazolines. nonstatistical dynamics effects in the denitrogenation reactions. *Journal of the American Chemical Society*, **129**, 12981-12988.
- A. G. Moiseev, M. Abe, E. O. Danilov, D. C. Neckers (2007) First direct detection of 2,3-dimethyl-2,3-diphenylcyclopropanone. *The Journal of Organic Chemistry*, **72**, 2777-2784.
- M. Abe, K. Taniguchi, T. Hayashi (2007) Exo-selective formation of bicyclic oxetanes in the Paternò-Büchi reaction of vinylene carbonate: the important role of intermediary triplet diradicals in the stereoselectivity. *Archive for Organic Chemistry (ARKIVOC)*, **viii**, 58-65.
- X.-D. Jiang, K.-i. Kakuda, S. Matsukawa, H. Yamamichi, S. Kojima, and Yohsuke Yamamoto (2007) Synthesis and application of a bidentate ligand based on decafluoro-3-phenyl-3-pentanol: steric effect of pentafluoroethyl groups on the stereomutation of *O*-equatorial *C*-apical spiroposphoranes. *Chemistry an Asian Journal*, **2**, 314-323.
- K. Tanabe, A. Fujie, N. Ohmori, Y. Hiraga, S. Kojima, and K. Ohkata, (2007) Studies on ring-closing metathesis for the 11-membered ring system for the synthesis of daphnezomine C. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **80**, 1597-1604.
- S. Niwayama, H. Wang, Y. Hiraga, J. C. Clayton (2007) Influence of Co-Solvents in the Highly Efficient Selective Monohydrolysis of a Symmetric Diester. *Tetrahedron Letters.*, **48**, 8508-8510.
- R. Takagi, A. Kondo, K. Ohkata (2007) Rate acceleration of phosphoric acid-catalyzed Diels-Alder reaction by internal hydrogen-bonding of adjacent hydroxy group. *Journal of Molecular Catalysis*

A: *Chemical*, **278**, 120-126.

R. Takagi, W. Miyanaga, K. Tojo, S. Tsuyumine, K. Ohkata (2007) Stereoselective total synthesis of (+)-scyphostatin via a π -facially selective Diels-Alder reaction. *The Journal of Organic Chemistry*, **72**, 4117-4125.

R. Takagi, Y. Miwa, T. Nerio, Y. Inoue, S. Matsumura, K. Ohkata (2007) Stereochemical investigation on the construction of poly-functionalized bicyclo[3.3.1]nonenones by successive Michael reactions of 2-cyclohexenones. *Organic and Biomolecular Chemistry*, **5**, 286-300.

○総説

安倍 学 (2007) 反応性中間体化学の新展開:一重項ビラジカルの場合。有機合成化学協会誌, **65**, 14-20.

○国際会議

M. Abe: Denitrogenation reaction of 4-spirocyclopropane-1-pyrazolines: Dynamics Effects?. 4th Heron Island Conference on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (July, 2007, Heron Island, Australia) (招待講演)

M. Abe: Heteroatom effects on the reactivity of cyclopentane-1,3-Diyls. The Post ISNA-12* Symposium on Physical Organic Chemistry in Fukuoka (July, 2007, Fukuoka, Japan) (招待講演)

M. Abe: Regio- and stereoselective formation of oxetanes using radical ion pairs and triplet 1,4-diradicals. 2007 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (November, 2007, Gyeongju, Korea) (招待講演)

M. Abe: Selective formation of oxetanes via radical ion pairs and triplet 1,4-diradicals. First Japan-Singapore Bilateral Symposium on Catalysis (January, 2008, Singapore, Singapore) (招待講演)

M. Abe, A. Takegami, T. Nakamura: Heteroatom effects on the reactivity of cyclopentane-1,3-diyls. The 2nd Gunma International Symposium on Chemistry (July, 2007, Gunma, Japan) (ポスター発表)

M. Abe, A. Takegami, T. Nakamura: Heteroatom Effects on the Reactivity of Cyclopentane-1,3-Diyls. The 1st International Symposium on Synergy of Elements (November, Tokyo, Japan) (ポスター発表)

S. Kojima, Y. Umeda, A. Iwamoto, and T. Chabayashi: Asymmetric Michael addition with chiral piperazines as catalysts. International Conference on Asymmetric Organocatalysis (May, 2007, Otsu, Japan). (ポスター発表)

S. Niwayama, H. Wang, Y. Hiraga, C. J. Clayton: Studies of Solvent Effects in Highly Efficient Monohydrolysis of Dimethyl Bicyclo[2.2.1]Hept-2,5-Diene-2,3-Dicarboxylate. 63rd Southwest Regional Meeting of the American Chemical Society (November, 2007, Lubbock, TX, USA) (ポスター発表)

○国内学会

安倍 学: 長寿命一重項ビラジカルの発生: 構造と反応性に関する研究。第 57 回有機反応化学討論会 (2007 年 9 月, 東広島) (依頼講演)

安倍 学: 化学反応性の及ぼす局在化一重項ビラジカルの電子配置効果。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (依頼講演)

高木隆吉: Scyphostatin の全合成研究。第 23 回若手化学者のためのセミナー (化学道場) (2007 年 9 月, 東広島) (依頼講演)

岩本明久, 梅田康広, 茶林敬司, 小島聡志, 大方勝男, 安倍学: 環状キラルアミンを用いた不斉 Michael 反応への応用と展開。第 37 回複素環化学討論会 (2007 年 10 月, 長野) (一般講演)

- 岩本明久, 梅田康広, 茶林敬司, 小島聡志, 大方勝男, 安倍学: C_2 対称キラルピペラジンをブレンステッド塩基として用いた不斉 Michael 反応への応用。2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (一般講演)
- 中川玲, 村井豊, 小島聡志, 安倍学: Peterson 試薬とアルデヒドとのアルドール付加体における高選択的 syn 脱離反応。2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (一般講演)
- 岩本明久, 梅田康広, 茶林敬司, 小島聡志, 大方勝男, 安倍学: 新規不斉有機触媒の合成とその応用。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月東広島) (一般講演)
- 井形直央・山本和弘・高木隆吉・小島聡志: メタロセン触媒を用いた不飽和結合のカルボアルミネーションの反応性。第 37 回石油・石油化学討論会 (2008 年 10 月, 札幌) (一般講演)
- 榊原 裕・平賀良知・小島聡志・安倍学: カロテノイド, アスタキサンチンの熱異性化における溶媒効果と異性化機構。第 51 回香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会 (2007 年 11 月, 滋賀) (一般講演)
- Triana Widiandi・國西剛基・平賀良知・小島聡志・安倍学: リン酸基を有するプロリン誘導体の合成と不斉有機触媒能に関する研究。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 11 月, 東広島) (一般講演)
- 井上祐太・高木隆吉: 連続的 Michael 反応によるビスクロ化合物構築法を鍵反応とした Plukenetione A の合成研究。第 51 回香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会 (2007 年 11 月, 長浜) (一般講演)
- 中村岳史, 安倍学: 2,3-ジアザ-7-シラビスクロ[2.2.1]ヘプテン誘導体の脱窒素反応機構に関する研究。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 藪野洋平・平賀良知・安倍学: 環状フリルアルコール誘導体とベンゾフェノンとのパテルノビュッヒ反応における位置選択性と立体選択性。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 岩本明久, 指原慶彰, 小島聡志, 安倍学: 2 位に不斉四級炭素を有するフラン環の立体選択的構築に関する研究。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月東京) (一般講演)
- 岡祐児, 小島聡志, 安倍学: キラルな環状アミン触媒を用いた不斉アシル化反応の検討。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月東京) (一般講演)
- 宮内拓也, 鈴木麻希, 小島聡志, 安倍学: 化学修飾したシンコナルカロイドを触媒とする不斉シクロプロパン化反応。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月東京) (一般講演)
- Triana Widiandi・國西剛基・平賀良知・小島聡志・安倍学: リン酸基を有するホモプロリン誘導体の合成と不斉有機触媒能の検討。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 國西剛基・Triana Widiandi・平賀良知・小島聡志・安倍学: ホモプロリンメチルエステル誘導体の合成と不斉有機触媒能に関する研究。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 井上祐太・練苧喬士・美和有希子・高木隆吉・大方勝男: 連続的 Michael 反応による多置換ビスクロ骨格構築法における立体選択性。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 西長彦・高木隆吉・大方勝男・安倍学: 光学活性なリン酸を用いた交差共役ジエノンの不斉 Diels-Alder 反応に関する研究。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 山本幸明・田中賢治・高木隆吉・大方勝男・安倍学: 連続的な閉環メタセシス反応と渡環 Diels-Alder 反応による三環式化合物の合成研究。第 88 回日本化学会春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)

近藤広理・藤井絵美・高木隆吉・大方勝男・安倍学：シンコナルカロイドを不斉有機触媒とする Michael 反応。第 88 回日本化学会春季年会（2008 年 3 月，東京）（一般講演）

安倍学：Denitrogenation Mechanism of 4-Spiroepoxy-1-Pyrazoline: Dynamic Effects。第 3 回分子情報ダイナミクス研究会（2007 年 8 月，吹田）（ポスター発表）

榊原 裕・平賀良知・小島聡志・安倍学：溶媒効果を用いたアスタキサンチンの異性化の反応メカニズム。第 3 回分子情報ダイナミクス研究会（2007 年 8 月，吹田）（ポスター発表）

中川玲，村井豊，小島聡志，安倍学：Mechanistic Studies on the Peterson Reaction using Intermediate Models。第 3 回分子情報ダイナミクス研究会（2007 年 8 月，大阪）（ポスター発表）

岩本明久：新規ピペラジン化合物を用いた Michael 反応への応用と展開。第 23 回若手化学者のための化学道場（2007 年 9 月，東広島）（ポスター発表）

薮野洋平・安倍学：フリルアルコール誘導体のパテルノビュッヒ反応：位置及び立体選択性。第 57 回有機反応化学討論会（2007 年 9 月，東広島）（ポスター発表）

中村岳史・安倍学：2-シラ-1, 3-ビラジカル分子間反応。第 57 回有機反応化学討論会（2007 年 9 月，東広島）（ポスター発表）

宮内拓也，鈴木麻希，小島聡志，安倍学：シンコナルカロイド誘導体を触媒とした不斉シクロプロパン化反応の検討。第 23 回若手化学者のための化学道場（2007 年 9 月，東広島）（ポスター発表）

