

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20年度
(2008年度)

平成21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 | 24 |
| 分子構造化学講座 | 24 |
| 構造物理化学研究グループ | 24 |
| 固体物性化学研究グループ | 28 |
| 錯体化学研究グループ | 32 |
| 分析化学研究グループ | 34 |
| 構造有機化学研究グループ | 38 |
| 分子反応化学講座 | 42 |
| 反応物理化学研究グループ | 42 |
| 有機典型元素化学研究グループ | 45 |
| 反応有機化学研究グループ | 50 |
| 集積化学研究グループ | 55 |
| 量子化学研究グループ | 60 |
| 1-4-3 各種研究員と外国人留学生の受け入れ状況 | 64 |
| 1-4-4 研究助成金の受け入れ状況 | 65 |

| | | |
|----------------|--------------------------|-----------|
| 1-4-5 | 学会ならびに社会での活動..... | 66 |
| 1-5 | その他特記事項..... | 72 |
| 1-5-1 | 量子生命科学プロジェクト研究センター..... | 72 |
| 2. 化学科 | | 75 |
| 2-1 | 学科の理念と目標..... | 75 |
| 2-2 | 学科の組織..... | 76 |
| 2-3 | 学科の学士課程教育..... | 78 |
| 2-3-1 | アドミッション・ポリシーとその目標..... | 78 |
| 2-3-2 | 学士課程教育の理念と達成のための具体策..... | 78 |
| 2-3-3 | 学士課程教育の成果とその検証..... | 79 |
| 2-3-4 | 卒業論文発表実績..... | 88 |
| 2-4 | その他特記事項..... | 91 |
| 2-4-1 | 学生の表彰..... | 91 |
| 報告書作成ワーキンググループ | | 92 |

はじめに

平成20年度化学専攻長

田林 清彦

平成16年度の国立大学法人化に際し、平成16～21年度の第一期中期目標・中期計画が策定され、これらの達成に向けて教育・研究を推進してきました。化学専攻では、プロジェクト研究「物質循環系の分子認識と分子設計」、「量子生命科学」の推進を中期目標に掲げています。本年度は第一期の5年目にあたり、第一期の目標・計画の達成状況の評価・検証（現況調査表等）が始まっており、また、平成22年度から始まる第二期に向けて、法人化後5年の経験と実績を踏まえた次期中期目標・中期計画の策定作業も進められています。

基礎科学が広範囲にわたって発展し、伝統的な分野間の境界が段々と無くなってきている昨今、伝統的な分野の深化に加え、それらの教育研究の組織的な統合・融合化も必要となっています。学問の性格において「一般性の強さ」という順に「物理－化学－生物…」と並べると、その中心に位置する化学は、なかでも特に重要な役割を担っていると思います。平成15年度から実施してきた先進的な「大学院教育」、科学技術振興調整費新興分野人材養成事業「ナノテク・バイオ・IT融合教育プログラム」も順調にその成果を挙げています。また、融合領域の研究と教育の推進を目的として、平成19年度から理学融合教育センターが設置され、融合教育シンポジウム、セミナー等が活発に行われ、専攻の枠を越えた共同研究の推進と各分野間の研究者の交流が図られています。学部教育においては、全学的な到達目標型教育プログラムの実施とともに、新たな教育方法の工夫改善の取り組み「協調演習による理学的知力の育成支援」が平成19～21年度文部科学省「特色ある大学教育支援プログラム」に採択され、学士課程教育の質の向上、確保を目指して進められています。

本報告書は、平成20年度における化学専攻・化学科の教育研究活動の成果をまとめたものです。大学で教育研究に身を置く我々にとって、日頃の教育研究活動等の状況・成果について自ら吟味し、外部評価を受け、その結果を踏まえて一層の改善・推進を行う、という繰り返しの中で教育研究活動の活性化・改革を図ることが求められています。本報告書は、そのための資料として役立ち、また、我々が「社会的説明責任」を果たす一助となることを願っています。

化学専攻・化学科における教育研究の最新情報は下記のURLを参照ください。

理学研究科 化学専攻

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

理学部 化学科

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

理学研究科 附属理学融合教育研究センター

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

NaBiT 融合教育プログラム

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

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20年度化学専攻長 | 田林 清彦 |
| 化学副専攻長 | 山本 陽介 |
| 化学専攻長補佐 | 小島 聡志 |

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20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 | 速水 |
| 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 | 井上 田林 |
| 人事交流委員会 | 田林 |
| 教務委員 | 岡田 |
| 評価委員 | 井上** 江幡* |
| 安全衛生委員 | ◎●山本 |
| 広報委員 | 秋田* |
| 大学院委員 | 井上 田林 |
| 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 | 田林 |
| 教育交流委員 | 速水 |

◎は委員長 ●全学委員

*は 任期2年 (H19年度～)

**は任期2年 (H20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 20 年 4 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 23 日～ |
| 学術室センター等推進部門会議 | 江幡 孝之 | 平成 20 年 4 月 1 日～ |
| 留学生センター運営委員会 | 小島 聡志 | 平成 16 年 4 月 1 日～ |
| 先進機能物質研究センター運営委員会 | 井上 克也 | 平成 20 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 20 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 20 年 5 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 | 山本 陽介 | 平成 20 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 | 安倍 学 | 平成 20 年 4 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 20 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～ |
| | 泉 俊輔 | 平成 20 年 4 月 1 日～ |
| 技術センター センター長 | 山本 陽介 | 平成 20 年 4 月 1 日～ |

1-2-1 教職員

平成 21 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 | 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 |

化学専攻事務

| | | |
|-------|----|-----|
| 事務員 | 古寺 | 千鶴子 |
| 事務補佐員 | 加藤 | 道子 |
| 事務補佐員 | 平木 | 菜奈子 |

平成20年度の非常勤講師

- 石黒 慎一 (九州大学・大学院理学研究院・教授)
 授業科目名：溶液配位化学
 担当：分析化学研究グループ
- 三島 正章 (九州大学・先導物質化学研究所・教授)
 授業科目名：物理有機化学特論
 担当：反応有機化学研究グループ
- 本間 健二 (兵庫県立大学・大学院物質理学研究科・教授)
 授業科目名：化学反応動力学
 担当：集積化学研究グループ
- 酒井 健 (九州大学・大学院理学研究院・教授)
 授業科目名：機能性錯体特論
 担当：錯体化学研究グループ
- 井上 将彦 (富山大学・大学院医学薬学研究部・教授)
 授業科目名：生物有機化学特論
 担当：構造有機化学研究グループ

1-2-2 教職員の異動

平成21年

- 1月31日 松川 史郎 (分子反応化学講座助教)
 東邦大学理学部化学科(准教授)へ転出
- 1月31日 岩本 啓 (分子構造化学講座助教)
 新潟大学大学院自然科学研究科自然構造科学専攻(准教授)
 へ転出
- 3月31日 速水 真也 (分子構造化学講座准教授)
 熊本大学大学院自然科学研究科理学専攻(教授)へ転出
- 3月31日 三吉 克彦 (分子反応化学講座教授)
 定年により退職

1-3 専攻の大学院教育

1-3-1 大学院教育の目標とアドミッション・ポリシー

【1】教育目標

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

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

【2】アドミッション・ポリシー

化学専攻では、大学院で高度な化学の専門知識や技法を学ぶために必要な基礎学力を有し、絶えず自己啓発努力を重ね、積極的に新しい分野を開拓していく意欲に富む学生を、学部教育を受けた分野にとらわれず広く受け入れる。

1-3-2 大学院教育の成果とその検証

・平成20年度化学専攻在籍学生数

(平成19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19年度 | 35 (8) | 5 |
| 平成18年度 | 30 (10) {1} | 3 |
| 平成17年度 | | 2 |
| 平成16年度以前 | | 1 {1} |
| 合計 | 65 (18) | 11 {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20年度生 | 泉 | 江幡、岡田 |
| 平成19年度生 | 相田、水田 | 灰野 |
| 平成18年度生 | 岡田 | 小島 |
| 平成17年度生 | 灰野 | 三吉 |
| 平成16年度生 | 小島 | 相田、藤原(照) |
| 平成15年度生 | 三吉 | 田林 |

・平成20年度化学専攻開講授業科目

| | 担当教員 | 授業のキーワード |
|-------------|-----------|---|
| 現代英語 | 小島 | 英語, ヒアリング, リスニング, 熟語 |
| 構造物理化学 II | 江幡 | 吸収発光, 時間を含む摂動論, 断熱近似, 電子・振動遷移, ラマン散乱 |
| 固体物性化学 I | 井上, 速水 | 固体物性, 複合物性, 分子磁性, 分子伝導性, X線, 回折現象 |
| 固体物性化学 II | 井上, 速水 | 固体複合物性, 磁性, 伝導性, 誘電性, 光学物性 |
| 構造有機化学 I | 灰野 | 超分子化学, 分子認識, コンビナトリアル化学, 立体配座 |
| 構造有機化学 II | 灰野 | 構造有機化学, 有機計算化学 |
| 量子情報科学 | 神沼, 相田 | 物理学と情報, 量子計算, 情報と生命 |
| 光機能化学 | 齋藤 | 凝縮相, 光物性, 分子分光学, ナノ物性, レーザー |
| 集積化学 | 田林, 岡田 | 光と分子, エネルギー伝達, 分子集合体, 分子間相互作用 |
| 有機典型元素化学 I | 河内 | NMRによる構造および速度解析・典型元素 |
| 有機典型元素化学 II | 山本 | 物理有機化学の基礎, 13族-16族元素, 超原子価化合物 |
| 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 | 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 | 藤原(照), 井上 | 溶液化学, 溶媒和イオンの構造, 固体化学, 無機固体の構造と物性 |
| 有機化学概論 | 安倍 | 立体化学, 反応解析 |

・各研究グループの在籍学生数

(平成20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 | 4 | 4 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 錯体化学研究グループ | 3 | 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 分析化学研究グループ | 3 | 3 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 構造有機化学研究グループ | 3 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 光機能化学研究グループ | 2 | 2 | 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 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 有機典型元素化学研究グループ | 9 | 5 | 1 | 1 | 2 | 0 | 0 |
| 反応有機化学研究グループ | 5 | 5 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 集積化学研究グループ | 2 | 4 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 量子化学研究グループ | 3 | 3 | 2 | 1 | 1 | 1 | 0 |
| 放射線反応化学研究グループ | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 計 | 36 | 35 | 7 | 4 | 4 | 1 | 1 |

・博士課程修了者の進路

(平成20年 5月現在)

| | 修了者総数 | 就職者 | | | | | | | 進学 | 研究生・補助員 | その他 |
|-------|-------|-------|-----|-----|-------|------------|------|------|------|---------|------|
| | | 一般職 | | | | 教職 | | | | | |
| | | 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 | 33(8) | 25(8) | 0 | 0 | 25(8) | 1(0) | 0 | 1(0) | 5(0) | 0 | 2(0) |
| 後期修了* | 5(0) | 1(0) | 0 | 0 | 1(0) | 1(0) | 0 | 1(0) | — | 2(0) | 1(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⁾ | 148 |
| 博士課程後期 ⁽²⁾ | 31 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽³⁾ | 7 |

(2008(H20)年度の発表について記載：2008(H20)年4月から2009(H21)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⁾ | 19 |
| 博士課程後期 ⁽²⁾ | 7 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽³⁾ | 1 |

(2008(H20)年度の発表について記載：2008(H20)年4月から2009(H21)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

| | |
|--------|--|
| 厚地 正樹 | 1,3-ビス(4-ピリジル)プロパンで架橋した集積型鉄錯体のベンゼン吸脱着による構造変化とスピントロニクス |
| 安藤 広司 | 柔軟性を考慮に入れた分子の安定性及び反応性に関する理論化学的研究 |
| 井形 直央 | ジルコニウム触媒を用いたアルキルアルミニウム化反応におけるジルコニウムカチオンの反応性に関する研究 |
| 池本 真理子 | 解離イオン対の相関スペクトルでみる N および F 1s 励起トリフルオロアセトニトリルの解離ダイナミクス |
| 稲見 裕太 | リン架橋[1.1]フェロセノファンを骨格とした大環状リン配位子の合成とその配位空間を利用した金属の収容機能 |
| 井下 翔平 | 単一相および二相系における単一 DNA 分子の移動に伴うダイナミクスの <i>in situ</i> 顕微蛍光測定 |
| 衛藤 由希 | Poly(<i>N,N</i> -diethylacrylamide)水溶液の相分離挙動に高分子鎖の立体配置が与える影響 |
| 岡 祐児 | 新規キラルアミノピリジン・ビスイミダゾリン触媒の合成及び不斉反応の検討 |
| 川本 慎二 | 嵩高いリン架橋[1.1]フェロセノファン配位子の機能開発-ArCl を活性化する Pd(II) 錯体および配位不飽和な Fe(II) ジアルキル錯体の合成と反応性- |
| 日下 良二 | 超音速ジェット中のクラウンエーテルのコンフォメーションと水分子包接構造の解明 |
| 小林 悠亮 | 赤外光解離分光による $(CS_2)_n^+$, $(OCS)_n^+$ 及び $(acetone)_n^+$ クラスターのイオンコア構造の研究 |
| 近藤 広理 | シンコナルカロイドを有機分子触媒とする不斉 Michael 反応に関する研究 |
| 三宮 瑠美 | 分子内配位子としてホスホニウムイリドを有する 5 配位ケイ素化合物の合成と構造 |
| 鈴川 直幸 | 新規スフェランドの合成と超原子価アート錯体合成への応用の試み |
| 鶴田 淳 | アミンと Cu(II) を含むマルチフェロイック化合物の合成と物性 |
| 鶴田 剛士 | 局所交流電場による気液および液液界面の微小振動の顕微測定と強制振動モデルを用いた解析 |
| 寺西 拓也 | σ -(シリル)フェニルメタル化合物を用いた 2,2'-ジシリルビフェニルの合成とその構造 |
| 土肥 千里 | リン、硫黄及びセレンを配位原子とする新規ピンサー型パラジウム錯体の合成とその触媒的アリル化反応への応用 |
| 中尾 康次 | Hofmann 型金属錯体の合成と磁気的性質 |
| 長沢 健司 | salen 骨格を有する金属錯体の液晶および誘電特性 |
| 西 長彦 | 光学活性なリン酸を用いる交差共役ジエノンの不斉 Diels-Alder 反応に関する研究 |
| 野村 昂生 | 鉄のビス-ホスフィンイミド錯体をキレート配位子として用いた遷移金属-典型金属二核錯体の合成 |

| | |
|--------|--|
| 平井 恵梨 | カリックス[5]アレーンとフラーレンのホスト-ゲスト相互作用を用いた超分子架橋によるフラーレンをもつポリフェニルアセチレンの物性制御 |
| 平田 祐介 | 新規な 16 π 電子系を有するポルフィリン誘導体を用いた金属錯体の合成、構造及び性質 |
| 本田 博文 | Mn(II)イオンと Cr(III)イオンを用いたキラル分子磁性体におけるキラルな磁気構造の推測 |
| 正木 竜太 | 核酸塩基対間のスタッキング相互作用についての非経験的分子軌道法による研究 |
| 松本 裕史 | 液液界面近傍に存在する微粒子の局所電場内における泳動挙動の顕微測定と解析 |
| 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 |
| 三木 絵梨子 | 分子内回転運動の制御を基盤とする外部刺激応答性分子の合成研究—ナフタレンを母骨格とする新規不斉補助試薬と[3]カテナンを用いた分子センサー— |
| 光岡 広樹 | 光生検システムを用いた癌組織内細胞外マトリックスの構造変化メカニズムの研究 |
| 宮内 拓也 | 化学修飾したシンコナルカロイド触媒を用いた電子求引基を多数有するシクロプロパンの不斉合成 |
| 山中 剛志 | アンモニアのクラスター形成が及ぼす内殻励起過程への影響 |
| 山村 知玄 | 光の三原色で発光する Si ナノ結晶の創製とその構造及び光物性 |
| 吉田 明美 | 軸不斉を導入した新規な環状カルボジホスホランとこれを配位子に持つ遷移金属錯体の合成 |

1-3-6 博士学位

授与年月日を〔 〕内に記す。

吉田 祐輔 〔平成 20 年 4 月 28 日〕(甲)

A Family of Multiproperty Coordination Polymers $[Mn^{II}(LH)(H_2O)][Cr^{III}(CN)_6] \cdot (H_2O)$, L = R-pn, rac-pn or en

(多様な物性を示す配位重合体 $[Mn^{II}(LH)(H_2O)][Cr^{III}(CN)_6] \cdot (H_2O)$ (L = R-pn, rac-pn or en))

主査：井上 克也 教授

副査：藤原 照文 教授, 三吉 克彦 教授, 山下 正廣 教授, Mohammed KURMOO
ルイパスツール大学主任研究員

片岡 紘子 〔平成 20 年 6 月 23 日〕(乙)

Development of Tungsten Boat Furnace Electrothermal Vaporisation-Inductively Coupled Plasma Atomic Emission and Mass Spectrometric Method for the Determination of Non-metal Elements

(非金属元素の定量のためのタングステン炉電気加熱気化-誘導結合プラズマ原子発光分光分析法および質量分析法の開発)

主査：藤原 照文 教授

副査：井上 克也 教授, 三吉 克彦 教授

新屋 慶 [平成 20 年 1 月 26 日] (乙)

Molecular structure analysis of phenyl compounds by vibrational spectroscopy combined with theoretical calculations

(理論計算を併用した振動分光法によるフェニル化合物の分子構造解析)

主査：相田 美砂子 教授

副査：江幡 孝之 教授, 田林 清彦 教授, 山崎 勝義 教授

Maihemutijiang Jieli [平成 21 年 3 月 4 日] (甲)

Theoretical Study on Protonated Water Clusters: Enumeration of Structures and Classification of OH Bonds

(プロトン化水クラスターに関する理論化学的研究：構造の数え上げと OH 結合の分類)

主査：相田 美砂子 教授

副査：江幡 孝之 教授, 田林 清彦 教授, 山崎 勝義 教授

沖本 真広 [平成 21 年 3 月 23 日] (甲)

Synthesis of Functionalized 7-Sila- and 7-Germanorbornadienes toward Generation of Functionalized Silicon and Germanium Active Species.

(官能性ケイ素およびゲルマニウム活性種の生成を指向した官能性 7-シラおよび 7-ゲルマノルボルナジエンの合成)

主査：山本 陽介 教授

副査：安倍 学 教授, 灰野 岳晴 教授

山道 秀映 [平成 21 年 3 月 23 日] (甲)

Synthesis, Structure, and Isomerization of Group 15 Element Compounds Bearing a Rigid Tridentate Ligand

(強固な三座配位子を有する 15 族元素化合物の合成, 構造, および異性化)

主査：山本 陽介 教授

副査：安倍 学 教授, 灰野 岳晴 教授, 小島 聡志 准教授, 水田 勉 准教授
松川 史郎 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20年度のTA

| 氏名 | 担当授業科目 | 所属研究グループ | 学年 |
|-----------------|--------|----------|----|
| 東川 大志 | 化学実験 | 固体物性化学 | D2 |
| 渡辺 信嗣 | 化学実験 | 反応物理化学 | D2 |
| 中辻 淳也 | 化学実験 | 有機典型元素化学 | D2 |
| 平野 雄一 | 化学実験 | 有機典型元素化学 | D1 |
| Triana Widianti | 化学実験 | 反応有機化学 | D1 |
| 山田 朋範 | 化学実験 | 量子化学 | D2 |
| 坂宗 和明 | 化学実験 | 量子化学 | D3 |
| 前田 俊樹 | 化学実験 | 量子化学 | D2 |
| 前田 晃宏 | 化学実験 | 量子化学 | D2 |
| 下赤 卓史 | 化学実験 | 集積化学 | D1 |
| 堺 真道 | 化学実験 | 集積化学 | D1 |

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：2008年6月3日（火）13:00-

場所：理学部 E002 教室

講師：石黒 慎一 教授（九州大学）

演題：イオン液体の溶媒特性- 構造と熱力学-

担当：分析化学研究グループ

日時：2008年6月6日（金）14:30-

場所：理学部 E002 教室

講師：井上 将彦 教授（富山大学）

演題：アルキニル C-ヌクレオシドを基盤とする人工 DNA の開発

担当：構造有機化学研究グループ

日時：2008年10月16日（日）15:00-

場所：理学部 B501 教室

講師：Jacqueline Fayeton 教授（パリ南大学）

演題：Photo-fragmentation of protonated biomolecules investigated by coincidence detection of neutral and ionic fragments

担当：構造物理化学研究グループ

日時：2008年10月22日（木）15:00-

場所：理学部 E202 教室

講師：Philippe Dugourd 教授（リヨン大学）

演題：UV spectroscopy of gas phase proteins and meta cluster-peptide hybrids

担当：構造物理化学研究グループ

日時：2008年10月23日（木）16:15-

場所：理学部 E002 教室

講師：Weston Thatcher Borden 教授（ノーステキサス大学）

演題：The Schizophrenic Effect of Geminal Fluorination on the Kinetic Stability of Molecules with Strained Rings

担当：反応有機化学研究グループ

日時：2008年11月7日（金）14:30-

場所：理学部 E002 教室

講師：三島 正章 教授（九州大学）

演題：ケテンの化学- 最近の進歩

担当：反応有機化学研究グループ

日時：2008年11月21日（金）13:00-

場所：理学部 E002 教室

講師：酒井 健 教授（九州大学）

演題：Chromogenic and Fluorogenic Sensing of Heavy Metal Ions Using Calix[4]arene Derivatives

担当：錯体化学研究グループ

日時：2008年11月26日（水）15:30-

場所：理学部 E002 教室

講師：Wen-Sheng Chung (鍾文聖)教授（National Chiao Tung University）

演題：Chromogenic and Fluorogenic Sensing of Heavy Metal Ions Using Calix[4]arene Derivatives

担当：構造有機化学研究グループ

日時：2008年12月9日（火） 14:30-

場所：理学部 E002 教室

講師：本間 健二 教授（兵庫県立大学・大学院物質科学研究科）

演題：気相遷移金属原子の反応：Kinetics から Dynamics へ

担当：集積化学研究グループ

日時：2009年2月20日（金）13:00-14:30

場所：理学部 B501 教室

講師：James Lisy 教授（イリノイ大学）

演題：New Insights into Structure-Dynamics Relationships using Cluster Ions

担当：構造物理化学研究グループ

日時：2009年2月23日（月）16:00-

場所：理学部 B305 教室

講師：Fernando Palacio 教授（CSIC, Spain）

演題：Neutron diffraction for Nano materials

担当：固体物性化学研究グループ

日時：2009年3月2日（月）16:00-

場所：理学部 B301 教室

講師：Hendrik Zipse 教授（ミュンヘン大学）

演題：Nucleophilic Organocatalysis

担当：反応有機化学研究グループ

日時：2009年3月16日（月）16:00-

場所：理学部 B301 教室

講師：G. Narahari Sastry 教授

演題：The range and Relevance of Cation- π Interaction in Chemistry and Biology

担当：反応有機化学研究グループ

日時：2009年3月26日（木）14：00-

場所：理学部 E211 教室

講師：Hans Neusser 教授（ミュンヘン工科大学）

演題：The effect of ionization on the conformational structure in flexible molecules: A combined high resolution and threshold ionization study

担当：構造物理化学研究グループ

・ Chem サロン

Chem サロンは、いろいろな研究室の研究活動の紹介や化学関係教員・学生の交流の場を提供するために平成3年度より開始された。数理分子生命科学研究科（化学系）と共催で開催している。平成20年度の世話人は藤原好恒准教授である。

平成20年度の講師と題目を次にあげる。

第73回 2008年6月16日

『自己組織化と反応・物性制御』

秋田 素子（化学専攻分子構造化学講座）

第74回 2008年10月20日

『ラジカル分子の分光と反応』

高口 博志（化学専攻分子反応化学講座）

・ セミナー等開催実績

第130回量子生命科学セミナー

日時：2008年6月24日

場所：広島大学

担当：相田美砂子

第57回藤原セミナーPhysics and Chemistry of Molecular Magnet New Prospect of Molecular Magnetism

日時：2008年7月28-31日

場所：グランドホテルニュー王子（苫小牧）

担当：井上克也

第131回量子生命科学セミナー

日時：2008年7月29日

場所：広島大学

担当：相田美砂子

第4回分子情報ダイナミクス研究会

日時：2008年9月9-10日

場所：大阪大学銀杏会館（大阪）

主催：分子情報ダイナミクス研究会

担当：安倍 学

第132回量子生命科学セミナー

日時：2008年9月9日

場所：広島大学

担当：相田美砂子

広域物性研究会 広島シンポジウム2008

日時：2008年10月10-11日

場所：広島大学

担当：勝本之晶

The 3rd Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”

日時：2008年10月14-18日

場所：Ekaterinburg, Russia

担当：井上克也

The 3rd Japanese-Russian Seminar –Molecular and Magneto Science-

日時：2008年12月13-14日

場所：広島大学理学部

担当：江幡 孝之

特定領域研究「元素相乗系化合物の化学」第4回公開シンポジウム

日時：2009年1月9-10日

場所：宮島グランドホテル有もと（広島）

担当：山本陽介，河内 敦，松川史郎

・ 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（2008(H20)年1月～12月）と国際会議・国内学会（2008(H20)年4月～2009(H21)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 | 69 |
| 著書 | 1 |
| 総説 | 3 |
| 国際会議 | 49 |
| 国内学会（招待・依頼・特別講演） | 19 |
| 特許出願 | 1 |