宮内拓也，鈴木麻希，小島聡志，安倍学：シンコニジンおよびその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。第 24 回有機合成セミナー（2008 年 9 月，淡路）（ポスター発表）

近藤広理・藤井絵美・高木隆吉・安倍学：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。第 24 回有機合成化学セミナー（2008 年 9 月，淡路島）（ポスター発表）

西長彦・高木隆吉・安倍学：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不斉 Diels-Alder 反応に関する研究。第 24 回有機合成化学セミナー（2008 年 9 月，淡路島）（ポスター発表）

○産学官連携実績

平賀良知

独立行政法人酒類総合研究所，「酵母由来の新規リパーゼを用いた不斉非対称化に関する研究」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」

○国際共同研究・国際会議開催実績

安倍学

Norbert Hoffmann 博士（仏国 CNRS Universite de Reims）

平賀良知

Satomi Niwayama 博士（米国 Texas Tech 大学）

○他研究機関での講義・客員

平賀良知，広島県産業科学技術研究所，研究協力員，1998 年 4 月 1 日～）

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金，基盤研究 B，開殻系分子の安定化に基づく新規分子変換反応の開発と機能化，安倍学

科学研究費補助金，特定領域研究，小分子カルボニル化合物の活性化によるオキセタン類の選択的合成と高度分子変換，安倍学

科学研究費補助金，特定領域研究，元素相乗効果に基づくポリラジカルのスピン整列とその機能化，安倍学

科学研究費補助金，基盤研究 C，環境調和型新規有機不斉触媒を用いた含窒素複素環の不斉化学修飾反応の開発と応用，小島聡志

共同研究費，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，平賀良知

○受賞状況（職員）

安倍 学，野副記念奨励賞「長寿命一重項ビラジカルの発生：構造と反応性に関する研究」（2007）

○受賞状況（学生）

岩本明久（M2），第4回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム学生賞「新規不斉有機触媒の合成とその応用」（2007）

集積化学研究グループ

スタッフ 田林 清彦（教授），岡田 和正（准教授），勝本 之晶（助教）

○研究活動の概要

2007 年度の研究成果を以下に列挙する。

①軟 X 線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、分子内の化学環境に影響を受けてその束縛エネルギーは「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環境にもこれらの束縛エネルギーや内殻励起状態が変化することを、強い水素結合分子クラスターを用いて明らかにしてきた。今回は、主に極性の相互作用で結合しているニトロメタン分子クラスターにおいても、弱い C-H $\cdots$ O 水素結合相互作用の存在が、内殻励起スペクトルや密度汎関数法計算によって確かめられた。この他、3 フッ化エタノールクラスターの内殻励起分解反応においても、我々が提唱している Local-fragmentation 機構を支持するクラスターサイズ依存性が観測されている。

②内殻電子励起による有機分子の励起サイト選択的、状態選択的解離

分子内化学環境の異なる複数の酸素原子サイトを持つ酢酸メチルは、内殻励起によるサイト選択的の反応機構を検討する上で基本的となる分子である。ここでは、分解サイトを特定するため、重水素で標識した酢酸メチル(CH₃C(O)CD₃)を用い、酸素 K 殻電子励起後の解離イオンを飛行時間型質量分光法により観測した。各内殻励起バンドにおけるキープロダクト(CD₃⁺, CDO⁺)の分布から、顕著な励起サイト選択的解離が(O1s_{CO}⁻¹π_{CO}^{*})と(O1s_{OCD₃}⁻¹π_{CO}^{*})バンドに、また、状態選択的解離が(O1s_{OCD₃}⁻¹σ_{C-OD₃}^{*})バンドに現れることを見出した。また、keto-enol 互変異性体を経て得られる副生成物 CHO⁺/CHDO⁺も観測されている。

③電子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。本研究テーマでは、励起源として数百 eV の電子線を用いて 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てきた。これらの分子はいずれも、窒素内殻イオン化の励起エネルギーにおいて C₅H₆⁺または C₅H₅⁺解離イオンを多く生成することから、内殻イオン化後の特異的なピリジン環開裂機構を提唱した。また、このエネルギー領域においても開裂前のはやい水素原子移動が存在することを見出した。

④シクロブタン環のフッ素内殻励起と解離

本研究テーマでは、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いる。パーフルオロシクロブタンについて、本年度はフッ素内殻領域における解離について実験を行った。内殻励起状態において、基底状態の環骨格構造から CF₂⁺が解離するモデルを立てて CF₂⁺の異方性パラメータを見積もると、この遷移を b₂ 対称軌道への共鳴遷移と帰属すれば、実験結果の合理的な解釈を与えることができた。すなわち、炭素端と同様に、688.5 eV の第一共鳴ピークは F 1s → σ*(CF)遷移と帰属すべきであるとの結論を得た。

⑤孤立重水素化標識法による Methanol の水和挙動の研究

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。当研究グループでは、アルコールや水などの液体状態において観測される赤外バンドから、水素結合状態を調べる研究を行っている。本年度は、Methanol のメチル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、Methanol の水溶液中における水素結合パターンを調べる方法を確立した。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パターンに依存した。

⑥水溶性高分子の立体規則性と溶解性の相関

Poly(*N*-isopropylacrylamide) (PNiPA) および Poly(*N,N*-diethylacrylamide) (PNdEA)の立体特異性リビングラジカル重合を試み、得られた高分子の溶液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, PNdEA 水溶液の相分離挙動は立体規則性に大きく依存することがわかった。特に PNiPA においては、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、これらの試料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。

○発表原著論文

- K. Tabayashi, T. Maruyama, K. Tanaka, H. Namatame, and M. Taniguchi (2007) Coincidence measurements of core-excited molecules and clusters using TOF fragment-mass spectroscopy. *AIP Conf. Proc.* **879**, *SYNCHROTRON RADIATION INSTRUMENTATION: 9th Int. Conf. on Synchrotron Radiation Instrumentation*, 1788-1792.
- O. Takahashi, T. Matsui, A. Kawano, K. Tabayashi, and K. Yamasaki (2007) Systematics of the gradient on the resonant core-hole state. *J. Mol. Struct. THEOCHEM* **808**(1-3), 35-40.
- S. Nagaoka, G. Prümper, H. Fukuzawa, M. Hino, M. Takemoto, Y. Tamenori, J. Harries, I. H. Suzuki, O. Takahashi, K. Okada, K. Tabayashi, X.-J. Liu, T. Lischke, and K. Ueda (2007) Electron-ion-ion triple-coincidence spectroscopic study of site-specific fragmentation caused by Si:2p core-level photoionization of F₃SiCH₂CH₂Si(CH₃)₃ vapor. *Phys. Rev. A* **75**(2), 020502R (4 pages).
- M. Kato, Y. Morishita, M. Oura, H. Yamaoka, Y. Tamenori, K. Okada, T. Matsudo, T. Gejo, I. H. Suzuki, and N. Saito (2007) Absolute photoionization cross section with an ultra-high energy resolution for Ne in the region of 1s Rydberg states. *Synchrotron Radiation Instrumentation: Ninth Int. Conf. Synchrotron Rad. Instrum.*, 1121-1124.
- T. Ibuki, S. Itoh, Y. Tamenori, K. Okada, S. Nagaoka, Y. Morishita, and I. H. Suzuki (2007) Doppler effect in resonant excitation of CF₃SF₅ probed by Auger electron spectroscopy. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **154**(3), 53-59.
- M. Kato, Y. Morishita, M. Oura, H. Yamaoka, Y. Tamenori, K. Okada, T. Matsudo, T. Gejo, I.H. Suzuki, and N. Saito (2007) Absolute photoionization cross sections with ultra-high energy resolution for Ar, Kr, Xe and N₂ in inner-shell ionization regions. *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **160**(1-3), 39-48.
- Y. Katsumoto, T. Tanaka, K. Ihara, M. Koyama, and Y. Ozaki (2007) Contribution of Intramolecular C=O...H-N Hydrogen Bonding to the Solvent-Induced Reentrant Phase Separation of Poly(*N*-isopropylacrylamide). *J. Phys. Chem. B* **111**(44), 12730-12737.
- K. Shin-ya, H. Sugeta, S. Shin, Y. Hamada, Y. Katsumoto, and K. Ohno (2007) Absolute Configuration and Conformation Analysis of 1-Phenylethanol by Matrix-Isolation Infrared and Vibrational Circular Dichroism Spectroscopy Combined with Density Functional Theory Calculation. *J. Phys. Chem. A* **111**(35), 8598-8605.
- 勝本之晶 (2007) 標識化合物の分光測定による高分子・低分子溶液の物性研究. *分光研究* **56**(3), 108-118.
- A. Iida, C. Hashimoto, T. Misaki, Y. Katsumoto, Y. Ozaki, and Y. Tanabe (2007) Reversal Phenomenon of Reaction Velocity in a Mixed Reaction System: Silylations between Simple Alcohols and α - or β -Hydroxyketones Using Anilinosilanes and Catalytic TBAF Agent. *J. Org. Chem.* **72**(13), 4970-4973.
- Y. Yamada, Y. Katsumoto, and T. Ebata (2007) Picosecond IR-UV pump-probe spectroscopic study on

the vibrational energy flow in isolated molecules and clusters. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **9**(10), 1170-1185.

K. Shin-ya, O. Takahashi, Y. Katsumoto, and K. Ohno (2007) Conformational stability of propylbenzene and benzyl methyl ether connected with CH $\cdots\pi$ interaction studied by matrix-isolation infrared spectroscopy and theoretical calculations. *J. Mol. Struct.* **827**(1-3), 155-164.