・ 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 |
| 2008 年度 (平成 20 年度) | William F. Meggers Award, Society for Applied Spectroscopy | 石橋 孝章 |
| 2008 年度 (平成 20 年度) | 第 31 回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞 | 高木 隆吉 |
| 2008 年度 (平成 20 年度) | Zimmer Award (Univ. of Cincinnati) | 安倍 学 |

・ 学生の受賞実績

- 日下良二 第 2 回分子科学討論会 (分子科学会優秀講演賞) 2008 年 9 月
- 小林悠介 The 3rd Japanese-Russian Seminar - Molecular and Magneto Science- (学生賞)
2008 年 12 月
- 日下良二 広島大学学長賞 2009 年 3 月
- 井下翔平 The 3rd Japanese-Russian Seminar - Molecular and Magneto Science- (学生賞)
2008 年 12 月
- 山道秀映 日本化学会中国四国支部長賞 2009 年 3 月
- 石部徹 広島大学学長賞および理学部長賞 2009 年 3 月
- 中辻惇也 The 3rd Japanese-Russian Seminar - Molecular and Magneto Science- (学生賞)
2008 年 12 月
- 長江沙織 第 19 回基礎有機化学討論会 (ポスター賞) 2008 年 10 月
- 平田祐介 第 43 回有機反応若手の会 (ポスター賞) 2008 年 7 月
- 宮内拓也 The 3rd Japanese-Russian Seminar - Molecular and Magneto Science- (学生賞)
2008 年 12 月
- 前田 俊樹 2008 William F. Meggers Award, Society for Applied Spectroscopy

・ 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20年度のRA

| | | | |
|-----------|--------------------|----------|----------|
| 大学院生氏名 | 下赤 卓史 | 所属研究グループ | 集積化学 |
| 学年 | D 1 | 指導教員 | 田林 清彦 教授 |
| 研究プロジェクト名 | 炭化水素鎖の孤立重水素化標識法の開発 | | |

| | | | |
|-----------|-----------------|----------|-----------|
| 大学院生氏名 | 堺 真通 | 所属研究グループ | 集積化学 |
| 学年 | D 1 | 指導教員 | 岡田 和正 准教授 |
| 研究プロジェクト名 | 電子衝撃による分子の励起と解離 | | |

| | | | |
|-----------|----------------------|----------|---------|
| 大学院生氏名 | Triana Widianti | 所属研究グループ | 反応有機化学 |
| 学年 | D 1 | 指導教員 | 安倍 学 教授 |
| 研究プロジェクト名 | 新規不斉有機触媒の開発と応用に関する研究 | | |

| | | | |
|-----------|-----------------------|----------|-----------|
| 大学院生氏名 | 坂宗 和明 | 所属研究グループ | 量子化学 |
| 学年 | D 3 | 指導教員 | 相田 美砂子 教授 |
| 研究プロジェクト名 | 化学反応の道筋と制御に関する理論化学的研究 | | |

| | | | |
|-----------|---------------------|----------|----------|
| 大学院生氏名 | 平野 雄一 | 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 | 弱い相互作用系のエネルギー評価系の構築 | | |

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を用いて, 分子クラスターや機能性分子の構造, 化学反応, エネルギー緩和の研究を行っている。対象としている系は比較的簡単な多原子分子, 生体関連分子, 包接化合物である。実験と併行して, 量子化学計算に基づいた分子クラスターや包接化合物の構造決定, 振動スペクトルの解析を行っている。また, 振動分光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。平成20年度の研究活動は次のとおりである。

代表的機能性分子のカリックスアレンやクラウンエーテルの超音速ジェットレーザー分光を始めて行った。種々の原子や分子をゲストとした包接化合物の電子スペクトルや, 赤外-紫外二重共鳴法により分子種を選別した赤外スペクトルを観測し, 量子化学計算による最適化構造計算との比較から包接構造を決定した。この研究は, 今後包接化合物の新たな包接能力の可能性を切り開くものと期待される。この研究は, *Phys. Chem. Chem. Phys.* の表紙を飾った。

超音速分子線中の気相2-アミノピリジンおよびその二量体のNH伸縮振動緩和の実時間測定をピコ秒赤外-紫外ポンプ-プローブ法で行った。この研究は, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, (2008)に掲載された。

また, イオンの関与する化学反応中間体の電子構造, 幾何構造の解明を目的として, 質量選別赤外光解離分光法により, 二酸化炭素クラスターイオン, アセトンクラスターイオン, 二硫化炭素クラスターイオン, 硫化カルボニルクラスターイオンなどの赤外スペクトルを観測した。この赤外スペクトルより, これらのクラスターイオン内で分子間 semi-covalent bond が形成されていることが明らかとなった。

オキサアルキル鎖による分子間引力と反発の拮抗相互作用を利用した, 新しい分子間相互作用による非常にユニークで汎用性の高い有機材料の新規物性改良法を開発し, 特許申請した。この手法の応用を目的として複数の企業との共同研究が進行中である。

○発表原著論文

- Y. Kobayashi, Y. Inokuchi and T. Ebata (2008) Ion core structure in $(CS_2)_n^+$ and $(CS_2)_n^-$ ($n = 3-10$) studied by infrared photodissociation spectroscopy. *J. Chem. Phys.* 128, 164319 (6pages).
- A. Muraoka, Y. Inokuchi, and T. Nagata (2008) Structures of $[(CO_2)_n(CH_3OH)_m]^-$ ($n = 1-4, m = 1, 2$) Cluster Anions. *J. Phys. Chem. A*, 112, 4906-4913.
- Y. Yamada, N. Mikami, and T. Ebata (2008) Relaxation dynamics of NH stretching vibrations of 2-aminopyridine and its dimer in a supersonic beam. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 105, 12690-12695.
- Y. Inokuchi, A. Muraoka, T. Nagata, and T. Ebata (2008) An IR Study of $(CO_2)_n^+$ ($n = 3-8$) Cluster Ions in the 1000-3800 cm^{-1} Region. *J. Chem. Phys.*, 129, 044308 (9 pages).
- R. Kusaka, Y. Inokuchi, and T. Ebata (2008) Structure of Hydrated Clusters of Dibenzo-18-Crown-6-Ether in a Supersonic Jet -Encapsulation of Water Molecules in the Crown Cavity-. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 10, 6238-6244.

○国際学会での講演

T. Ebata “Electronic spectra of calix[4]arene and its van der Waals clusters in supersonic jets.” OSU international symposium on molecular spectroscopy (June 16-20, 2008, Ohio, USA) (一般講演)

T. Ebata “Study on encapsulation structure of functional molecules in supersonic jets.” Gordon Research Conference on Molecular and Ionic Clusters (Sept. 7-12, 2008, Aussois, France) (ポスター)

T. Ebata “Laser Spectroscopic Study on the encapsulation structure of calixarene in supersonic Beams” Third Japanese - Russian Seminar “Molecular and Magnetoscience” (Dec. 12-23, 2008) (特別講演)

Y. Inokuchi “Structures of cluster ions of triatomic molecules studied by infrared photodissociation spectroscopy”, Gordon Research Conference on Molecular and Ionic Clusters (Sept. 7-12, 2008, Aussois, France) (ポスター)

○国内学会 (特別講演・招待・依頼・一般講演・ポスター, 左記の順に記載)

江幡孝之, 「超音速分子線レーザー分光による包接化合物の分子取り込み機構の解明」。特定領域研究「高次系分子科学」第2回公開シンポジウム (2008年11月10-11日, 大阪) (依頼講演)

江幡孝之, 「包接化合物の超音速分子線レーザー分光」平成20年度日本分光学会年次講演会特別シンポジウム (2008年11月19日, 仙台) (招待講演)

井口佳哉, 「赤外光解離分光法による, CO₂およびCS₂クラスターイオンの構造の解明」第2回分子科学討論会 (2008年9月25日, 福岡) (一般講演)

福原幸一, 「平面オキサアルカン誘導体の熱物性」第44回熱測定討論会 (2008年10月18日, つくば) (一般講演)

○学生の学会発表

Encapsulation of water molecules by dibenzo-18-crown-6-ether in a supersonic jet, OSU international symposium on molecular spectroscopy (2008年6月, Ohio, USA) (口頭) ○Ryoji, Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Takayuki

「共鳴多光子イオン化によるカリックスアレン包接クラスターの包接エネルギーの決定」(口頭) 第2回分子科学討論会 (2008年9月, 福岡) ○本玉直哉, 西本孝太郎, 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クラウンエーテルの溶媒和分子包接構造の解明」第2回分子科学討論会 (2008年9月, 福岡) (口頭) ○日下良二, 井口佳哉, 江幡孝之

「アセトンクラスターカチオンのイオンコア構造」(ポスター) 第2回分子科学討論会 2008 (2008年9月, 福岡) ○小林悠介, 井口佳哉, 江幡孝之

「Ion core structure in (CH₃COCH₃)_n⁺ (n = 3-6) studied by photodissociation spectroscopy」 Third Japanese - Russian Seminar “Molecular and Magnetoscience” (2008年12月, 広島)(口頭) ○Yuusuke Kobayashi, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata

「Encapsulation of water molecules by dibenzo-18-crown-6-ether in a supersonic jet」 Third Japanese - Russian Seminar “Molecular and Magnetoscience” (2008年12月, 広島)(口頭) ○Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|---------------------------|---------|---------|
| 学部4年生 ⁽¹⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 3 | 3 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾ | 0 | 0 |

○セミナー・講演会開催実績

講演会開催

江幡孝之: Jacqueline Fayeton 教授(パリ南大学) “Photo-fragmentation of protonated biomolecules investigated by coincidence detection of neutral and ionic fragments” 2008年10月16日 (Hiroshima University)

江幡孝之: Philippe Dugourd 教授(リヨン大学) “UV spectroscopy of gas phase proteins and meta cluster-peptide hybrids” 2008年10月22日 (Hiroshima University)

江幡孝之, 井口佳哉: James Lisy 教授(イリノイ大学) “New Insights into Structure-Dynamics Relationships using Cluster Ions” 2009年2月20日 (Hiroshima University)

江幡孝之: Hans Neusser 教授(ミュンヘン工科大学) “The effect of ionization on the conformational structure in flexible molecules: A combined high resolution and threshold ionization study” 2009年3月26日 (Hiroshima University)

○国際共同研究・国際会議開催実績

国際共同研究

江幡孝之, 日本学術振興会 日仏共同研究 (2008年4月-2009年3月)

国際会議開催

江幡孝之, The 3rd Japanese-Russian Seminar - Molecular and Magneto Science- (2008年12月13-14日)

○特許公報

福原幸一「新規ジカルボン酸ジエステル化合物, 化学物質改質剤及びその利用」特開
2008-031149

○研究助成の受け入れ状況

科学研究補助金 基盤研究(A) (2006-2009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ャラクタリゼーション」(2007-2008年) (代表) 江幡孝之

科学研究補助金 特定領域研究 「分子高次系機能解明のための分子科学」領域番号「477」 「超音速分子線レーザー分光による包接化合物の分子取り込み機構の解明」(2008-2009年) (公募代表) 江幡孝之

三菱化学研究奨励基金 「光解離分光による化学反応中間体の電子幾何構造の解明」(2008年) (代表) 井口佳哉

○受賞状況（学生）

日下良二 分子科学会優秀講演賞 第2回分子科学討論会（福岡）2008年9月

小林悠介 The 3rd Japanese-Russian Seminar - Molecular and Magneto Science-（学生賞）
2008年12月

日下良二 広島大学学長賞 2009年3月

○その他特記事項

江幡孝之 広島大学理学研究科副研究科長，広島大学評議員，理学研究科附属理学融合教育
研究センター長(2007.4-2009.3)

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。また類似化合物群であるマルチフェロイック化合物に関する研究もすすめた。

外場誘起相転移化合物に関する研究：スピントロニクスオーバー、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

- Yusuke Yoshida, Katsuya Inoue and Mohamedally Kurmoo (2008) Reversible Single Crystal-to-Amorphous Phase Transition upon Dehydration-Rehydration and Associated Magnetism in $[\text{Mn}^{\text{II}}(\text{enH})(\text{H}_2\text{O})][\text{Cr}^{\text{III}}(\text{CN})_6]\cdot\text{H}_2\text{O}$, *Chem. Lett.*, **37**,504-505
- R. Morgunov, M. V. Kirman, K. Inoue, Y. Tanimoto, J. Kishine, A. S. Ovchinnikov, and O. Kazakova (2008) Spin solitons and spin waves in chiral and racemic molecular based ferrimagnets, *Phys. Rev. B*, **77**,184419
- Fujita, Toshiyuki, Fujimoto, Yoshikuni, Mitsudo, Seitaro, Idehara, Toshitaka, Saito, Teruo, Kousaka, Yusuke, Yano, Shin-ichiro, Akimitsu, Jun, Kishine, Jun-ichiro, Inoue, Katsuya, Motokawa, Mitsuhiko (2008) Commensurate to incommensurate transition in the chiral helimagnet CuB_2O_4 , *J. Phys. Soc. Jpn*, **77**, 53702
- Yusuke Yoshida, Katsuya Inoue and Mohamedally Kurmoo (2008) Crystal Structures and Magnetic Properties of $[\text{Mn}^{\text{II}}(\text{rac-pnH})(\text{H}_2\text{O})\text{Cr}^{\text{III}}(\text{CN})_6]\cdot\text{H}_2\text{O}$ and Its Dehydrated Form, *Chem. Lett.*, **37**,586-587
- Morgunov, R. B., Kirman, M. V., Berdinskii, V. L., Inoue, K., Kishine, J. (2008) Spin solitons and waves in chiral molecular ferrimagnets, *J. Exp. Theor. Phys.*, **107**,74-82
- Suzuki, Kentaro, Haines, Julien, Rabu, Pierre, Inoue, Katsuya, Drillon, Marc (2008) Magnetic Properties and Pressure-Induced Ferromagnetism of $\text{Cu}_2(\text{OH})_3(\text{CH}_3\text{COO})\cdot\text{H}_2\text{O}$, *J. Phys. Chem. C.*, **112**, 19147-19150