○国際会議

T. Yamanaka, K. Yamamoto, H. Yoshida, and K. Tabayashi: Inner-shell excitation spectra and fragmentation of nitromethane clusters at the oxygen *K*-edge. International Conference on Materials for Advanced Technologies 2007; Symposium N: Synchrotron Radiation for Making and Measuring Materials (Jul., 2007, Singapore) (Poster)

Y. Tamenori, K. Okada, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma: Photofragmentation dynamics of inner-shell excited ethanol clusters at Oxygen *K*-edge. The 15th International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics (Jul.-Aug., 2007, Berlin, Germany) (Poster)

K. Tabayashi, R. Kawasaki, T. Yamanaka, H. Yoshida: Site- and state-selective Dissociation of core-excited organic molecules: Deuterium labeled Methyl-Acetate. The 3rd International Symposium on Isotope Effects in Physics, Chemistry and Engineering (Sept., 2007, Nagoya Japan) (Poster)

T. Yamanaka, T. Maruyama, H. Yoshida, and K. Tabayashi: Hydrogen-bond interaction of small ammonia clusters observed with inner-shell excitation spectroscopy at the nitrogen *K*-edge. The 12th International Symposium on Synchrotron Radiation (Mar., 2008, Higashi-Hiroshima) (Poster)

Takafumi Shimoaka and Yukiteru Katsumoto : Origin of the Blue Shift of the CH Stretching Band for Methanol in Water, Joint Conference of JMLG/EMLG Meeting 2007 and 30th Symposium on Solution Chemistry of Japan (November, 2007, Fukuoka) (Poster)

Yukiteru Katsumoto, Hiroyuki Komatsu, and Keiichi Ohno : Concentration-Dependent Changes in the Hydration and Conformation of 2-Butoxyethanol Monitored by the CD stretching Wavenumber of Mono-Deuterated Species, Joint Conference of JMLG/EMLG Meeting 2007 and 30th Symposium on Solution Chemistry of Japan (November, 2007, Fukuoka) (Poster)

○国内学会

田林清彦：水素結合したカルボン酸分子クラスターの内殻励起スペクトルと光誘起反応。軟X線実験技術研究会／原子・分子の内殻励起研究会合同研究会－BL27SU の現状と今後の展開－（2007年10月，西播磨）（依頼講演）

渡辺新治，田林清彦，山中剛志，丸山友絵，吉田啓晃：水素結合トリフルオロエタノールクラスターのO1s内殻励起。2007年日本化学会西日本大会（2007年11月，岡山市）（一般講演）

山中剛志，丸山友絵，田林清彦，吉田啓晃：クラスター形成に伴うアンモニアの電子状態変化とN1s内殻励起光化学反応過程。第21回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2008年1月，大津市）（ポスター）

渡辺新治，田林清彦，山中剛志，丸山友絵，吉田啓晃：トリフルオロエタノールクラスターのO(1s)励起光化学反応。第21回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2008年1月，大津市）（ポスター）

岡田和正：解離イオンの角度分布と運動エネルギー分布から見た分子の内殻励起と解離。軟X線実験技術研究会／原子・分子の内殻励起研究会合同研究会－BL27SU の現状と今後の展開－（2007年10月，西播磨）（依頼講演）

岡田和正，為則雄祐，田林清彦，大野啓一：解離イオンの運動エネルギー分布から見た内殻励

- 起分子の解離。2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (一般講演)
- 末光 篤, 岡田和正, 長岡伸一, 清水亜由美, 新田晃子, 鈴木 功, 田林清彦, 為則雄祐: パーフルオロシクロブタンのフッ素内殻励起・解離。2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (一般講演)
- 岡田和正, 為則雄祐, 末光 篤, 岩崎義己: 解離イオンの運動エネルギー分布から見た内殻励起 Ar クラスターの解離機構。日本化学会第 88 春季年会 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 國分美希, 本間健二, 下條竜夫, 伊勢田満弘, 森田敦士, 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 平谷篤也: ピックアップ法によるクラスター付着分子の内殻励起スペクトルの測定。第 23 回化学反応討論会 (2007 年 6 月, 神戸) (ポスター)
- 岡田和正, 岩崎義己, 田林清彦, 鈴木 功, 下條竜夫, 為則雄祐, 大野啓一: 角度分解イオン分光法によるパーフルオロシクロブタンの炭素 K 殻領域における吸収と解離過程。第 23 回化学反応討論会 (2007 年 6 月, 神戸) (ポスター)
- 岡田和正, 末光 篤, 長岡伸一, 清水亜由美, 新田晃子, 鈴木 功, 田林清彦, 為則雄祐: パーフルオロシクロブタンのフッ素 K 殻領域における吸収と解離過程。第 1 回分子科学討論会 (2007 年 9 月, 仙台) (ポスター)
- 堺 真通, 岡田和正, 大野啓一, 伊吹紀男: 電子衝撃法によるピリジン環の内殻励起・解離。第 1 回分子科学討論会 (2007 年 9 月, 仙台) (ポスター)
- 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 國分美希, 伊勢田満広, 下條竜夫, 本間健二: アルゴン・アセトンヘテロクラスターにおける、アセトン分子の内殻励起緩和過程の観測。第 21 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2008 年 1 月, 草津) (ポスター)
- 岡田和正, 末光 篤, 岩崎義己, 田林清彦, 鈴木功, 長岡伸一, 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 C および F 1s 励起と解離。第 21 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2008 年 1 月, 草津) (ポスター)
- 衛藤由希, 勝本之晶: 立体制御された Poly(*N,N*-diethylacrylamide) の溶媒和と相分離挙動, 第 56 回高分子学会年次大会 (2007 年 5 月, 京都) (ポスター)
- 勝本之晶, 小山美沙緒, 平野 朋広: 立体制御された poly(*N*-isopropylacrylamide) の有機溶液中における局所構造と物理ゲル化, 56 回高分子学会年次大会 (2007 年 5 月, 京都) (ポスター)
- 下赤卓史, 勝本之晶: 孤立重水素化ラベルされたメタノールの CD 伸縮バンドの波数シフトと水素結合状態の相関, 第 1 回分子科学討論会 2007 (2007 年 9 月, 仙台) (一般講演)
- 勝本之晶, 長谷川傑, 光岡広樹, 相田美砂子: 2-pyridone の互変異性化に対する外部環境と置換基の影響, 第 1 回分子科学討論会 2007 (2007 年 9 月, 仙台) (一般講演)
- 衛藤由希, 勝本之晶: Poly(*N,N*-diethylacrylamide) の立体規則性制御による水溶液の相転移温度の変化, 中国四国地区高分子若手研究会 2007 (2007 年 11 月, 岡山) (ポスター)
- 久保崎範行, 勝本之晶: Poly(*N*-isopropylacrylamide) の水溶液中における相転移挙動に対する立体規則性の影響, H19 中国四国高分子若手研究会 (2007 年 10 月, 岡山) (ポスター)
- 下赤卓史, 大野啓一, 勝本之晶: 水溶液中における孤立重水素化メタノールの CD 伸縮バンドの高波数シフト, 第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 広島) (一般講演)
- 久保崎範行, 勝本之晶: 立体規則性を有する Poly(*N*-isopropylacrylamide) 水溶液の相図, 第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 11 月, 広島) (一般講演)
- 下赤卓史, 大野啓一, 勝本之晶: 振動分光法による液体中におけるメタノールの水素結合パターンの研究～OH および孤立 CD 伸縮バンドの相関～, 日本化学会第 88 春季年会 2008 (2008 年 3 月, 東京) (一般講演)
- 光岡広樹, 丸山篤史, 鈴木利明, 勝本之晶, 佐藤英俊: ボールレンズ中空ファイバーラマンブ

ローブを用いた生体計測研究，第 88 回日本化学会年会（2008 年 3 月，池袋）（一般講演）
勝本之晶，久保崎範行：立体規則性を有する poly(*N*-isopropylacrylamide)の水溶液の相図，第 2
回 LSW シンポジウム（2008 年 1 月，札幌）（ポスター）

○他研究機関での講義・客員

岡田 和正，自然科学研究機構分子科学研究所，客員准教授，2007 年 4 月 1 日－

○研究助成の受け入れ状況

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

平成 19 年度笹川科学研究助成，「界面活性剤の自己組織化挙動における疎水基の役割の分子論
的解明」代表 勝本之晶

量子化学研究グループ

スタッフ 相田 美砂子（教授）、石橋 孝章（准教授）

○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蛋白質と核酸との特異的認識

アミノ酸側鎖と核酸塩基対との相互作用に対し、多体の相互作用エネルギーを *ab initio* MO 法により、MP2/6-31G*を用い BSSE を補正して求めた。その結果、3 体の相互作用エネルギーが、アスパラギン側鎖と GC 塩基対の相互作用の場合に重要であることを見出した。

②水溶液中の置換反応の自由エネルギーマップ

気相中における反応の経路は、絶対零度の場合の経路は IRC によって、温度のあるときの経路は、*ab initio* MD によって、求めることができる。溶液中における反応の経路は、大量の溶媒分子を伴うため、自由エネルギーを求めることが必須となる。そこで、求核置換反応である $RX + X^-$ ($R=\text{alkyl}$, $X=\text{halogen}$) を対象とし、溶媒として 100 個の水分子をあらわに計算に入れこみ、反応の進行に伴う自由エネルギー変化を求めることによって、溶媒の反応経路に与える影響を明らかにした。その結果、*t*-Bu の場合、水溶液中と気相中では反応経路が大きく異なること、また、水溶液中における S_N1 型の反応経路として、イオン対の状態を経由することを、初めて明らかにした。

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 (DR-SFG 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。我々は、DR-SFG 分光法による界面分子種の電子および振動状態に関する詳細な情報の獲得を目指して研究を進めている。この目的のために本年度は以下の3つの研究を行った。1.SFG 分光の実験で安定した測定信号を得るには、入射レーザービームのポインティングの安定性が必要である。ビーム位置を検出しながらミラーの向きを制御し安定化する付加装置を自作し、現有する SFG 分光装置の長時間安定性を向上させた。2.D 体または L 体の酒石酸分子と共に形成させたポルフィリンのカイラルな J-会合体薄膜について、電子振動二重共鳴 SFG 分光による薄膜のキラリティの検出実験を行った。円偏光二色性では検出できなかった厚さ 40 ナノメートルの薄膜のキラリティを SFG 分光によって検出することができた。3.異なる鎖長のアルキル鎖でアデニンを固定した数種類の単分子膜を作製し、芳香族分子に対して感度が高い電子振動二重共鳴 IR-UV SFG 分光法によって SFG スペクトルを測定した。単分子膜のスペクトルがアルキル鎖長に依存して変化することを見いだした。

○発表原著論文

- M. Jieli, T. Miyake and M. Aida (2007) Enumeration of Topology-Distinct Structures and Possible Stable Structures of Protonated Water Clusters, $H_3O^+(H_2O)_{n-1}$ ($n \leq 5$). *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **80**(11), 2131–2136.
- J. Nakazawa, Y. Sakae, M. Aida, and Y. Naruta (2007) Kinetic Investigations of the Process of Encapsulation of Small Hydrocarbons into a Cavitand-Porphyrin. *Journal of Organic Chemistry*, **72**(25), 9448–9455.

- T. Matsubara, M. Dupuis and M. Aida (2007) Ab initio ONIOM-Molecular dynamics (MD) study on the deamination reaction by cytidine deaminase. *Journal of Physical Chemistry B*, **111**, 9965–9974.
- M. Furukawa, H. S. Kato, M. Taniguchi, T. Kawai, T. Hatsui, N. Kosugi, T. Yoshida, M. Aida, and M. Kawai (2007) Electronic states of the DNA polynucleotides poly(dG)-poly(dC) in the presence of iodine. *Physical Review B*, **75**, 045119.
- T. Matsubara, M. Dupuis and M. Aida (2007) The ONIOM molecular dynamics method for biochemical applications: cytidine deaminase. *Chemical Physics Letters*, **437**(1–3), 138–142.
- N. Akai, K. Ohno and M. Aida (2007) Photochemistry of 2-(methylamino)pyridine in a low-temperature argon matrix: Amino-imino tautomerism and rotational isomerism. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **187**, 113–118.
- T. Yoshida and M. Aida (2007) BSSE-corrected Three-body Interaction Energy in the Recognition of GC Base Pair by Asparagine. *Chemistry Letters*, **36**(1), 124–125.
- T. Maeda and T. Ishibashi (2007) Infrared-ultraviolet sum-frequency generation spectrometer with a wide tunability of the ultraviolet probe. *Applied Spectroscopy*, **61**(5), 459–464.
- A. Yamakata, T. Ishibashi, H. Onishi (2007), Time-resolved Infrared Absorption Study of Nine TiO₂ Photocatalysts, *Chemical Physics*, **339**, 133–137.

○国際会議

- T. Nagahara, M. Aida, and T. Ishibashi: Electronically-Vibrationally Resonant Sum Frequency Generation: Application to Chiral Spectroscopy of Thin Films of Porphyrin, The Annual Meeting of the Spectroscopical Society of Japan (Nov. 2007, Tokyo, Japan) (招待講演)
- T. Ishibashi: Vibrationally-electronically doubly-resonant SFG spectroscopy of interface species, Tokyo International Symposium on Time- and Space-resolved Vibrational Spectroscopy (Jan. 2008, Tokyo, Japan) (招待講演)
- T. Maeda, T. Nagahara, M. Aida, and T. Ishibashi: Multiplex SFG spectrometer for the measurement of electronically-vibrationally doubly-resonant excitation profile, , The Annual Meeting of the Spectroscopical Society of Japan (Nov. 2007, Tokyo, Japan) (ポスター)
- T. Yoshida, M. Aida: BSSE-corrected many body interaction energy in the recognition site of DNA by protein, International Symposium on Molecular Theory for Real Systems (Nov. 2007, Kyoto, Japan) (ポスター)
- T. Yoshida, M. Aida, A. Sarai: DNA base-amino acid interaction: Interaction free energy landscape, International mini-symposium on liquids, (May 2007, Okayama, Japan) (ポスター)
- M. Jieli, M. Aida: Possible stable structures and infrared spectra of protonated water clusters (H₃O)⁺(H₂O)_{n-1} (n≤6), The 3rd Asian Pacific Conference on Theoretical & Computational Chemistry (3rd APCTCC) (Sept. 2007, Beijing, China) (ポスター)
- M. Ohisa, M. Aida: Two-Dimensional free energy surface on alkyl halide/halide exchange reaction in aqueous solution using QM/MM-MC method, International Mini-Symposium on Liquids (May 2007, Okayama, Japan) (ポスター)
- M. Ohisa, M. Aida: Two-dimensional free energy surface using QM/MM'-MC method on alkyl halide/halide exchange reaction in aqueous solution, Asia Pacific Conference on Theoretical and Computational Chemistry (3rd APCTCC) (Sept. 2007, Beijing, China) (ポスター)
- M. Ohisa, M. Aida: Two-dimensional free energy surface using QM/MM'-MC method on alkyl chloride/chloride exchange reaction in aqueous solution, 1st International Symposium on "Molecular Theory for Real Systems" (Jul. 2007, Kyoto, Japan) (ポスター)

- M. Ohisa, M. Aida: Molecular Approaches to Complex Liquids System "A theoretical study on alkyl halide/halide exchange reaction path in aqueous solution", Joint Conference of JMLG/EMLG Meeting 2007 and 30th Symposium on Solution Chemistry of Japan (Nov. 2007, Fukuoka, Japan) (ポスター)
- T. Yamada, M. Aida: Fundamental absorption frequency from quasi-classical direct ab initio MD, International Mini-Symposium on Liquids Beijing
- T. Yamada, M. Aida: Fundamental frequency and mean structure from quasi-classical direct ab initio MD, 1st International Symposium on "Molecular Theory for Real Systems" (Jul. 2007, Kyoto, Japan) (ポスター)
- T. Yamada, M. Aida: Fundamental frequencies and structural parameters from quasi-classical direct ab initio MD, 2nd Russian-Japanese Seminar, "Molecular and Biophysical Magnetoscience" (Sep. 2007, Orenburg, Russia) (ポスター)
- T. Ishibashi: Electronically-Vibrationally doubly resonant SFG spectroscopy: a sensitive and selective probe for aromatic molecules at interfaces, Molecular Science and Chemical Biology of Biomolecular Function (Nov. 2007, Okazaki, Japan)
- S. Sakata, M. Aida: Puckering motion from the perspective of vibrational excitation, 2nd Russian-Japanese Seminar, "Molecular and Biophysical Magnetoscience" (Sep. 2007, Orenburg, Russia) (ポスター)

○国内学会

- 相田 美砂子: 水溶液内反応の量子化学シミュレーション。日本化学会第 1 回関東支部大会 (2007 年 9 月, 東京) (依頼講演)
- 石橋 孝章: 赤外可視和周波分光法とその有機薄膜への応用。早稲田大学理工学術院大学院講演会, 東京(2007年6月, 東京)(依頼講演)**
- 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: レーザービームの位置制御装置とその和周波分光への適用 (Laser Beam Position Controller and its Application to SFG Spectroscopy)。光化学討論会 (2007 年 9 月, 松本)
- 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: ポルフィリン会合体の電子振動二重共鳴キラル SFG。第 1 回分子科学討論会 (2007 年 9 月, 仙台)
- 杉本 廣之, 松原 世明, 相田 美砂子: ローヤルゼリーの成分とエストロゲン受容体との相互作用に関する理論的考察。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: Quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた多原子分子の IR および Raman スペクトル。第 10 回理論化学討論会 (2007 年 5 月, 名古屋) (一般講演)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた水分子の基本音と構造パラメータの計算。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 東広島) (一般講演)
- 飯田 裕美, 松原 世明, 相田 美砂子: チミンダイマー(6-4)生成物及びその S 置換体の修復過程についての理論化学的研究。日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山) (一般講演)
- 宮本 秀範, 相田 美砂子: グリシンの異性化における水和効果についての理論化学。INSAM シンポジウム 2007 (2007 年 11 月, 東広島) (一般講演)
- 正木 竜太, 相田 美砂子: 核酸塩基間での互変異性化についての理論化学的研究。INSAM シンポジウム 2007 (2007 年 11 月, 東広島)
- 前田 晃宏, 石橋 孝章: 二酸化チタン光触媒によるピバル酸分解反応の時間分解赤外分光。第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007 年 12 月, 東広島) (一般講演)

- 赤瀬 大, 相田 美砂子: 全原子分極の水モデルを用いた水クラスター(H_2O)_n (n=3,4,5)の理論化学的研究。第4回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007年12月, 東広島) (一般講演)
- 坂田 修一, 相田 美砂子: テトラヒドロフランのパッカリングに関する理論化学的研究。第4回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (2007年12月, 東広島) (一般講演)
- 杰力 買合木提江, 相田 美砂子: プロトン化水クラスター $\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ (n=4~6)の安定構造とIR スペクトルについての理論化学的研究。実在系の分子理論 A02・A03 班合同研究会—実験と理論のインタープレイ— (2007年11月, 東京) (ポスター)
- 前田 俊樹, 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: 振動 SFG スペクトルの可視プローブ波長依存性 - 自動化測定を試み。第1回分子科学討論会 (2007年9月, 仙台) (ポスター)
- A. Padermshoke, Y. Katsumoto, and M. Aida: Double Proton Transfer-Induced Tautomerism of 4(3H)-Pyrimidinone Studied by IR Spectroscopy and Quantum Chemical Calculations, The Japan Conference on Molecular Structure 2007 (Sep. 2007, Sendai, JAPAN) (ポスター)
- 吉田 智喜, 相田 美砂子: アミノ酸側鎖と核酸塩基対との相互作用における多体の相互作用エネルギー。第1回分子科学討論会 (2007年9月, 仙台) (ポスター)
- T. Yoshida, H. Doi, M. Aida, H. Kono, S. Kumar, M. M. Gromiha, A. Sarai: Multicanonical and Systematic Sampling Approaches to Calculate Interaction Free Energy Landscapes between DNA Bases and Protein Side Chains, CBI 学会 2007 年大会 (2007年10月, 東広島) (ポスター)
- T. Yoshida, H. Doi, M. Aida, H. Kono, S. Kumar, M. M. Gromiha, A. Sarai: Interaction Free Energy Landscapes between DNA Bases and Protein Side Chains,” 日本生物物理学会第45回年会 (2007年12月, 横浜) (ポスター)
- 杰力 買合木提江, 相田 美砂子: プロトン化水クラスター($\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ (n=4~6)の条件付水素結合パターンと安定構造。第10回理論化学討論会 (2007年5月, 名古屋) (ポスター)
- 宮本 秀範, 相田 美砂子: 水溶液中におけるグリシンの中性-両性イオンの変換に伴う自由エネルギー変化。第1回分子科学討論会 2007 (2007年9月, 仙台) (ポスター)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた多原子分子の IR/Raman スペクトルと平均構造。第1回分子科学討論会 (2007年9月, 仙台) (ポスター)
- 安藤 広司, 相田 美砂子: direct ab initio MD 法を用いた分子の平均構造についての理論化学的研究。第30回情報化学討論会 (2007年11月, 京都) (ポスター)
- 正木 竜太, 相田 美砂子: 核酸塩基間におけるプロトン交換反応についての理論化学的研究。第57回有機反応化学討論会学会発表 (2007年9月, 東広島) (ポスター)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた水分子の基本音と構造パラメータの計算。実在系の分子理論 (A02・A03 班合同研究会 —実験と理論のインタープレイ—) (2007年11月, 東京) (ポスター)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた r0, rz, および rg 構造と基本音の計算。平成19年度スーパーコンピュータワークショップ (2008年2月, 岡崎) (ポスター)
- 正木 竜太, 相田 美砂子: 核酸塩基の異性化および突然変異についての非経験的分子軌道法による研究。A01 班勉強会 複合電子系へのアプローチ: 理論化学の新発展を求めて (2007年11月, 福岡) (ポスター)
- 宮本 秀範, 相田 美砂子: グリシンの水和構造についての理論化学的研究。平成19年度スーパーコンピュータワークショップ (2008年2月, 岡崎) (研究会) (ポスター)