- Daisuke Kato, Katsuya Inoue, Jun Akimitsu and Jiro Abe (2008) Synthesis and Magnetic Properties of Conjugated Radical Polymer, *Chem. Lett.*, **37**, 694-695
- Ishikawa, Ryuta, Fuyuhiko, Akira, Hayami, Shinya, Inoue, Katsuya, Kawata, Satoshi (2008) Intriguing assembled structure and properties of a novel dinuclear nickel(II) complex with an axially coordinated azide and methanol, *J. Mol. Struct.*, **892**, 220-224
- Atsuchi, Masaki, Higashikawa, Hiroyuki, Yoshida, Yusuke, Nakashima, Satoru, Inoue, Katsuya (2008) 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, BH₃; bpp=1,3-bis(4-pyridyl)propane), *Chem. Lett.*, **37**, 292-293
- Hayami, Shinya, Murata, Kazuhisa, Urakami, Daisuke, Kojima, Yoshihiro, Akita, Motoko, Inoue, Katsuya (2008) Dynamic structural conversion in a spin-crossover cobalt(II) compound with long alkyl chains, *Chem. Commun.*, **48**, 6510-6512
- Yamane, Yohei, Yamada, Koji, Inoue, Katsuya (2008) Superprotonic solid solutions between CsHSO₄ and CsH₂PO₄, *Solid State Ionics*, **179**, 483-488
- Yamane, Yohei, Yamada, Koji, Inoue, Katsuya (2008) Mechanochemical synthesis and order-disorder phase transition in fluoride ion conductor RbPbF₃, *Solid State Ionics*, **179**, 605-610

○国際会議

- Katsuya INOUE, Reversible single crystal phase transition on chiral 2-D molecule-based magnets, 3rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, Ekaterinburg, Russia, 2008.10.15 (招待講演)
- Katsuya INOUE, New prospects for molecule-based magnets, 3rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, Ekaterinburg, Russia, 2008.10.17 (招待講演)
- Katsuya INOUE, Junichiro Kishine, Masaki Mito, Magnetic spin structure of chiral molecule-based magnets, The 21th. IUCr, Osaka, 2008.8.21-22 (招待講演)
- Katsuya INOUE, MAGNETS IN WONDERLAND-Magnetic and crystal chirality-, CNR Seminar, Bologna, Italy, 2008.9.19 (招待講演)
- Katsuya INOUE, Magnetic structures and phase diagram for chiral molecule-based magnets, International conference on molecule-based magnets (ICMM), Florence, Italy, 2008.9.24 (Keynote Lecture)
- H. Higashikawa, K.Yu. Maryunina, G.V. Romanenko, A.S. Bogomyakov, K. Inoue, V.I. Ovcharenko, Synthesis, Structure, and magnetic properties of a new pentanuclear complex with nitronyl nitroxide $[\text{Fe}_2(\text{CN})_{12}\text{Ni}_3(\text{L})_6]27\text{H}_2\text{O}$, 3rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, Ekaterinburg, Russia, 2008.10.15-18 (17) (口頭発表)
- Hiroyuki Higashikawa, Hirofumi Honda, Daisuke Urakami, Jun-ichiro Kishine, Katsuya Inoue, Stabilization of Chiral Magnetic Structure by Chiral Crystal Structure, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium The 3rd Japanese-Russian Seminar — Molecular And Magneto Science —, Hiroshima, 2008.12.13-14 (13) (口頭発表)
- Katsuya Inoue, Non Linear physical properties in chiral magnets, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium The 3rd Japanese-Russian Seminar — Molecular And Magneto Science —, Hiroshima, 2008.12.13-14 (13) (口頭発表)

Hiroyuki Higashikawa, Hirofumi Honda, Daisuke Urakami, Jun-ichiro Kishine, Motoko Akita, Shinya Hayami, Katsuya Inoue, Magnetic Structures of Chiral and Achiral Structural Magnets Using $[W(CN)_8]^{3-}$ Ions, International conference on molecule-based magnets (ICMM), Florence, Italy, 2008.9.24 (ポスター)

○国内学会

井上克也、キラル磁性体の物性と展望、東北大 GCOE 第 2 回研究会「金属錯体の固体物性科学最前線—錯体化学と固体物性物理の新奇融合領域創成をめざして—」、仙台、2008.12.19-21. (依頼講演)

井上克也、キラル構造を持つプルシアンブルー型錯体の磁気構造と特異スピンドイナミクス、筑波大学学際物質科学研究会「ナノ分子磁性体の化学・物理・応用」、つくば、2008.11.28-29. (依頼講演)

井上克也、キラル磁性体の物質開発の現状、Spring-8 キラル磁性マルチフェロイック研究会、東京、2008.10.29-30. (依頼講演)

秋田素子、速水真也、井上克也、ターピリジン骨格を有する機能性錯体超分子の構築、第 19 回基礎有機化学討論会、大阪、2008.10.3-5. (口頭発表)

豊東葵、秋田素子、速水真也、井上克也、 π 共役系トリラジカルを配位子として用いた遷移金属錯体の合成と磁氣的性質、日本化学会西日本大会、長崎、2008.11.14-15. (口頭発表)

豊東葵、秋田素子、速水真也、井上克也、 π 共役系トリスニトロキシドラジカルを配位子とするコバルト錯体の構造と磁氣的性質、第 2 回有機 π 電子系シンポジウム、広島、2008.12.5-6. (ポスター)

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|---------------------------|---------|---------|
| 学部 4 年生 ⁽¹⁾ | 0 | 2 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 3 | 29 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 0 | 4 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾ | 0 | 0 |

○国際共同研究・国際会議開催実績

井上克也、3rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, 副組織委員長 Ekaterinburg, Russia, 2008.10.14-18

井上克也、第 57 回藤原セミナー Physics and Chemistry of Molecular Magnet New Prospect of Molecular Magnetism, 組織委員長, 苫小牧, 2008.7.28-31

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・ラウエー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、低次元磁性体に関する国際共同研究：フランス・ULP、2008-

○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構造共同研究：高輝度放射光施設(Spring-8)、青学、東北大 2008-

井上克也、キラル磁性体の物性理論：九工大、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、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-

○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)

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)

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。

リンメタラサイクルには、多くの報告例があるが、その殆どは3価のリンが金属に結合したものであり、5価のリンとなったものは、1例しかない。我々は、歪んだ5価ホスファ4員環化合物 $P(=E)(N^iPr_2)(naph)$ ($E = S, O$; $naph = 1,8-naphthylene$) に対して0価パラジウム $Pd(PPh_3)_4$ を反応させることにより、P-C結合に $Pd(PPh_3)$ フラグメントが挿入した5員環ホスファパラダサイクル $[Pd\{\kappa^2P,C-\mu_2-PE-P(=E)(N^iPr_2)(naph)\}(PPh_3)]_2$ を合成した。この生成物において、P(V)-メタラサイクルは、メタロリガンドとして、Eを介して、Pdに配位し、2量体構造を形成していた。得られたP(V)-メタラサイクルは、スチレンとPhIとのHeck反応に対して触媒活性を有しており、触媒に対して7万当量の $PhCH=CHPh$ を与え、既報の触媒に比べて中程度の活性が見られた。水銀テストによりこの反応の活性種は、パラダサイクルから生じたPdナノ粒子であることが示唆された。

ナフタレンの1,8位をPhP-PPhで架橋した化合物(NaphPPと略)を合成した。この2座リン配位子では、2つのリン上にPh基がそれぞれ1つつ結合しており、その相対配置により、trans体とcis体が存在する。合成したNaphPPのうち、trans体を0価の $Pt(PPh_3)_4$ と反応させると、NaphPPと白金が3:2の比からなる2核錯体 $[Pt_2(NaphPP)_3(PPh_3)_2]$ が得られた。注目すべきことに、合成に用いたtrans体は、室温でcis体に異性化しており、これにより2つの白金中心を架橋していた。freeの配位子は、室温で全く異性化しないので、この反応は金属への配位によって誘起されたものである。一方、2価の $PtCl_2(cod)$ と反応させたところcis体は0価の場合と同様複数のNaphPPが架橋した2核錯体 $Cl_2Pt(NaphPP)_2PtCl_2$ を与えた。これに対し、trans体は、ポリマー状の高分子錯体を与え、trans体からcis体への異性化は起こらなかった。金属の酸化数により異性化の挙動が異なる点は、反応のメカニズムを考える上で、大変興味深い結果である。

○発表原著論文

T. Mizuta, T. Aotani, Y. Imamura, K. Kubo, and K. Miyoshi (2008) Structure and Properties of the Macrocyclic Tridentate Ferrocenylphosphine Ligand ($PhPC_5H_4FeC_5H_4$)₃. *Organometallics*, **27**(11), 2457-2463.

K. Kubo, T. Akimoto, T. Mizuta, and K. Miyoshi (2008) Synthesis of a hetero-bimetallic complex with an inorganic cyclic framework using a bis(iminophosphorane)iron complex as a chelating ligand. *Chemistry Letters*, **37**(2), 166-167.

H. Nakazawa, K. Miyoshi, and K. Takano (2008) Transition metal complexes containing phosphonium and phosphite ligands: Formation and theoretical approach. *Phosphorus Sulfur and Silicon and the Related Elements*, **183**(2-3), 499-503.

○国際学会での講演

T. Mizuta, T. Aotani, Y. Imamura, K. Miyoshi: Structures and Properties of Bidentate and Tridentate Ferrocenylphosphine Macrocyclic Ligands. The 23rd International Conference on Organometallic Chemistry (July, 2008, Rennes, France) (ポスター)

○国内学会

久保和幸：柔軟な電子系を有する *P*-メタラホスフィンイミド錯体配位子の構築と利用。第58回錯体化学討論会（2008年9月，金沢）（依頼講演）

稲見裕太，吉川俊郎，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化合物の合成とその配位子としての機能。第58回錯体化学討論会（2008年9月，金沢）（一般講演）

川本慎二，今村友紀，水田 勉，三吉克彦：嵩高いリン架橋[1.1]フェロセノファンを配位子にもつ四面体型鉄ジアルキル錯体の合成と臭化アルキルとの反応。日本化学会第89春季年会（2009）（2009年3月，千葉）（一般講演）

高木一人，久保和幸，秋本貴志，水田 勉，三吉克彦：ホスフィンイミドで架橋された鉄-ロジウム二核メタラサイクルの合成とその構造的特徴。日本化学会第89春季年会（2009）（2009年3月，千葉）（一般講演）

野村昂生，浦垣充朗，久保和幸，水田 勉，三吉克彦：鉄のビス-ホスフィンイミド錯体をメタロリガンドとして用いた遷移金属-典型金属二核錯体の合成と構造。第58回錯体化学討論会（2008年9月，金沢）（ポスター）

吉田 明美，久保和幸，水田 勉，三吉克彦：Binaphthyl 架橋を有するキラルな環状カルボジホスホランとこれを配位子として用いた遷移金属錯体の合成。第58回錯体化学討論会（2008年9月，金沢）（ポスター）

水田 勉，田中宣志，岩国由紀子，久保和幸，三吉克彦：P(V)-Pd 共有結合を組み込んだ5員環リンパラダサイクルの合成と反応性。第55回有機金属化学討論会（2008年9月，大阪）（ポスター）

村上哲哉，久保和幸，馬場敬之，水田 勉，三吉克彦：イソシアニドを配位子に持つ鉄-ホスフィンイミド錯体の合成とヒドロホウ素化反応を利用した分子内環化反応。日本化学会第89春季年会（2009）（2009年3月，千葉）（ポスター）

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|---------------------------|---------|---------|
| 学部4年生 ⁽¹⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 0 | 7 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾ | 0 | 0 |

○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新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

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, ナノメートルサイズの微小域, 例えば種々の異相界面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いる。そのため, ナノ微小域の計測技術に関する研究, 及びその特異性を活用した新規な分離・検出法の開発が盛んに押し進められている。また, 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