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)

相田 美砂子, 女性研究者支援プロジェクト (科学技術振興調整費「女性研究者支援モデル育成」
リーダーシップを育む広大型女性研究者支援) 協力者 (2007-2009)

○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 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 計画研究

「SFG分光法による有機および生体分子膜界面の電子振動状態の研究」(代表: 石橋 孝章)

学長裁量経費 晝馬研究支援金

「金属基板上的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 19 年度（2007 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
文部科学省科学研究費補助金	特定領域研究	10
	基盤研究(A)	2
	基盤研究(B)	6
	基盤研究(C)	4
	萌芽研究	2
	若手研究(A)	2
	若手研究(B)	2
	若手研究(スタートアップ)	1
その他の研究費（公募）		14
委任経理金		3

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 2007 (仙台), 2007 年 9 月
 井口佳哉, 第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム (広島), 2007 年 12 月
 井上克也、日本化学会春季年会
 井上克也、錯体化学討論会
 井上克也、東京大学物性研究所研究会
 井上克也、福山 CREST 研究会
 速水真也、錯体化学討論会
 速水真也、配位光化学討論会
 速水真也、日本化学会春季年会
 水田 勉, 第 57 回錯体化学討論会 (2007 年 9 月, 名古屋)
 水田 勉, 2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月, 岡山)
 藤原照文, 日本分析化学会第 56 年会, 徳島大学, 徳島市, 2007 年 9 月
 塚原 聡, 日本分析化学会第 68 回分析化学討論会, 宇都宮大学, 宇都宮市, 2007 年 5 月
 塚原 聡, 日本分析化学会第 56 年会, 徳島大学, 徳島市, 2007 年 9 月
 塚原 聡, 第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, 広島大学, 東広島市, 2007 年 12 月
 岡本泰明, 日本分析化学会第 56 年会, 徳島大学, 徳島市, 2007 年 9 月
 灰野岳晴, 第 2 回ホスト・ゲスト化学シンポジウム, 大阪, 2007 年 5 月
 灰野岳晴, 第 3 7 回構造有機化学討論会, 札幌, 2007 年 10 月
 灰野岳晴, 2007 年日本化学会西日本大会, 岡山, 2007 年 11 月
 灰野岳晴, 第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, 東広島, 2007 年 12 月
 灰野岳晴, 日本化学会第 8 8 春季年会, 池袋, 2008 年 3 月
 岩本 啓, 2007 年日本化学会西日本大会, 岡山, 2007 年 11 月
 山崎勝義, 2007 年日本化学会西日本大会, 岡山, 2007 年 11 月
 山崎勝義, 第 4 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, 東広島, 2007 年 12 月
 山本陽介, International Conference on Phosphorus Chemistry (ICPC-2007) (Apr., 2007, Xiamen, China)
 河内 敦, 2007 年日本化学会西日本大会 (2007 年 11 月 10 日～11 日, 岡山)
 河内 敦, 第 54 回有機金属化学討論会 (2007 年 10 月 27 日～28 日, 広島)
 河内 敦, 日本化学会第 88 春季年会 (2008 年 3 月 26 日～30 日, 東京)
 松川史郎, 日本化学会第 88 春季年会 (2008 年 3 月 26 日～30 日, 東京)
 安倍 学, 第 3 回分子情報ダイナミクス研究会, 吹田, 2007 年 8 月
 安倍 学, 2007 年日本化学会西日本大会, 岡山, 2007 年 11 月
 安倍 学, 第 88 日本化学会春季年会, 東京, 2008 年 3 月
 小島聡志, 2007 年日本化学会西日本大会, 岡山, 2007 年 11 月
 高木隆吉, 第 88 日本化学会春季年会, 東京, 2008 年 3 月
 岡田和正, 第 23 回化学反応討論会, 神戸, 2007 年 6 月
 岡田和正, 軟 X 線実験技術研究会／原子・分子の内殻励起研究会合同研究会, 西播磨, 2007 年 10 月
 岡田和正, 第 21 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 草津, 2008 年 1 月

勝本之晶，2007 年日本化学会西日本大会，岡山，2007 年 11 月
相田美砂子，CBI 学会 2007 年大会（2007 年 10 月，東広島）
石橋孝章，第1回分子科学討論会2007仙台（2007年9月，仙台）

・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-)
 井上克也、固体物理、誌友 (2007.3-)
 藤原照文、日本分析化学会、「分析化学」誌編集委員 (2003～2004)
 塚原 聡、日本溶媒抽出学会、「Solv. Extr. Res. Devel. Jpn.」誌編集委員 (2007～)
 高口博志、日本化学会「化学と工業」トピックス編集委員 (2001-2002)
 高口博志、原子衝突研究協会編集委員 (2006)
 山本陽介、Journal of Physical Organic Chemistry, Editorial Board (2005-)
 岡田和正、日本分光学会「分光研究」編集委員(2003-2007 年度)
 相田美砂子、日本生物物理学会「生物物理」編集委員 (2003-2004)

・学協会役員，委員

江幡孝之、分子科学会幹事(2001～)
 江幡孝之、分子科学会運営委員(2007-)
 江幡孝之、実力養成化学スクール「物理化学研修コース」主査
 江幡孝之、日本学術振興会科学研究費委員会専門委員(2006-)
 井口佳哉、分子科学会総務委員会委員(2006-)
 井口佳哉、日本分光学会編集委員(2007-)
 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 (2005-)
 井上克也、高輝度放射光実験施設(Spring-8) 利用者懇談会、委員 (2006-)
 井上克也、高輝度放射光実験施設(Spring-8)、キラル磁性研究会、会長 (2006-)
 井上克也、日本化学会中国四国支部、事務局幹事 (2007)
 三吉克彦、日本化学会オブザーバー理事 (2006 年 7 月-2007 年 2 月)
 三吉克彦、錯体化学討論会運営委員 (2005 年 10 月-2007 年 9 月)
 三吉克彦、近畿化学協会有機金属部会幹事 (2006 年 4 月-)
 三吉克彦、日本化学会理事 (2007 年 3 月-2009 年 2 月)
 水田 勉、日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2005 年 3 月-2006 年 2 月)
 水田 勉、日本化学会中国四国支部会計幹事 (2006 年 3 月-2007 年 2 月)
 水田 勉、錯体化学会理事 (2006 年 10 月-2008 年 9 月)
 水田 勉、錯体化学討論会運営委員 (2006 年 10 月-)
 藤原照文、日本化学会中国四国支部 西日本大会幹事 (2003)
 藤原照文、日本化学会中国四国支部 庶務幹事 (2004)
 藤原照文、日本化学会中国四国支部 事務局長 (2007)
 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、日本分析化学会中国四国支部 常任幹事 (2006～)
 藤原照文、日本鉄鋼協会 評議員 (2005～)
 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～)
 灰野岳晴, 新規素材探索研究会幹事 (2001－)
 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, ホスト・ゲスト化学研究会幹事 (2006－)
 灰野岳晴, 有機合成化学協会中国四国支部幹事 (2007－)
 灰野岳晴, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2008－)
 岩本 啓, 生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事 (2007－)
 山崎勝義, 日本分光学会代議員 (2004 度)
 山崎勝義, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2006 度)
 山崎勝義, 日本分光学会中国支部会計監査 (2006 度)
 高口博志, 原子衝突研究協会行事委員 (2004－2007 度)
 高口博志, 日本化学会代議員 (2007－)
 安倍 学, 分子情報ダイナミクス研究会事務局(2005-2007)
 安倍 学, 分子情報ダイナミクス研究会代表(2007-)
 小島聡志, 有機合成化学協会中国四国支部事務局 (2003-)
 田林清彦, 日本化学会中国四国支部事務局長 (2000)
 田林清彦, 日本化学会中国四国支部幹事 (2001)
 田林清彦, 日本化学会代議員 (2007.11.1-)
 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 (1999－2007)

・ 外部評価委員など

井上克也, Zaragoza 大学(スペイン)、博士号審査委員 (2007)
 山本陽介, IUPAC Commission II-2, National Representative(2002－)
 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－)

・ 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
 三吉克彦, 第54回有機金属化学討論会広島実行委員
 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 (2006～2007)
 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 (2006～2007)

灰野岳晴, 第6回機能性ホストゲスト化学研究会サマーセミナー実行委員長、2000年
 灰野岳晴, 第18回シクロファン研究会実行委員、2003年
 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
 岩本 啓, 第6回機能性ホストゲスト化学研究会サマーセミナー実行委員、2000年
 岩本 啓, 第18回シクロファン研究会実行委員、2003年
 岩本 啓, 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、2005年
 高橋 修, 第16回化学反応討論会実行委員会委員 (2000)
 山崎勝義, 第18回化学反応討論会実行委員会委員 (2002)
 高口博志, 第14回理論化学シンポジウム実行委員会委員 (2007)
 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, The 14th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS 14)
 山本陽介, 第41回有機反応若手の会
 河内 敦, 第41回有機反応若手の会
 安倍 学, 基礎有機化学討論会組織委員 (2007-)
 田林清彦, 第16回化学反応討論会実行委員会委員 (2000)
 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, 2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2003-2004)
 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, 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)
 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)
 山崎勝義, 広島大学図書館 リポジトリ・アドバイザー (2007)
 山本陽介, 化学系研究設備有効活用ネットワーク中国地域委員長 (2005-)
 山本陽介, 中国四国・化学と工業懇話会運営委員長 (2007-)
 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)

一)

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

三吉克彦, 広島県立井口高等学校 社会人・大学教員による模擬授業 (2008 年 1 月)
 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)
 水田 勉, 鳥取県立鳥取東高等学校 SSH 自然化学実験 (2007 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)
 久保和幸, 鳥取県立鳥取東高等学校 SSH 自然化学実験 (2007 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「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)
 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)
 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)
 山本陽介, 2007 年 7 月, 広島大学附属高等学校 SSH 事業
 山本陽介, 2007 年 11 月, 広島県立皆実高校出張講義
 安倍 学, 出張講義, 2007 年 11 月 17 日, 皆実高等学校
 田林清彦, 模擬授業 (2007 年 9 月) 広島県立広島高等学校
 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)
 相田美砂子, 「コンピュータで化学する」, 広島県立呉宮原高等学校 (呉市), 2007 年 10 月 24 日

・講習会・セミナー講師

速水真也, 第3回配位化合物の光化学夏の学校(講師)、大阪、2007年8月6-7日
 灰野岳晴, リエゾンフェア JST/広島大学「イノベーションブリッジ」, 2007 年 10 月, 東京, ナノ空間で組織化された超分子集合体の構築
 灰野岳晴, 東京工業大学 学術講演会, 2008 年 3 月, 東京, ナノ空間で組織化された超分子集合体の合成と機能。
 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)
 山崎勝義, 広島大学理工フェア「サイエンス(=科学=理学)の魅力と楽しみ方」(2007 年 5 月, 福山商工会議所)

- 山崎勝義, 日本化学会実力養成化学スクール「化学反応論・遷移状態理論」(2007年9月, 日本化学会)
- 山崎勝義, 広島大学図書館学術講演会「単行書の公開と機関リポジトリへの期待」(2007年10月, 広島大学図書館)
- 山崎勝義, 中四国6大学による第1回理系大学教育に関する研究フォーラム「協調演習による理学的知力の育成支援」(2007年12月, 高知大学総合研究棟)
- 山崎勝義, 図書館における学習環境提供に関する懇談会「協調演習による理学的知力の育成支援」(2008年2月, 広島大学図書館)
- 高口博志, 上智大学理工学部物理学科コロキウム「開殻系原子分子の衝突過程と化学反応」(2007年5月, 上智大学)
- 高口博志, 第4回原子・分子・光科学(AMO)討論会ディスカッションリーダー (2007年5月, 電気通信大学)
- 高口博志, 分子科学若手の会夏の学校講師「ラジカル分子の反応と分光の基礎」(2007年8月, 長良川会館)
- 高橋 修, 情報メディア教育研究センター&INSAM 共同企画: ハイパフォーマンスコンピューティングセミナー「数値シミュレーション技法基礎セミナー」(2007年9月, 広島大学情報メディア教育研究センター)
- 安倍 学, 国立交通大学, 2007年9月19日, 竹中, Selective Formation of Oxetanes via Radical Ion Pairs and Triplet 1,4-Diradicals
- 安倍 学, 国立新華大学, 2007年9月20日, 竹中, Denitrogenation Mechanism of Cyclic Azoalkanes: Electronic Effects and Dynamics Effect
- 安倍 学, 国立台湾大学, 2007年9月21日, 台北, Generation of Singlet 1,3-Diradicals and Their Chemistry
- 勝本之晶, JAIMA コンファレンス日本分光学会赤外・ラマン分光部会講習会, (2006年8月, 千葉), 振動スペクトルの解析法: 振動スペクトルの多変量解析〜ケモメトリックス〜入門

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

小澤 孝一郎, 古武 弥一郎, 原田 隆範

工学研究科

森本 康彦, 大倉 和博

理学研究科特任教員 (常勤的非常勤)

岩田 末廣, 石野 洋子, 松原 世明, 榮 慶丈

理学研究科特任教員 (非常勤)

神沼 二眞

客員教授

細矢 治夫, 平野 恒夫, 齊藤 肇, 金子 元久,

諸熊 奎治 (米国エモリー大学教授),

竹内 敬人

伊藤 真人 (創価大学工学部教授)

客員助教授

平田 聡 (米国フロリダ大学化学科助教授)

客員研究員

白井 文幸 (アステラス製薬株式会社化学研究所),

尾島 典行 (島津製作所ライフサイエンス研究所),

Michel Dupuis (Pacific Northwest National Laboratory, Associate Director)

博士研究員

永原 哲彦, 吉田 智喜, Adchara Padermshoke, Ran Jiong

受託研究員

杉本 廣之

○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 19 年度の活動の記録

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

《1》量子生命科学プロジェクト研究センターの拠点

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

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

- ① 量子生命科学セミナー」の実施（第 1 回から第 30 回）。毎週金曜日 14：35～16：05 に、前期（第 15 回まで）は理学部 E104 室において、後期（第 16 回以降）は理学部 E210 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 2007 年 4 月 13 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 2007 年 4 月 20 日（金）

題目：トポロジカルインデックス Z の数学的展開

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 3 回 2007 年 4 月 27 日（金）

題目：計算機で化学する（その 4）：いのちを司る分子たちの相互作用

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 4 回 2007 年 5 月 11 日（金）

題目：深海微生物由来ジヒドロ葉酸還元酵素の酵素機能に及ぼす圧力の影響

講師：村上 千穂（広島大学大学院理学研究科数理分子生命理学専攻 博士課程後期）

第 5 回 2007 年 5 月 18 日（金）

題目：大学での計算創薬研究の試み

- 講師：原田 隆範（広島大学大学院理学研究科 特任助教，広島大 QuLiS）
- 第 6 回 2007 年 5 月 25 日（金）
 題目：天然資源に由来する化合物探索研究
 講師：松浪 勝義（広島大学大学院医歯薬学総合研究科薬学専攻創薬科学講座 講師）
- 第 7 回 2007 年 6 月 1 日（金）
 題目：インフォマティクスの創薬への活用
 講師：松末 朋和（持田製薬株式会社 創薬研究所 基盤研究室長）
- 第 8 回 2007 年 6 月 8 日（金）
 題目：第 1 列遷移金属ラジカル量子化学
 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 9 回 2007 年 6 月 15 日（金）
 題目：「環境化学」に関する話題 ―環境汚染に如何に立ち向かうか―
 講師：佐久川 弘（広島大学大学院生物圏科学研究科教授，総合科学部自然環境科学プログラム）
- 第 10 回 2007 年 6 月 22 日（金）
 題目：定量的構造活性相関の最前線
 講師：中馬 寛（徳島大学大学院 ヘルスバイオサイエンス研究部 生体情報薬科学部門 教授）
- 第 11 回 2007 年 6 月 29 日（金）
 題目：生理活性ペプチドのインシリコ探索
 講師：河合 隆利（エーザイ株式会社コア・テクノロジー研究所バイオインフォマティクスグループ統轄課長）
- 第 12 回 2007 年 7 月 6 日（金）
 題目：バイオインフォマティクス分野への進化型計算の適用例
 講師：大倉 和博（広島大学大学院工学研究科機械システム専攻 教授）
- 第 13 回 2007 年 7 月 13 日（金）
 題目：製薬企業における計算化学
 講師：富永 幸雄（大日本住友製薬（株）ゲノム科学研究所 構造生物研究 G）
- 第 14 回 2007 年 7 月 20 日（金）
 題目：フィボナッチ数の現れる化学と生物学の諸問題
 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 15 回 2007 年 7 月 27 日（金）
 題目：磁気緩和とその意義
 講師：齊藤 肇（広島大学客員教授，姫路工業大学名誉教授）
- 第 16 回 2007 年 10 月 5 日（金）
 題目：『NaBiT シンポジウム「計算化学から生命へ」』
- 第 17 回 2007 年 10 月 12 日（金）
 題目：二項定理とパスカルの三角形の化学への応用
 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 18 回 2007 年 10 月 19 日（金）
 題目：環境中に存在する化学物質の脳神経系に対する影響
 講師：古武 弥一郎（広島大学大学院医歯薬学総合研究科 講師）
- 第 19 回 2007 年 10 月 26 日（金）
 題目：化学企業での研究開発

- 講師：岩崎 秀治（クラレルミナス株式会社 技術開発部 開発主管）
- 第 20 回 2007 年 11 月 2 日（金）
 題目：A multi-scale approach to study order/disorder transitions in ice physics and semiconductor alloy
 講師：Professor Jer-Lai Kuo（School of Physical and Mathematical Sciences, Nanyang Technological University, Singapore）
- 第 21 回 2007 年 11 月 9 日（金）
 題目：最近の米国大学院教育と成功するキャリア
 講師：神立 景子（米国大使館 科学・技術・環境課 上級科学担当スペシャリスト）
- 第 22 回 2007 年 11 月 16 日（金）
 題目：めぐり合い ― 我が師，我が友
 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 23 回 2007 年 11 月 30 日（金）
 題目：私達のからだは，どのように作られるのか？ ～カエルの卵を用いて生命の神秘に迫る～
 講師：竹林一鈴木 公子（広島大学大学院理学研究科附属両生類研究施設 多様化機構研究部門，日本学術振興会 特別研究員（R P D））
- 第 24 回 2007 年 12 月 7 日（金）
 題目：階層的材料シミュレーションと粗視化
 講師：兵頭 志明（(株) 豊田中央研究所 材料分野 計算物理研究室長）
- 第 25 回 2007 年 12 月 14 日（金）
 題目：科学教育の歴史的展開
 講師：磯崎 哲夫（広島大学大学院教育学研究科 自然システム教育学講座 准教授）
- 第 26 回 2008 年 1 月 11 日（金）
 題目：計算機で化学する（その 5）： 地球を含む太陽系の大気環境に量子化学で迫る
 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 27 回 2008 年 1 月 18 日（金）
 題目：酒類総合研究所での講演会及び見学会
 講師：岩下 和裕（酒類総合研究所）
- 第 28 回 2008 年 1 月 25 日（金）
 題目：起業家の道，その成長プロセス
 講師：山本 紀道（(株)ルネサンス 代表取締役）
- 第 29 回 2008 年 2 月 1 日（金）
 題目：科学技術は「社会において」どのように制御されうるのか：コンセンサス会議
 講師：堀江 剛（広島大学大学院総合科学研究科 人間科学部門 准教授）
- 第 30 回 2008 年 2 月 8 日（金）
 題目：院生の研究発表
 (1) 明田 加苗 （数理分子生命理学専攻・M2）
 『がん遺伝子産生タンパク質 RegIV の結晶構造解析に向けた大量調製法の確立』
 (2) 飯田 裕美 （化学専攻・M2）
 『光回復酵素の修復過程についての理論化学的研究』
 (3) 神田 慎太郎 （数理分子生命理学専攻・M2）
 『MALDI-TOF MS を用いた新規プロテオミクス法の開発』
 (4) 七種 和美 （数理分子生命理学専攻・M2）