以下のことが, 平成 20 年度の研究成果である。

(a) 逆ミセルメディア化学発光(CL)反応とフロー分析法: ナノ界面場を有する逆ミセル中での CL 反応に対するコバルト(II)やマンガン(II)等の遷移金属の酢酸塩による触媒作用における溶媒効果を, フローインジェクション法を用いて調べ, その CL 発光強度が溶媒のアクセプター数と良い相関性を示すことを明らかにするとともに, 有機溶媒中の重金属イオンを間接定量する方法を開発した。さらに, その CL 系への金コロイドの影響についても検討した。

(b) 逆ミセルナノ界面場における蛍光色素の発光挙動に関する研究: 蛍光色素であるローダミン B やフルオレセインを CTAC 逆ミセル溶液に分散させ, それら色素の蛍光ピーク波長及び強度に対する pH, バルク溶媒組成, 界面活性剤と水のモル濃度比などの影響を調べ, 逆ミセルのバルク有機相からナノ界面相や内水相への色素の分配挙動を明らかにするとともに, 種々の条件での CMC を決定して逆ミセル界面場の安定性について検討した。

(c) 液液界面を通過する単一 DNA の *in situ* 顕微蛍光測定: 有機相/水相または水性二相の界面を, 高感度 CCD カメラを備えた倒立顕微鏡で観察することにより, 単一 DNA の界面移動過程を計測した。その結果, 各相および界面において, DNA は, その形態を変化させていることが判り, それが溶媒和と深いつながりがあることを見出した。

(d) 局所交流電場を印加した液液界面の振動測定と解析: 液液界面に対して, 垂直に局所交流電場(電圧 150 V(peak-to-peak), 周波数 1~100 Hz)を印加したところ, 界面がその周波数に応じて振動することがわかった。また, 特定の周波数のとき, 振動の振幅が増大することがわかり, 系固有の周波数と共鳴していると考えられる。この共鳴周波数を液体の種類を変えて求めたところ, 特に界面張力と深い関係を有していることが判った。

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20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

- H. Kataoka, Y. Okamoto, S. Tsukahara, T. Fujiwara, and K. Ito (2008) Separate vaporisation of boric acid and inorganic boron from tungsten sample cuvette-tungsten boat furnace followed by the detection of boron species by inductively coupled plasma mass spectrometry and atomic emission spectrometry (ICP-MS and ICP-AES). *Anal. Chim. Acta*, **610**, 179-185.
- H. Kataoka, S. Tanaka, C. Konishi, Y. Okamoto, T. Fujiwara and K. Ito (2008) Sensitive determination of bromine and iodine in aqueous and biological samples by electrothermal vaporization inductively coupled plasma mass spectrometry using tetramethylammonium hydroxide as a chemical modifier. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **22**, 1792-1798.
- H. Kataoka, Y. Okamoto, T. Matsushita, S. Tsukahara, T. Fujiwara and K. Wagatsuma (2008) Magnetic Drop-in Tungsten Boat Furnace Vaporization Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry (MDI-TBF-ICP-AES) for the Direct Solid Sampling of Iron and Steel. *J. Anal. At. Spectrom.* **23**, 1108-1111.
- S. Tsukahara, M. Suehara, and T. Fujiwara (2008) In Situ Measurements of Dynamics of Single Giant DNA Molecules at Toluene-Trioctylamine/Water Interface by Total-Internal Reflection Fluorescence Microscopy. *Langmuir*, **24**, 1673-1677.
- T. Tsuruta, S. Tsukahara, and T. Fujiwara (2008) Microscopic Measurements for Deformation of Liquid Surfaces Induced by Localized Direct Current Electric Field. *Anal. Sci.*, **24**, 121-126.

○総説

塚原 聡 (2008) 液液界面における特異反応・現象の in situ 顕微分光計測. *ぶんせき*, 215-221.

○国際会議

- H. Takahashi, Y. Urabe, Y. Okamoto, S. Tsukahara, and T. Fujiwara: Flow-injection chemiluminescence determination of cobalt using luminol in a reversed micellar medium of cetyltrimethylammonium chloride in 1-hexanol-cyclohexane. The 15th International Conference of Flow Injection Analysis (FIA) and the 25th Anniversary Meeting of Japanese Association for FIA (Sep., 2008, Nagoya, Japan) (ポスター)
- N. Haba, K. Ito, H. Kataoka, Y. Okamoto, T. Fujiwara, and T. Hirokawa: Sensitive Determination of iodine in some samples by ion chromatography with UV detection. The 15th International Conference of Flow Injection Analysis (FIA) and the 25th Anniversary Meeting of Japanese Association for FIA (Sep., 2008, Nagoya, Japan) (ポスター)
- S. Inoshita, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: In situ fluorescence microscopic investigation into pH dependence of conformation and electrophoretic velocity of single DNA molecules. The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar (Dec., 2008, Higashi-Hiroshima, Japan) (一般講演)

○国内学会

- 藤原照文: 逆ミセル界面場を利用した新規フローインジェクション化学発光分析法の開発。日本分析化学会第 57 年会 (2008 年 9 月, 福岡) (依頼講演)
- 塚原 聡: 油水界面における特異反応の in situ 顕微分光計測。平成 20 年度広島地区分析技術講演会 (2009 年 2 月, 東広島) (依頼講演)
- 鶴田剛士, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 局所交流電場による液体表面の微小振動の顕微測定と解析。第 69 回分析化学討論会 (2008 年 5 月, 名古屋) (一般講演)

- 松本裕史, 浦崎真吾, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 液液界面のポリスチレン微粒子の局所電場内における泳動挙動。第 69 回分析化学討論会 (2008 年 5 月, 名古屋) (一般講演)
- 鶴田剛士, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 局所交流電場による液体表面の微小振動の顕微測定と強制振動モデルによる解析。第 14 回中国四国支部分析化学若手セミナー (2008 年 7 月, 高知県室戸) (ポスター発表)
- 向井一晃, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 水中で水平な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顕微蛍光測定。第 14 回中国四国支部分析化学若手セミナー (2008 年 7 月, 高知県室戸) (ポスター発表)
- 井下翔平, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 液液界面における単一 DNA 分子の動的挙動の in situ 顕微蛍光測定。日本分析化学会第 57 年会 (2008 年 9 月, 福岡) (一般講演)
- 小林龍太郎, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 液液界面で生成する金コロイドの in situ 顕微分光測定。日本分析化学会第 57 年会 (2008 年 9 月, 福岡) (一般講演)
- 向井一晃, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 水中に形成した平面脂質二分子膜のダイナミクスの顕微蛍光測定。日本分析化学会第 57 年会 (2008 年 9 月, 福岡) (一般講演)
- 山本圭介, 片岡紘子, 岡本泰明, 塚原 聡, 藤原照文, 内原博, 池田昌彦, 橋本文寿: Drop-in メタル炉加熱気化導入—ICP 原子発光分析法による鉄鋼中のアンチモンの直接定量。日本分析化学会第 57 年会 (2008 年 9 月, 福岡) (一般講演)
- 岡本泰明, 片岡紘子, 藤原照文, 内原 博, 池田昌彦, 橋本文寿: ETV-ICP-AES による鉄鋼中の硫黄, セレン, アンチモンの直接定量。日本鉄鋼協会第 156 回秋季講演大会 (2008 年 9 月, 熊本) (一般講演)
- 松本裕史, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 液液界面に存在する微粒子の局所電場内における泳動挙動。第 27 回日本溶媒抽出討論会 (2008 年 10 月, 東京) (一般講演)
- 鶴田剛士, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 局所交流電場による液体表面の微小振動の顕微計測と強制振動モデルを用いた解析。第 31 回溶液化学シンポジウム (2008 年 11 月, 東大阪) (ポスター発表)
- 高橋秀行, 占部泰章, 岡本泰明, 塚原 聡, 藤原照文: 逆ミセルを用いたフローインジェクション化学発光検出による有機溶媒中の重金属の微量定量法。平成 20 年度広島地区分析技術講演会 (2009 年 2 月, 東広島) (一般講演)

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|---------------------------|---------|---------|
| 学部 4 年生 ⁽¹⁾ | 0 | 1 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 2 | 10 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾ | 0 | 0 |

○研究助成の受け入れ状況

- 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
- 日本学術振興会科学研究費補助金 基盤研究(C)「開放系で行う環境関連微粒子の分級とその構成元素の多元素同時定量」 代表者 岡本 泰明

○受賞状況（学生）

井下 翔平(M2), Student Award, “In situ fluorescence microscopic investigation into pH dependence of conformation and electrophoretic velocity of single DNA molecules,” at the 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and the 3rd Japanese-Russian Seminar (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、分子間相互作用により形成される超分子集合体の化学を中心に研究を行っている。特に、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、興味ある機能性分子集合体の開発を目指している。

2008 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積層型らせん集合体の溶液構造とそのゲル可能について検討を行い、微視的な分子配列が巨視的な形態に大きく影響を与えていることを明らかにした。また、らせん集積における非常に高い sergeant & soldier 型の応答現象を見いだした。
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. モノデオキシカリックス [4] アレーンを基盤としたカプセル型ホスト分子を開発し、カチオン- π 相互作用による有機カチオン系ゲスト分子の包接に成功した。モノデオキシカリックス [4] アレーンの芳香環の一つがゲスト分子の包接に伴い開閉するゲートの役割をしていることを明らかにした。

○ 発表原著論文

T. Haino, H. Fukuoka, H. Iwamoto, Y. Fukazawa, Synthesis and Enantioselective Recognition of a Calix[5]arene-based Chiral Receptor, *Supramolecular Chemistry, Special Issue: Calixarenes: Special Issue Based on Calix2007*, 20, 2008 51-57.

T. Haino, M. Tanaka, Self-assembly of 1,3,5-Tris(phenylisoxazolyl)benzene and its Asymmetric Induction of Supramolecular Chirality, *高分子*, 57, 2008 738.

T. Haino, M. Tanaka, Y. Fukazawa, Self-assembly of tris(phenylisoxazolyl)benzene and its asymmetric induction of supramolecular chirality, *Chemical Communications*, 2008 468-470.

M. Kita, M. Kuramoto, T. Chiba, A. Yamada, N. Yamada, T. Ishida, T. Haino, K. Yamada, Y. Ijuin, O. Ohno, D. Uemura, Structure-Activity Relationship of Okadaic Acid, a Potent Protein Phosphatases PP1 and PP2A Inhibitor: 24-epi-Okadaic Acid and a 18-Membered Lactone Analog, *Heterocycles*, 76, 2008 1033-1042.

T. Haino, M. Hirakata, K. Niimi, M. Kouchi, H. Iwamoto, Y. Fukazawa, Synthesis of a molecular container having an open door that closes on guest binding, *Chemistry Letters*, 37, 2008 394-395.

○ 国際会議

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)

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)

○国内学会

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)

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)

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)

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)

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]アレーンでキャップ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)

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)

西沙織, 岩本啓, 深澤義正, 灰野岳晴: カリックス[4]アレーンでキャップ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)

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|---------------------------|---------|---------|
| 学部4年生 ⁽¹⁾ | 0 | 4 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 3 | 29 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 0 | 4 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾ | 0 | 0 |

○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
山田科学振興財団, 超分子フラーレンポリマーの高度に組織化された新規ナノ構造の構築, 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

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多段逐次振動緩和過程の速度定数および振動緩和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。新規に構築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、オゾンの紫外光解離により生成する酸素分子 $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ の広範囲振動励起準位 $v=6\sim 15$ を選択的に検出することに成功した。CF₄ 添加条件での各振動準位の経時変化データを独自に開発した「Profile 積分法」を用いて解析し、 $v=6\sim 12$ の振動エネルギー移動の速度定数を決定した。その結果、振動緩和の効率が $v=6$ から $v=12$ まで単調に増加することを見出し、その要因が酸素分子の振動エネルギー間隔と CF₄ の ν_3 振動モードのエネルギー間隔の差に相関をもつ、いわゆる exponential energy gap law によって説明できることを明らかにした。本成果は、アメリカ化学会発行の *J. Phys. Chem. A* 誌より論文投稿を依頼され、その特集号 “A Festschrift for Stephen R. Leone” (2008 年第 12 巻) に掲載された。

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・分子反応の微視的な運動様式を実験的に検出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と、それを用いた反応性散乱実験装置を開発している。有機反応論では、主に電荷の偏り (δ^+ , δ^-) を反応の推進力とする反応機構の説明が展開されているが、本研究では気相中のイオン・分子反応の反応動学的測定量から、有機反応論を検証することを目指している。リドベルグ状態を経由する共鳴多光子イオン化法により振動・回転状態を選択した分子イオンを発生させ、RF 駆動型の 8 重極イオンガイド法により反応断面積を測定する。これまでに完成した装置を用いた場合に実現されるイオンビーム経路に対して数値シミュレーションを行い、エネルギー制御能と生成イオンの捕集効率を評価した。衝突エネルギー 0.1–10 eV の範囲で、0.1eV 程度のエネルギー分解能が得られ、通常の実験条件では 90% 以上の生成物イオンが検出されることが示された。

3. 内殻励起化学反応機構の解明

軟 X 線照射により分子の内殻電子が励起され、その時放出される光、電子、イオンを観測することで豊かな化学反応に対する情報を収集することができる。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。我々は軟 X 線照射後の化学反応機構の解明を目指し、理論的研究手法の開発を行ってきた。今回表面反応系への拡張を目指し、凝縮相水に対する理論計算を行った。モデルクラスタによる吸収スペクトル、内殻正孔動力学計算、オージェスペクトルの計算を行い、実験スペクトルを説明できることを示した。

○発表原著論文

- S. Watanabe, H. Fujii, H. Kohguchi, T. Hatano, I. Tokue, and K. Yamasaki (2008) Kinetic Study of Vibrational Energy Transfer from a Wide Range of Vibrational Levels of $O_2(X^3\Sigma_g^-, v=6-12)$ to CF₄. *J. Phys. Chem. A*, **112**(39), 9290-9295.
- H. Kohguchi, Y. Ogi, and T. Suzuki (2008) Reaction Mechanism Duality in $O(^1D_2) + CD_4 \rightarrow OD + CD_3$ Identified from Scattering Distributions of Rotationally State Selected CD₃. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 7222-7225.

- H. Kohguchi, T. Suzuki, S. Nanbu, T. Ishida, G. V. Mil'nikov, P. Oloyede and H. Nakamura (2008) Collision energy dependence of $O(^1D) + HCl \rightarrow OH + Cl(^2P)$ reaction studied by crossed beam scattering and quasiclassical trajectory calculations on ab initio potential energy surfaces. *J. Phys. Chem. A*, **112**(5), 818-825.
- Kenji Yasunaga, Yuma Kuraguchi, Yoshiaki Hidaka, Osamu Takahashi, Hiroshi Yamada and Tohru Koike (2008) Kinetic and Modeling Studies on ETBE Pyrolysis behind Reflected Shock Waves. *Chem. Phys. Lett.*, **451**(1-3), 192-197.
- Osamu Takahashi, Katsuyoshi Yamasaki, Yuji Kohno, Kazuyoshi Ueda, Hiroko Suezawa, Yoji Umezawa, and Motohiro Nishio (2008) The Alkylketone Effect Revisited. An Alternative Interpretation Based on the Attractive CH/π ($C=O$) Hydrogen Bond, *Tetrahedron*, **64**, 2433-2440.
- Y. Tamenori, K. Okada, O. Takahashi, S. Arakawa, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma (2008) Hydrogen bonding in methanol clusters probed by inner-shell photoabsorption spectroscopy in the carbon and oxygen K-edge regions *J. Chem. Phys.*, **128**, 124321-8.
- Osamu Takahashi, Tetsuo Nomura, Hiroaki Nakayama, Kiyohiko Tabayashi, Katsuyoshi Yamasaki (2008) Short-time Fourier Transformation Analysis of Molecular Dynamics Simulation by Maximum Entropy Method *Chem. Phys.*, **351**, 7-12.
- Osamu Takahashi, Katsuyoshi Yamasaki, Yuji Kohno, Kazuyoshi Ueda, Hiroko Suezawa and Motohiro Nishio (2008) Origin of the Axial-Alkyl Preference of (R)- α -Phellandrene and Related Compounds Investigated by High-Level Ab Initio MO Calculations. Importance of the CH/π Hydrogen Bond *Tetrahedron*, **64**(24), 5773-5778.
- T. Tokushima, Y. Harada, O. Takahashi, Y. Senba, H. Ohashi, L.G.M. Pettersson, A. Nilsson, and S. Shin (2008) High Resolution X-ray Emission Spectroscopy of Liquid Water: The Observation of Two Structural Motifs *Chem. Phys. Lett.*, **460**, 387-400.
- L. G. M. Pettersson, T. Tokushima, Y. Harada, O. Takahashi, S. Shin, and A. Nilsson (2008) Comment on "Isotope and Temperature Effects in Liquid Water Probed by X-ray Absorption and Resonant X-ray Emission Spectroscopy" *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 249801.

○著書

- 山崎勝義 (2008) 「成分」と「基底」の変換の相違点 — 群論と行列力学の基礎を理解するために —。分子科学会 Web ジャーナル, *Mol. Sci.* **2**(1), AC0010 (2008).

○国際会議

- S. Watanabe, S.-y. Usuda, H. Kohguchi, and K. Yamasaki: Rate Coefficients for Vibrational Relaxation of O_2 Determined by the Integrated-Profiles Analysis. The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and the 3rd Japanese-Russian Seminar (Dec. 2008, Higashi-Hiroshima, Japan) (口頭)
- Y. Ogi, H. Kohguchi, T. Suzuki: Reaction mechanism duality in $O(^1D_2) + CD_4 \rightarrow OD + CD_3$ identified from scattering distributions of rotationally state selected CD_3 . Asian International Symposium (Mar. 2009, Funabashi, Japan) (口頭)

○国内学会

- 渡辺信嗣, 碓田真也, 山田裕也, 山崎勝義, Profile 積分解析による多量子振動緩和速度定数の評価法の確立。第24回化学反応討論会 (2008年6月, 札幌) (ポスター)
- 高口博志, 小城吉寛, 鈴木俊法, 単一回転状態を選択した $O(^1D)+CD_4$ 反応の微分散乱断面積測定と粒子間相関。第24回化学反応討論会 (2008年6月, 札幌) (口頭)

高口博志, 小城吉寛, 鈴木俊法, $O(^1D) + N_2O$ 反応の状態選別微分断面積の測定。第 24 回化学反応討論会 (2008 年 6 月, 札幌) (ポスター)

山下和子, 高橋修, 山崎勝義, 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 下條竜夫, 本間健二, アセトシクロスタの軟 X 線分光に関する理論的研究。第 2 回分子科学討論会 (2008 年 9 月, 福岡) (ポスター)

渡辺信嗣, 碓田真也, 山田裕也, 山崎勝義, 多量子緩和により生じる隣接 2 準位 Profile 積分解析の誤差と適用限界。西日本大会 2008 (2008 年 11 月, 長崎) (ポスター)

小城吉寛, 高口博志, 鈴木俊法, 回転状態選択微分断面積測定による $O(^1D) + CD_4 \rightarrow OD + CD_3$ 反応の複数経路の実験的検出。第 2 回分子科学会 (2008 年 9 月, 福岡) (口頭)

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|---------------------------|---------|---------|
| 学部 4 年生 ⁽¹⁾ | 0 | 1 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾ | 1 | 2 |

○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, 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

スタッフ名（職名）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

2008年度末に、博士（理学）の学位を2名が取得した。研究面では、新規三座配位子およびその配位子を有する5配位アンチモン化合物の合成、構造決定、および異性体間の異性化反応について研究を行った。二つの立体異性体を単離して、共にX線結晶構造解析で構造を決定した。再結晶によって純粋に単離した一つの立体異性体を用いて異性化反応をおこなったところ、異性化反応が進行することがわかった。岐阜大学工学部の安藤教授による理論計算とこの実験結果（異性化エネルギー）が良い一致を示し、異性化反応は turnstile rotation (TR) 機構で進行していることを明らかにできた。本研究は、5配位15族元素化合物の位置異性化がTR機構でも起こりうることを証明した初めての例となった。

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り合成したベンゾシラゲルマシクロブテンの開環反応により、トリス[*o*-(フルオロシリル)フェニル]ゲルミルポタシウムを合成することに成功した。さらにこのゲルミルポタシウムにルイス酸を作用させると、閉環反応が進行し、ベンゾシラゲルマシクロブテンへ戻ることも見出した。

○発表原著論文

- A. Kawachi, M. Zaima, and Y. Yamamoto (2008) Intramolecular reaction of silanol and triarylborane: boron-aryl bond cleavage and formation of a Si-O-B heterocycle. *Organometallics*, **27(18)**, 4691-4696.
- Y. Hirano, Y. Saiki, H. Taji, S. Matsukawa and Y. Yamamoto (2008) The NCN-type pincer complex of palladium(II) with a 2,6-bis(2-pyridyl)-4-*tert*-butylbenzene tridentate ligand: synthesis, structure and catalytic activity in the Mizoroki-Heck reaction. *Heterocycles*, **76(2)**, (prof. Dr. Ryoji Noyori's Special Issue), 1585-1592.
- X. Jiang, S. Matsukawa and Y. Yamamoto (2008) Synthesis, structure, and isomerization of arylphosphoranes with anti-apicophilic bonding modes using a novel bidentate ligand with two C₂F₅ groups. *Dalton Trans.*, **(28)**, 3678-3687.
- T. Yamaguchi, Y. Yamamoto, D. Kinoshita, K-y. Akiba, Y. Zhang, C. A. Reed, D. Hashizume, and F. Iwasaki (2008) Synthesis and structure of a hexacoordinate carbon compound. *J. Am. Chem. Soc.*, **130(22)**, 6894-6895.
- A. Kawachi, A. Tani, J. Shimada, and Y. Yamamoto (2008) Synthesis of B/Si bidentate lewis acids, *o*-(fluorosilyl)(dimesitylboryl)benzenes, and their fluoride ion affinity. *J. Am. Chem. Soc.*, **130(13)**, 4222-4223.
- X. Jiang, S. Matsukawa, H. Yamamichi, K. Kakuda, S. Kojima and Y. Yamamoto (2008) Stereomutation and experimental determination of the relative stability of diastereomeric O-equatorial anti-apicophilic spirophosphoranes. *Eur. J. Org. Chem.*, **(8)**, 1392-1405

○総説

河内 敦 (2008) 古くて新しいケイ素反応剤：*o*-(フルオロシリル)フェニルリチウムの合成と応用, ケイ素化学協会誌, **25(11)**, 36-40.

○国際会議

- A. Kawachi: Dehydrogenative Condensation of (*o*-Borylphenyl)hydrosilane with Alcohols and Amines. Second Japan-Singapore Bilateral Symposium on Catalysis (Jan. 2009, Kyoto, Japan) (招待講演)
- Y. Yamamoto, T. Yamaguchi, K-y. Akiba, C. A. Reed, D. Hashizume, F. Iwasaki : Synthesis of 5-Coordinate and 6-Coordinate Hypervalent Carbon and Boron Compounds and Recent Developments. The 3rd BK21 International Symposium (Oct. 2008, Pusan, Korea) (招待講演)
- J. Nakatsuji, Y. Yamamoto: Synthesis and Structural Comparison of Boron Compounds Bearing Various Tridentate Ligands. The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium. The 3rd Japanese-Russian Seminar — Molecular And Magneto Science — (Dec. 2008, Higashi-Hiroshima, Japan) (一般講演)
- A. Kawachi, A. Tani, T. Teranishi, J. Shimada, K. Machida, and Y. Yamamoto: *o*-(Fluorosilyl) Phenyllithiums: A New Tool for Construction of Fluorosilanes Including Main Group Elements. The 15th International Symposium on Organosilicon Chemistry (ISOS-XV)(Jun. 2008, Jeju, Korea)(一般講演)
- Y. Yamamoto, C. Dohi, T. Suguri, and S. Matsukawa: Allylation of Aldehydes with Allyltin Catalyzed by Pd(II) Complexes Bearing Newly Prepared Tridentate Ligands. the 23rd International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC2008) (Jul. 2008, Rennes, France)(ポスター発表)
- A. Kawachi, K. Machida, and Y. Yamamoto: Reactions of *o*-(Fluorodimethylsilyl)phenyllithium with GeCl₂ and SnCl₂: Formation of a Benzosilagermacyclobutene and a 1-Sila-2,3-distannaindan. Post ISOS-XV Symposium (Jun. 2008, Takasaki, Japan) (ポスター発表)
- A. Kawachi, J. Shimada, and Y. Yamamoto, Complexation Behavior of *o*-(Fluorosilyl)(dimesitylboryl) benzenes with Fluoride Ion. Post ISOS-XV Symposium (Jun. 2008, Takasaki, Japan) (ポスター発表)