- 『質量分析法を用いた Melittin の膜トポロジーのダイナミクス』
 (5) 堺 真通 (化学専攻・M2)
 『電子衝撃法によるピリジン環の特異的解離』
 (6) 中野 祥吾 (数理分子生命理学専攻・M1)
 『窒素代謝に関わるタンパク質の X 線結晶構造解析』
 (7) 前田 晃宏 (化学専攻・M2)
 『時間分解赤外分光法を利用した二酸化チタン光触媒反応の研究』
 (8) 光岡 広樹 (化学専攻・M1)
 『ボールレンズ中空ファイバーラマンプローブを用いた生体計測研究』
 (9) 宮本 秀範 (化学専攻・M2)
 『グリシンの異性化に伴う自由エネルギー変化についての理論化学的研究』
 (10) 渡部 秀典 (数理分子生命理学専攻・M2)
 『放射光真空 CD 分光法によるタンパク質の高精度二次構造解析』

② 第 5 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 5 回 QuLiS シンポジウム「融合領域の科学」

日時：2008 年 3 月 13 日（金）13：00～17：20

場所：広島大学理学部大会議室

プログラム：

第 1 部「融合領域としての水素結合系」

1. 13:00～13:45 松本 正和 (名古屋大学物質科学国際研究センター)
「ネットワーク性液体の幾何学と動力学と統計力学」
2. 13:45～14:30 天羽 優子 (山形大学理学部 物質生命化学科)
「超臨界のアルコールの低振動数ラマン散乱」

休憩 (14:30～14:45)

3. 14:45～15:30 富永 靖徳 (お茶の水女子大学大学院 人間文化創成科学研究科)
「超臨界水のラマン分光」

4. 15:30～16:15 菅原 洋子 (北里大学理学部)
「ヌクレオシド、ヌクレオチド結晶における結晶水の動的挙動の解析」

休憩 (16:15～16:30)

第 2 部「岩田末廣教授最終講義」

5. 16:30～17:30 岩田 末廣 (広島大学大学院理学研究科)
 1. 余剰電子系における電子-水素結合の役割
 2. 分子間相互作用の高精度高効率計算法

③ NaBiT 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 2007 年 4 月 16 日

講演題目：Theoretical Studies for Spin Frustrations and Spin Correlations in Mn and Cr Containing High Spin Molecular Magnets

講師：Prof. Vitalii Berdinskii (Orenburg State University, Russia)

第 2 回 NaBiT セミナー 2007 年 4 月 16 日

講演題目：Spin Solitons in Molecular Magnetic Materials With The Chiral Structure

講師：Prof. Roman Morgunov (Institute of Problems of Chemical Physics, Russia)

第3回 NaBiT セミナー 2007 年 10 月 29 日

講演題目：Isotope Effects in Studies of Enzyme-Catalyzed Dehalogenations

講師：Professor Piotr Paneth (Institute of Applied Radiation Chemistry Technical University of Lodz)

第4回 NaBiT セミナー 2007 年 11 月 1 日

講演題目：The Morphological Development of H-bond network in protonated water/methanol

講師：Professor Jer-Lai Kuo (School of Physical and Mathematical Sciences, Nanyang Technological University, Singapore)

第5回 NaBiT セミナー 2008 年 1 月 16 日

講演題目：Charge Transfer, Transport, and Reactivity in Complex Molecular Environments: Theoretical Studies for the Hydrogen Initiative

講師：Dr. Michel Dupuis (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 クラスター）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。

⑥2007 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 の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20年3月1日現在）および平成19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
	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
	田林 清彦	化学専攻分子反応化学講座
	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
	平田 敏文	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	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
	本水 昌二 (非常勤)	岡山大学大学院自然科学研究科
	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
准教授	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
	高口 博志	化学専攻分子反応化学講座
	小島 聡志	化学専攻分子反応化学講座
	齋藤 健一	自然科学研究支援センター
	塚原 聡	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
	水田 勉	化学専攻分子構造化学講座
助教	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
	松川 史郎	化学専攻分子反応化学講座
	アドバイザー松崎 尹雄 (非常勤)	分子設計・X線解析アドバイザー

【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19年度 化学科長 山崎 勝義
 副化学科長 楯 真一
 化学科長補佐 片柳 克夫

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19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 井口 秋田 久保 岡本 岩本 高橋 河内 小島 岡田 石橋 楯 芦田
化学実験委員	◎ 泉 秋田 久保 福原 勝本 岩本 高木
教務問題検討委員	◎ 小島 井上 山崎 泉 岡田 塚原
情報処理委員	◎ 相田 岡本 久保 高木 高橋 芦田
野外研修企画委員	◎ 安倍 山崎 福原 大前 勝本 秋田 芦田
当番研究グループ	物理環境化学研究グループ
安全衛生委員	◎ 田林 福原 秋田 久保 塚原 岩本 高橋 河内 平賀 勝本 石橋 藤原（好） 芦田 大前
危険薬品庫管理者	河内
シリンダーキャビネット室管理者	久保
就職担当	江幡 H18年10月～H19年9月末 井上 H19年10月～H20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、分子及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ます。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つけさせた上で、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します。特に、基礎実験技術の習得を含めた体系化した教育を行います。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もった人材を育成することも目標とします。

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、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ます。

具体的には、以下の目標を設定します。

- (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19年度化学科在籍学生数

平成19年5月1日現在

入 学 年 度	在 籍 学 生 数
平成19年度	73(11)
平成18年度	65(15)
平成17年度	66(17)
平成16年度	60(12)
平成15年度	11(0)
平成14年度	4(2)
平成13年度	2(0)
平成12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19年度	山崎，片柳，井口
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	河内
平成14年度	江幡，岡田
平成13年度	灰野
平成12年度	小島

・平成19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 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	有機化合物の構造と反応，有機化合物の機能，生理活性天然物質，生体機能化学
教養	3 前	必修	化学英語演習	河内	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	山崎	化学的情報の収集・整理・提供
専門	3 後	選択必修	先端化学	山崎	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	3 前	選択	化学インターンシップ	山崎	派遣研修・職業倫理
専門	1 後	必修	基礎物理化学A	藤原（好）	化学熱力学，状態方程式，熱力学第一・三法則，ギブスエネルギー，化学ポテンシャル
専門	1 後	必修	基礎物理化学B	井口	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	物理化学，光，物性，機能
専門	3 前	選択	システムバイオロジー	泉	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	片柳，泉，芦田，大前	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	量子化学，計算化学，情報化学，計算機
専門	3 後	必修	化学英語演習	片柳，江幡，石橋	化学英語
専門	2 前	必修	物理化学 IA	石橋	熱力学，化学平衡，相平衡，相律
専門	2 前	必修	物理化学 IB	岡田	調和振動子，剛体回転子，オービタル，動径分布関数，スピン，パウリの原理
専門	2 後	必修	物理化学 IIA	山崎	アンサンブル，ボルツマン分布，分配関数
専門	2 後	必修	物理化学 IIB	相田	電子構造，分子構造，量子化学
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	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，齋藤，岡田	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、分析化学の演習
専門	2 後	必修	有機化学演習	小島，平賀，岩本，高木	有機化学・演習・有機反応・有機構造・有機反応機構
専門	3 前後	必修	化学実験	泉	基礎化学実験・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	山崎	複雑反応系，反応断面積，遷移状態理論
専門	3 前	選択	分子構造化学	江幡	調和振動子、赤外吸収、多原子分子の基準振動、古典力学、量子力学
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，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、光化学反応、励起状態
専門	3 後	選択	集積化学	田林	分子集合体、クラスター、分子間相互作用、分子間エネルギー移動
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）、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、分光法、回折法、X線構造解析、立体構造
専門	3 前	選択	構造有機化学	灰野	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・生体機能化学・細胞化学
専門	3 後	選択	反応有機化学	安倍	転位反応、軌道相互作用、Woodward-Hoffmann 則
専門	3 後	選択	有機典型元素化学	山本	
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	山本	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	原子の基本的性質、電気陰性度と電子親和力、混成軌道とVSEPR則、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	安倍	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	速水	無機化学
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	2 後	必修	無機化学 III	三吉	遷移金属錯体、ルイス酸・塩基、結晶場分裂と安定化
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	泉	基礎化学実験、実験技能・操作、指導案作成、課題研究指導、中学校教諭(理科)一種免許状
教職	2 後		総合演習	山本、塚原、石橋	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	山崎	

集中講義 本水 昌二（岡山大学大学院自然科学研究科教授）

授業科目名： 分析化学特論（3・4年次生対象）

（担当：化学専攻分子構造化学講座分析化学研究グループ）

松崎 尹雄（前 三菱化学フェロー）

授業科目名： 構造ゲノミクス時代の創薬（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分子生物物理学研究グループ）

・担当授業科目一覧

平成19年度担当授業科目					
職	氏名	講義	演習	化学 実験	卒業 研究
教授	相田 美砂子	物理化学 IIB, 量子化学, 計算化学・同実習	化学演習 (分担)		◎
	安倍 学	反応有機化学, 有機化学 III			◎
	井上 克也	無機固体化学			◎
	江幡 孝之	基礎化学 A, 分子構造化学	化学英語演習 (分担)		◎
	楯 真一	生体高分子化学			◎
	谷本 能文	分子光化学			◎
	田林 清彦	集積化学			◎
	平田 敏文	化学概説 B, 生物化学			◎
	藤原 照文	機器分析化学, 化学概説 A			◎
	三吉 克彦	基礎無機化学, 無機化学 III	無機化学演習		◎
	本水 昌二	分析化学特論			
	山崎 勝義	教養ゼミ, 化学インターンシップ, 物理化学 II A, 先端化学, 反応動力学, Modern Chemistry			◎
	山本 陽介	有機化学 I, 有機典型元素化学, 基礎化学 B	総合演習		◎
	石橋 孝章	物理化学 IA	物理化学演習 II (分担), 化学英語演習 (分担), 総合学習 (分担)	○	◎
	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 (分担), 化学実験, 化学実験 A		◎	◎
准教授	井口 佳哉	基礎物理化学 B		○	◎
	岡田 和正	物理化学 IB	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, バイオインフォマティクス (分担)	物理化学演習 I, 化学英語演習 (分担)	○	◎
	河内 敦	有機分析化学	化学英語演習	○	◎
	小島 聡志	基礎有機化学	有機化学演習 (分担)	○	◎
	高口 博志				◎
	斎藤 健一	光機能化学	物理化学演習 II (分担)		◎
	塚原 聡	無機化学 II	総合演習 (分担)	○	◎
	中島 覚	放射化学			
	灰野 岳晴	有機化学 II, 構造有機化学		○	◎
	速水 真也	無機化学 I		○	◎
	藤原 好恒	基礎物理化学 A, 情報活用演習		○	◎
	水田 勉	有機金属化学		○	◎
	助教 秋田 素子			○	○
	芦田 嘉之	バイオインフォマティクス (分担)		○	○
	岩本 啓		有機化学演習 (分担)	○	○
	大前 英司	バイオインフォマティクス (分担)		○	○
	岡本 泰明			○	○
	勝本 之晶			○	○
	久保 和幸			○	○
	高木 隆吉		有機化学演習 (分担)	○	○
	高橋 修			○	○
	仲 一成 ¹				
	平賀 良知		有機化学演習 (分担)	○	○
	福原 幸一			○	○
	藤原 昌夫			○	○
	松川 史郎			○	○
アドバイザ	松崎 尹雄	構造ゲノミクス時代の創薬			