○国内学会

- 山本陽介, 平田祐介, 角井隆功, 松川史郎: 16πポルフィリンの合成とその性質。平成20第2回有機π電子系シンポジウム(2008年12月, 宮島)(依頼講演)
- 山本陽介: 新規16πポルフィリンの合成と金属化合物との反応。近畿化学協会有機金属部会平成20年度第3回例会(2008年10月, 仙台)(招待講演)
- 河内 敦: *ortho*-(フルオロシリル)フェニルメタル化合物の合成・反応とそのキソ。第43回有機反応若手の会(2008年7月, 堺)(特別講演)
- 山道秀映, 松川史郎, 山本陽介: 一つのアピカル位と二つのエクアトリアル位を占める三座配位子を用いたモノハロアルソランの合成と構造。日本化学会第89春季年会(2009年3月, 船橋)(一般講演)
- 鈴木直幸, 柏葉 崇, 松川史郎, 山本陽介: 新規スフェランドの合成とその応用の試み。日本化学会第89春季年会(2009年3月, 船橋)(一般講演)
- 河内 敦, 町田康士, 山本陽介: トリス[*o*-(フルオロシリル)フェニル]ゲルミルポタシウムの合成と構造。日本化学会第89春季年会(2009年3月, 船橋)(一般講演)
- 平野雄一, 山本陽介: メシチルピリミジニル基を有する二座配位子の合成と結合エネルギー評価系への応用。日本化学会第89春季年会(2009年3月, 船橋)(一般講演)
- 河内 敦, 島田淳平, 山本陽介: *o*-(ジフルオロメチルシリル)(ジメシチルボリル)ベンゼンの合成およびフッ化物イオンとの錯形成。日本化学会第89春季年会(2009年3月, 船橋)(一般講演)
- 平田祐介, 山口虎彦, 松川史郎, 山本陽介: 16.π.骨格を有するオクタアルキルテトラフェニルポルフィリンの合成と反応。日本化学会第89春季年会(2009年3月, 船橋)(一般講演)

- 河内 敦, 長江沙織, 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における置換基効果。日本化学会第 89 春季年会 (2009 年 3 月, 船橋) (一般講演)
- 山道秀映, 諏沢 宏, 松川史郎, 山本陽介, 安藤香織: 5 配位アンチモン化合物の Turnstile Rotation 機構による異性化における溶媒および配位子サイズの影響。第 35 回有機典型元素化学討論会 (2008 年 12 月, 東京) (一般講演)
- 平田祐介・山口虎彦・松川史郎・山本陽介: 16π ポルフィリン金属錯体の合成と構造。第 19 回基礎有機化学討論会 (2008 年 10 月, 大阪) (一般講演)
- 河内 敦: *o*-(フルオロシリル)フェニルリチウムを用いた含典型元素パイ電子系の構築。文部科学省科学研究費補助金特定領域研究「炭素資源の高度分子変換」第 5 回公開シンポジウム (2008 年 6 月, 仙台) (一般講演)
- 河内敦, 寺西拓也, 山本陽介: ケイ素官能性 2, 2'-ジシリルビフェニルおよびその誘導体の合成と構造。第 35 回有機典型元素化学討論会 (2008 年 12 月, 東京) (ポスター発表)
- 福崎裕太, 姜新東, 松川史郎, 山本陽介: β -ヒドロキシエチル基を持つ超原子価 5 配位ヒ素化合物からのエポキシド生成反応。第 35 回有機典型元素化学討論会 (2008 年 12 月, 東京) (ポスター発表)
- 角井隆功, 平田祐介, 山道秀映, 山本陽介: オクタイソプロピルポルフィリンの合成とアルキルリチウムとの反応。第 35 回有機典型元素化学討論会 (2008 年 12 月, 東京) (ポスター発表)
- 平野雄一, 山本陽介: ピリミジン環を有する新規二座配位子の合成と結合エネルギー評価系への応用。第 35 回有機典型元素化学討論会 (2008 年 12 月, 東京) (ポスター発表)
- 平野 雄一, 山本 陽介: ピリジンまたはピリミジンを有する新規多座配位子系の合成とその応用。第 38 回複素環化学討論会 (2008 年 11 月, 福山) (ポスター発表)
- 土肥千里, 村主拓弥, 松川史郎, 山本陽介: 新規三座配位子を有するパラジウム触媒を用いたアルデヒドのアリル化反応。第 19 回基礎有機化学討論会 (2008 年 10 月, 大阪) (ポスター発表)
- 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の開発。第 19 回基礎有機化学討論会 (2008 年 10 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ドを有する 5 配位ケイ素化合物の合成と構造。第 19 回基礎有機化学討論会 (2008 年 10 月, 大阪) (ポスター発表)
- 鈴木直幸・柏葉 崇・松川史郎・山本陽介: 新規スフェランドの合成とその応用。第 25 回有機合成セミナー (2008 年 9 月 8 日~10 日, 阿蘇) (ポスター発表)
- 山道秀映: 強固な三座配位子を有する 5 配位アンチモン化合物の Turnstile Rotation 機構による異性化反応における溶媒効果。第 43 回有機反応若手の会 (2008 年 7 月, 堺) (ポスター発表)
- 中辻惇也: ラクタム型新規三座配位子の合成とその応用。第 43 回有機反応若手の会 (2008 年 7 月, 堺) (ポスター発表)
- 平野雄一: 結合エネルギーの評価を目的とした窒素系多座配位子の合成と典型元素化合物への応用。第 43 回有機反応若手の会 (2008 年 7 月, 堺) (ポスター発表)
- 寺西拓也: *o*-(フルオロシリル)フェニルメタル化合物の合成と 2, 2'-ジシリルビフェニル誘導体合成への応用。第 43 回有機反応若手の会 (2008 年 7 月, 堺) (ポスター発表)
- 平田祐介: 新規 16π ポルフィリン亜鉛錯体の合成と構造。第 43 回有機反応若手の会 (2008 年 7 月, 堺) (ポスター発表)

角井隆功：16 π 骨格を有するオクタイソプロピルテトラアルキルポルフィリンの合成と構造の検討。第43回有機反応若手の会（2008年7月，堺）（ポスター発表）

島田淳平： σ -(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。

第43回有機反応若手の会（2008年7月，堺）（ポスター発表）

諏沢宏：超原子価15族元素化合物の合成と異性化。第43回有機反応若手の会（2008年7月，堺）（ポスター発表）

福崎裕太：5配位ヒ素化合物を用いたエポキシド生成反応第43回有機反応若手の会（2008年7月，堺）（ポスター発表）

町田康士：ベンゾシラゲルマシクロブテンと1-シラ-2,3-ジスタンナインダンの合成。第43回有機反応若手の会（2008年7月，堺）（ポスター発表）

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|------------------------------|---------|---------|
| 学部4年生 ⁽¹⁾ | 0 | 0 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 2 | 19 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 1 | 7 |
| (博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾) | 0 | 2 |

○セミナー・講演会開催実績

特定領域研究「元素相乗系化合物の化学」第4回公開シンポジウム

日時：2009年1月

場所：宮島グランドホテル有もと

担当：山本陽介，河内 敦，松川史郎

○共同プロジェクトへの参加状況（国内）

山本 陽介，河内 敦：先進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(D3)，日本化学会中国四国支部長賞（2009）

石部 徹(B4)，広島大学学長賞および理学部長賞（2009）

中辻 惇也 (D2), Student Award “Synthesis and Structural Comparison of Boron Compounds Bearing Various Tridentate Ligands” The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium The 3rd Japanese-Russian Seminar— Molecular And Magneto Science (2008)

長江 沙織 (M1), ポスター賞「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」第 19 回基礎有機化学討論会 (2008)

平田祐介 (M2), ポスター賞「新規 16 π ポルフィリン亜鉛錯体の合成と構造」第 43 回有機反応若手の会 (2008)

○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長 (2008 -)

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

○スタッフ名（職名）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-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、一重項 1,3-ビラジカルの反応性に及ぼす顕著な 2 位のケイ素原子効果と 2 位上のアルコキシ基の特異な効果を見出した。また、1,4-ビラジカルの化学では、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。

不斉有機分子触媒を用いた交差共役エノンの環状付加反応および脱離基を有するアクリル酸誘導体の Michael 反応について検討した。ジルコノセン触媒やルテニウム触媒を用いた有機合成反応について検討した。

○発表原著論文

- T. Iwaki, H. Iefuji, Y. Hiraga, A. Hosomi, T. Morita, Y. Giga-Hama, K. Takegawa (2008) Multiple functions of ergosterol in the fission yeast *Schizosaccharomyces pombe*. *Microbiology*, 154 (3), 830-841.
- T. Nakamura, T. Yamamoto, M. Abe, H. Matsumura, Y. Hagihara, T. Goto, T. Yamaguchi, T. Inoue (2008) Oxidation of Srchael Peroxiredoxin Involves a Hypervalent Sulfur Intermediate. *Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America (PNAS)*, **105**, 6238-6242.
- Y. Hiraga, T. Shikano, Triana Widiandi, K. Ohkata (2008) Three new glycolipids with cytolytic activity from cultured marine dinoflagellate *Heterocapsa circularisquama*. *Natural Product Research*, 22 (8), 649-657.
- X.-D. Jiang, S. Matsukawa, H. Yamamichi, K.-i. Kakuda, S. Kojima, and Y. Yamamoto (2008) Stereomutation and experimental determination of the relative stability of diastereomeric *O*-equatorial anti-apicophilic spirophosphoranes. *Eur. J. Org. Chem.*, 1392-1405.
- S. Kojima, M. Nakamoto, and K.-y. Akiba (2008) Stereospecific pseudorotation of diastereomeric anti-apicophilic spirophosphoranes: A novel stereochemical transformation involving 10-P-5 phosphoranes. *Eur. J. Org. Chem.*, 1715-1722.
- Y. Yabuno, Y. Hiraga, and M. Abe (2008) Site- and Stereoselectivity in the Photochemical Oxetane Formation Reaction (Paternò-Büchi Reaction) of Tetrahydrobenzofuranols with Benzophenone: Hydroxy-directed Diastereoselectivity? *Chemistry Letters*, **37**, 822-823.
- R. Takagi, Y. Inoue, K. Ohkata (2008) Construction of the Adamantane Core of Plukenetione-Type Polycyclic Polypropenylated Acylphloroglucinols. *The Journal of Organic Chemistry*, **73**, 9320-9325.

S. Kojima, T. Chabayashi, Y. Umeda, A. Iwamoto, K. Tanabe, and K. Ohkata (2008) Stereoselective synthesis of a novel chiral piperazine. *Heterocycles*, **75**, 1493–1501.

○総説

M. Abe (2008) Recent Progress Regarding Regio, Site, and Stereoselective Formation of Oxetanes in Paterno-Büchi Reactions. *Journal of Chinese Chemical Society*, **55**, 479-486.

○国際会議

M. Abe: Regio- and Stereoselective Formation of Oxetanes Using Radical Ion Pairs and Triplet 1,4-Diradicals 10th International Symposium on Organic Free Radicals (ISOFR 10) and 3rd Pacific Symposium on Radical Chemistry (PSRC 3) (August, 2008, Heron Island, Australia) (招待講演)

M. Abe: Site- and Stereoselectivity in the Photochemical Oxetane Formation Reaction (Paterno-Büchi Reaction) of Tetrahydrobenzofuranols with Benzophenone: Hydroxy-directed Diastereoselectivity? 2008 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (KJFP 2008) (September, 2008, Jeju, Korea) (招待講演)

T. Miyauchi, M. Suzuki, S. Kojima, and M. Abe: Asymmetric synthesis of multi-functionalized cyclopropanes with chemically modified cinchona alkaloids. The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec., 2008, Higashi-Hiroshima, Japan). (一般講演)

Y. Sashihara, A. Iwamoto, S. Kojima, and M. Abe: Diastereoselective synthesis of furans with a quaternary stereocenter at the 2-position. Third International Conference on Advanced Organic Synthesis Directed toward the Ultimate Efficiency and Practicability (May, 2008, Otsu, Japan). (ポスター)

Y. Hiraga, T. Kunishi, Triana Widiandi, S. Kojima, M. Abe: Synthesis and Application of Proline-based Asymmetric Organocatalysts for Enantioselective Aldol Reactions. Third International Conference on Advanced Organic Synthesis Directed toward the Ultimate Efficiency and Practicability (May, 2008, Ohtsu, Japan) (ポスター)

S. Niwayama, H. Wang, H. Cho, Y. Hiraga: Studies of Solvent Effects in the Selective Monohydrolysis of Symmetric Diesters. First International Symposium on Process Chemistry (ISPC 08) (July, 2008, Kyoto, Japan) (ポスター)

○国内学会

安倍 学: 局在化一重項 1,3-ビラジカルの長寿命化に及ぼす因子とテトララジカルのスピン整列。分子研研究会「ビラジカル化学とその展望」(2009年3月, 岡崎) (依頼講演)

藪野洋平, 平賀良知, 安倍学: フリルアルコール誘導体の Paternò-Büchi 反応における位置及び立体選択性に関する研究。2008年光化学討論会 (2008年9月, 堺) (一般講演)

井形直央, 山本和弘, 高木隆吉, 小島聡志: ジルコノセン触媒を用いたアルキルアルミニウム化反応における助触媒の効果。第57回高分子討論会 (2008年9月, 大阪) (ポスター発表)

坂井智子, 藤原好恒, 安倍学: 一重項ビラジカル種の反応性の及ぼす骨格及び置換基効果。第19回基礎有機化学討論会 (2008年10月, 吹田) (一般講演)

平賀良知・松尾昭彦: 赤潮プランクトン, *Heterocapsa circularisquama* が産生する二枚貝致死活性物質の構造解析。2008年日本化学会西日本大会 (2008年11月, 長崎) (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による不斉アルドール反応の検討。2008年日本化学会西日本大会 (2008年11月, 長崎) (一般講演)