¹内地研究員

○ : 分担・補助 ◎ : 担当

・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。

・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	29単位(35)
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)	21単位(23)
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19年度入学生から適用する。

平成19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					
教養教育	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		2	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				○	○									
					インターネット・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			○												
	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												
	教養コア科目	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	○	○	○	○								
	基盤科目		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										
4			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	選択必修	○													
				情報数理概説	2			○												
				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	
専門教育	専門基礎科目	35	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					
			物理化学演習	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												
		15 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							○			
			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								○		
			有機典型元素化学	2								○		
			反応有機化学	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。詳細についてはデ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１９年度化学科卒業生進路状況

(平成 20 年 5 月 1 日現在)

() 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	医療・福祉	その他	小計	学校教育	小計			
56 (11)	0 (0)	6 (4)	2 (1)	0 (0)	1 (0)	5 (1)	2 (2)	1 (0)	17 (8)	0 (0)	0 (0)	37 (2)	1 (0)	1 (1)

2-3-4 卒業論文発表実績

【1】平成19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	4	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	6	藤原(照), 塚原, 岡本
構造有機化学研究グループ	5	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	3	山崎, 高口, 高橋
有機典型元素化学研究グループ	6	山本, 河内, 松川
反応有機化学研究グループ	5	安倍, 小島, 平賀, 高木
集積化学研究グループ	3	田林, 岡田, 勝本
量子化学研究グループ	4	相田, 石橋
数理分子生命理学専攻		
物理環境化学研究グループ	5	谷本, 藤原(好), 藤原(昌)
生物化学研究グループ	3	平田, 泉, 芦田
分子生物物理学研究グループ	5	楯, 片柳, 大前
自然科学研究支援センター		
光機能化学研究グループ	2	齋藤
計	60	

【2】平成19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)

- 赤瀬 大「水クラスター(H₂O)_n (n=3-5)の水素結合パターンについての理論化学的研究」(量子化学)
- 安久 弘起「強磁場を利用した微小重力環境における液滴の状態変化」(物理環境化学)
- 荒川 美紀「極微量蛍光分子のラマンスペクトル測定による金ナノネックレスの表面増強効果の検討」(光機能化学)
- 石田 圭佑「パーキンソン病原因タンパク質 synphilin-1 の結晶学的研究」(分子生物物理学)
- 今西 歩斗「ポルフィリンナノロッド懸濁液の吸光度に見られる振動」(物理環境化学)
- 上脇 隼一「ヌクレオソームシャペロン蛋白質 HMG2 の動的構造の解析」(分子生物物理学)
- 浦上 大輔「マルチフェロイクスを指向した有機・無機ハイブリット化合物の合成と測定」(固体物性化学)
- 遠藤 志穂「二次構造パーツ並べ換え体タンパク質 S2354 の結晶学的研究」(分子生物物理学)
- 岡本 睦功「超臨界流体中でのレーザーアブレーションによる金ナノ構造体の創製と溶媒による構造変化の観測」(光機能化学)
- 小田 成範「スクシンイミドエステルを利用した単分子膜の作製」(量子化学)
- 折本 美帆「N₂+O₂ 系の内挿移動最小二乗法によるポテンシャル面の決定」(反応物理化学)
- 川上 愛子「質量選別赤外光解離分光によるプロトン付加ギ酸クラスターの構造決定」(構造物理化学)
- 川崎 謙司「超音速ジェットレーザー分光によるベンゾクラウンエーテルの水分子クラスター包接構造の研究」(構造物理化学)
- 岸本 浩一「NMR による mRNA Capping Enzyme のドメイン配向解析」(分子生物物理学)
- 外本 裕一「オキサアルキルグリコールエーテルの熱物性」(構造物理化学)
- 吉川 俊郎「リン架橋[1.1]フェロセノファンと m-ターフェニルを骨格とした大環状 4 座リン配位子の合成ー環サイズ拡大の試み」(錯体化学)
- 國西 剛基「ホモプロリンメチルエステル誘導体の合成と不斉有機触媒能に関する研究」(反応有機化学)
- 久保崎範行「Poly(N-isopropylacrylamide)水溶液の相図に対する立体規則性の影響」(集積化学)
- 小島 由寛「動的電子状態に基づいた強誘電性金属錯体液晶の構築」(固体物性化学)
- 小林龍太郎「液液界面で生成する金コロイドの in situ 顕微分光測定」(分析化学)
- 齋藤 博史「オキシエチレン鎖を有するトリスフェニルイソオキサゾイルベンゼン誘導体の自己集合」(構造有機化学)
- 坂田 修一「糖パッカリングの構造変化に関する理論化学的研究」(量子化学)
- 佐々木由佳「深海微生物由来ジヒドロ葉酸還元酵素の構造安定性」(分子生物物理学)
- 指原 慶彰「RCM 反応と Diels-Alder 反応を利用した Daphnezomine C の合成研究」(反応有機化学)
- 島田 淳平「o-(フルオロシリル)(ジメチルボリル)ベンゼンのフッ化物イオンとの錯形成挙動」(有

機典型元素化学)

末光 篤「パーフルオロシクロブタンのフッ素内殻励起・解離」(集積化学)

村主 拓弥「ベンゼン環に2つの7員環を縮環した新規ピンサー型三座配位子の開発と遷移金属錯体合成への応用」(有機典型元素化学)

園尾 将人「高スピンニトロキシドラジカルと遷移金属イオンによる新規キラル磁性体の構築と磁氣的性質」(固体物性化学)

苑田 星輝「コロイドシリカ生成反応に対する強磁場の影響」(物理環境化学)

高木 一人「ビス(ホスフィンイミド)鉄錯体をメタラキレート配位子として用いた種々の鉄-ロジウム二核錯体の合成と構造」(錯体化学)

高木 望「ポルフィリンナノロッド合成における強磁場の影響」(物理環境化学)

田福 伸次「クラウンエーテルと二級アンモニウム塩から生成する擬ロタキサンの閉環メタセシスによる[5]カテナンの合成研究」(構造有機化学)

田丸 華子「液液界面に生成する常磁性金属錯体の *in situ* 顕微測定」(分析化学)

長江 沙織「TMP 塩基によるホウ素原子置換ベンゼンのオルトメタル化反応の開発」(有機典型元素化学)

中村 岳史「2,3-ジアザ-7-シラビシクロ [2.2.1] ヘプテン誘導体の脱窒素反応機構に関する研究」(反応有機化学)

西本孝太郎「超音速ジェットレーザー分光を用いたカリックスアレンの包接能力の検証」(構造物理化学)

新田 耕作「アピカル-エクアトリアル-エクアトリアル (aee) 型新規三座配位子を有する超原子価アンチモン化合物の合成と構造」(有機典型元素化学)

原 幸孝「質量分析法と同位体標識法を組み合わせたシアノバクテリアの窒素代謝機構」(生物化学)

本玉 直哉「超音速ジェットレーザー分光によるカリックス[5]アレンの電子スペクトルの観測」(構造物理化学)

町田 康士「o-(フルオロシリル)フェニルメタル化合物の合成と構造」(有機典型元素化学)

宮本 彩「メタル炉加熱気化導入-ICP 原子発光分析法による鉄鋼中セレンとヒ素の直接定量」(分析化学)

宮本 保光「ジホスフィン PdMe₂ 錯体の結晶構造を利用した固相中における還元的脱離反応の制御」(錯体化学)

向井 一晃「水中で平面脂質二分子膜を形成する装置の作製と膜ダイナミクスの高倍率顕微蛍光測定」(分析化学)

村上 哲哉「鉄とホスフィンイミド配位子の協同作用による有機不飽和分子のヒドロホウ素化反応」(錯体化学)

村田 和久「長鎖アルキル駆動型 Co(II)錯体のスピン転移現象」(固体物性化学)

柳瀬 泰樹「振動 SFG 分光による気体-液体界面の観測」(量子化学)

矢野 倫之「1,8-ジメトキシ-10-メチルアクリジニウム骨格を有する超原子価 5 配位ホウ素化合物

の合成とその還元」(有機典型元素化学)

藪野 洋平「環状フリルアルコール誘導体とベンゾフェノンとの Paternò-Büchi 反応における位置選択性と立体選択性に関する研究」(反応有機化学)

山下 和子「アセトン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)

山田 裕也「振動励起 OH ラジカルの準位選択的検出およびエネルギー移動の観測」(反応物理化学)

山本 幸明「連続的な閉環メタセシス反応と渡環 Diels-Alder 反応による 6-6-6 員環化合物の合成研究」(反応有機化学)

山本 弘美「磁場による微小重力を利用した固体薄膜の作成」(物理環境化学)

渡邊 亮英「クレフト型ビスポルフィリンホストと電子不足性ゲストの包接を駆動力とする超分子ポリマーの合成研究」(構造有機化学)

渡辺 新治「トリフルオロエタノールクラスターの O(1s)内殻励起に伴う光化学反応」(集積化学)

渡部 武「鉄-ビピリジン錯体における水分子の可逆的吸脱着」(固体物性化学)

渡邊 隆義「大腸菌により発現させたプレゴン還元酵素によるエノン類の不斉還元」(生物化学)

2-4 その他特記事項

2-4-1 学生の表彰

理学部長賞表彰者 2 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

江幡	孝之	(平成19年度化学科自己点検・評価委員)
岩本	啓	(化学専攻分子構造化学講座)
岡本	泰明	(化学専攻分子構造化学講座)
勝本	之晶	(化学専攻分子反応化学講座)