- 田村大志, 安倍学: 局在化 1,3-ビラジカルを基本骨格とするポリラジカルのスピン多重度制御。2008 年日本化学会西日本大会 (2008 年 11 月、長崎) (一般講演)
- 前田倫, 安倍学: 低温ガスマトリクス中における反応性中間体の光反応: ビラジカルの場合。日本化学会第 89 春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- 田村大志, 安倍学: 局在化 1,3-ビラジカルを基本骨格としたテトララジカルのスピン整列。日本化学会第 89 春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- 岡祐児, 小島聡志, 安倍学: 多環式キラルジメチルアミノピリジン誘導体の合成と反応。2008 年日本化学会西日本大会 (2008 年 11 月、長崎) (一般講演)
- 宮内拓也, 鈴木麻希, 小島聡志, 安倍学: マイケル付加を経る有機触媒シクロプロパン化反応。2008 年日本化学会西日本大会 (2008 年 11 月、長崎) (一般講演)
- 小坂有史, 岡祐児, 岩本明久, 梅田康弘, 小島聡志, 安倍学: キラルアミン類触媒を用いた不斉 Michael 反応の検討。第 89 回日本化学会春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- 指原慶彰, 岩本明久, 小島聡志, 安倍学: 2 位に不斉 4 級炭素を有するフランの不斉合成。第 89 回日本化学会春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- Triana, Widiанти, 國西剛基, 平賀良知, 小島聡志, 安倍学: リン酸モノエステル基を有するホモプロリン誘導体の合成および不斉マイケル反応への応用。日本化学会第 89 春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- 國西剛基, Triana, Widiанти, 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を触媒として用いた不斉アルドール反応。日本化学会第 89 春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- 中村嘉宏, 平賀良知, 正木和夫, 家藤治幸, 安倍学: 酵母由来のリパーゼを用いた 3 位水酸基を保護した 1,3,5-トリオールのエナンチオ選択的不斉エステル化反応。日本化学会第 89 春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- 山本幸明・田中賢治・高木隆吉・大方勝男・安倍学: 閉環メタセシス反応を含むタンデム反応による環状化合物の合成研究。第 89 回日本化学会春季年会 (2009 年 3 月、船橋) (一般講演)
- 指原慶彰: 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 24 回若手化学者のための化学道場 (2008 年 9 月、徳島) (ポスター)
- 田村大志, 安倍学: 局在化 1,3-ビラジカルを基本骨格とするポリラジカルのスピン多重度制御。第 4 回分子情報ダイナミクス研究会 (2008 年 9 月、吹田) (ポスター発表)
- 坂井智子, 藤原好恒, 安倍学: 局在化一重項ビラジカル種の反応性に及ぼす骨格及び置換基効果。第 4 回分子情報ダイナミクス研究会 (2008 年 9 月、吹田) (ポスター発表)
- 田村大志, 安倍学: 局在化 1,3-ビラジカルを基本骨格とするポリラジカルのスピン多重度制御。第 19 回基礎有機化学討論会 (2008 年 10 月、吹田) (ポスター発表)
- 近藤広理, 井上祐太, 藤井絵美, 高木隆吉, 大方勝男: 連続的 Michael 反応を用いた Plukenetione A の中心骨格合成と不斉合成の検討。第 50 回天然有機化合物討論会 (2008 年 10 月、福岡) (ポスター発表)
- 岡祐児, 小島聡志, 安倍学: キラルジメチルアミノピリジン誘導体の合成と反応。第 38 回複素環化学討論会 (2008 年 11 月、福山) (ポスター)
- 宮内拓也, 鈴木麻希, 小島聡志, 安倍学: キニンおよびシンコニジン誘導体を触媒として用いた不斉シクロプロパン化反応。第 38 回複素環化学討論会 (2008 年 11 月、福山) (ポスター)

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|---------------------------|---------|---------|
| 学部4年生 ⁽¹⁾ | 2 | 12 |
| 博士課程前期 ⁽²⁾ | 2 | 30 |
| 博士課程後期 ⁽³⁾ | 0 | 5 |
| 博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾ | 0 | 3 |

○セミナー・講演会開催実績

第4回分子情報ダイナミクス研究会を開催

2008年9月9～10日

大阪大学銀杏会館

吹田, 大阪

主催: 分子情報ダイナミクス研究会

Borden 教授講演会

2008年10月23日

理学部 E002

The Schizophrenic Effect of Geminal Fluorination on the Kinetic Stability of Molecules with Strained Rings

Zipse 教授講演会

2009年3月2日

理学部 B305

Nucleophilic Organocatalysis

Sastry 教授講演会

2008年3月16日

理学部 B305

The Range and Relevance of Cation- π Interaction in Chemistry and Biology

○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

・国際共同研究

Norbert Hoffmann 博士 (仏国 CNRS Universite de Reims)

平賀良知

Satomi Niwayama 博士 (米国 Texas Tech 大学)

○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

科学研究費補助金, 基盤研究(C), 藻類由来の毒性物質および機能性小分子をプローブとした二枚貝致死の機構, 平賀良知,

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

科学研究費補助金, 基盤研究(C), 分子内水素結合を基軸とした新規なキラルブレンステッド酸触媒の創製と応用, 高木隆吉

○受賞状況 (職員)

安倍 学, Zimmer Award (University of Cincinnati, USA)

高木 隆吉, 第31回有機合成化学協会中国四国支部奨励賞「 π -面選択的 Diels-Alder 反応を基盤とした天然有機化合物 Scyphostatin の合成研究」(2008)

○受賞状況 (学生)

宮内拓也 (M2), The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium Student Award “Asymmetric synthesis of multi-functionalized cyclopropanes with chemically modified cinchona alkaloids” (2008)

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

2008 年度における当研究グループ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 O-H \cdots O 水素結合分子クラスターを用いて明らかにしてきた。本年度は、単純で最も基本的な系の一つと考えられるアンモニア分子クラスターに焦点を当て、N1s 内殻励起スペクトルに現れる N-H \cdots N 相互作用の微細構造を電子束縛エネルギー変化と内殻正孔状態の安定性から解明した。また、強い極性の相互作用で結合しているアセトアルデヒド分子クラスターにおいても、内殻励起 $O1s^{-1}\pi^*_{CO}$ バンドに顕著なバンドシフトが観測され、そのシフト構造が密度汎関数法計算によって確かめられた。

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エステルは、酸素 K 殻励起によるサイト選択的反応機構を検討する上で基本的な分子である。さらに、三フッ化酢酸メチル ($CF_3C(O)OCH_3$) は、ほとんどの内殻共鳴励起状態が実験的に分解でき、状態選択的解離も確認できる理想的な系でもある。各内殻励起バンドにおけるキープロダクト (CH_3^+ , CHO^+) の強度分布から分解サイトが特定され、顕著な励起サイト選択的解離が ($O1s_{CO}^{-1}\pi^*_{CO}$) と ($O1s_{OCH_3}^{-1}\pi^*_{CO}$) バンドに、また、状態選択的解離が ($O1s_{OCH_3}^{-1}\sigma^*_{C-OH_3}$), ($O1s_{OCH_3}^{-1}\sigma^*_{CO-H_3}$), ($O1s_{OCH_3}^{-1}\pi^*_{CO}$) のバンドに現れることを見出した。これらの選択的解離は Si 表面上の PMMA に対比させることができ、三フッ化酢酸メチルは、孤立分子として非常に顕著な選択性を示す代表的な系であることが判明した。

③電子衝撃法によるピコリンおよびアニリンの内殻励起・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。これらの分子ではいずれも、窒素内殻イオン化で窒素近傍での選択的結合開裂が観測された。一方、これらの構造異性体であるアニリンでは、内殻イオン化による窒素近傍での選択的解離は見られなかった。これらの結果から、環を構成する原子の内殻励起/イオン化ではエネルギーが環内での解離に効率的に消費され、かつ解離は局所的であるが、アミノ基の内殻励起では置換基内でのエネルギー緩和が充分でなく、ベンゼン環へ散逸して環の開裂が起こるものと考察された。

④イオン同時計測法によるシクロブタン環の内殻領域における解離経路

分子の内殻励起によってしばしば 2 つのイオンが同時生成する。このため、これらイオン対の検出器への到着時間の相関を測定すれば、分子の解離経路とダイナミクスに関する知見を得ることができる。このようなコインシデンス実験は励起光源の高輝度化によって初めて現実的となった。本研究では、パーフルオロシクロブタンの内殻励起後に生成する解離イオン対の飛行時間相関測定を試み、得られたデータからこの分子の解離機構について考察した。その結果、この分子の炭素内殻励起では C-C 結合が容易に切れるが、フッ素領域と比べて C-F 結合を多く切断するチャンネルへの分岐比は小さいことが分かった。

⑤孤立重水素化標識法による水やアルコールの水素結合パターンの研究

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、孤立重水素化や同位体希釈によって Methanol や水分子の液体状態における水素結合パターンを研究した。

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行い、得られた高分子の溶液物性、特に水溶液の相境界線が、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。相境界線の温度領域は立体規則性によって大きく変化し、その形も大きな影響を受けた。

○発表原著論文

- R. Kawasaki, T. Yamanaka, K. Tabayashi, and H. Yoshida (2008) Site- and state-selective dissociation of core-excited organic molecules: Deuterium-labeled methyl acetate. *J. Nucl. Sci. Tech. Suppl.* **6**, 19-23.
- O. Takahashi, T. Nomura, K. Tabayashi, K. Yamasaki (2008) Short-time maximum entropy method analysis of molecular dynamics simulation: Unimolecular decomposition of formic acid. *Chem. Phys.*, **351**(1-3), 7-12.
- Y. Tamenori, K. Okada, O. Takahashi, S. Arakawa, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma (2008) Hydrogen bonding in methanol clusters probed by inner-shell photoabsorption spectroscopy in the carbon and oxygen K-edge regions. *J. Chem. Phys.* **128**(12), 124321 (8 pages).
- Y. Tamenori, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, and K. Honma (2008) Specific fragmentation of $[(\text{CH}_3)_2\text{CO}]_n\text{Ar}_n$ heteroclusters induced by the Ar L_{23} - and O K-shell excitation. *Chem. Phys. Lett.* **462**(1-3), 40-44.
- K. Okada, M. Sakai, and K. Ohno (2008) Specific fragmentation of K-shell excited/ionized pyridine derivatives studied by electron impact: 2-Amino-3-methylpyridine and 3-methylpyridine. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **81**(12), 1580-1583.
- Y. Katsumoto and N. Kubosaki (2008) Tacticity Effects on the Phase Diagram for Poly(*N*-isopropylacrylamide) in Water. *Macromolecules* **41**, 5955-5956.
- M. Koyama, T. Hirano, K. Ohno, and Y. Katsumoto (2008) Molecular Understanding of the UCST type Phase Separation Behavior of a Stereo-controlled Poly(*N*-isopropylacrylamide) in Bis(2-methoxyethyl) ether. *J. Phys. Chem. B* **112**, 10854-10860.
- K. Ohno, T. Shimoaka, N. Akai, and Y. Katsumoto (2008) Relationship between the Broad OH Stretching Band of Methanol and Hydrogen Bonding Patterns in the Liquid Phase. *J. Phys. Chem. A* **112**, 7342-7348.
- A. Padermshoke, Y. Katsumoto, R. Masaki, and M. Aida (2008) Thermally induced double proton transfer in GG and wobble GT base pairs: A possible origin of the mutagenic guanine. *Chem. Phys. Lett.* **457**, 232-236.

○国際会議

- K. Okada, A. Suemitsu, Y. Iwasaki, I. H. Suzuki, S. Nagaoka, T. Gejo, Y. Tamenori, K. Tabayashi, and K. Ohno: Anisotropic fragmentation following the K-shell excitation of perfluorocyclobutane. 21st International Conference on X-Ray and Inner-Shell Processes (June, 2008, Paris, France) (Poster)

- T. Yamanaka, M. Chōda, H. Yoshida, O. Takahashi, and K. Tabayashi: Hydrogen-bond interaction of small ammonia clusters observed with inner-shell excitation spectroscopy at the nitrogen K-edge (II). 13th International Symposium on Synchrotron Radiation (Mar., 2009, Higashi-Hiroshima) (Poster)
- M. Chōda, T. Yamanaka, H. Yoshida, O. Takahashi, and K. Tabayashi: Inner-shell excitation spectroscopy and fragmentation of small acetaldehyde clusters at the oxygen K-edge. 13th International Symposium on Synchrotron Radiation (Mar., 2009, Higashi-Hiroshima) (Poster)

○国内学会

- 田林清彦: 水素結合分子クラスターの内殻励起スペクトルと光誘起反応—有機酸およびアンモニアクラスターの酸素内殻励起。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 (2009年3月, 西播磨) (招待講演)
- 岡田和正: 気相分子のサイト選択的解離。PF研究会—BL2Cユーザー研究会: PFの挿入光源における新しい研究の探究— (2009年1月, つくば) (依頼講演)
- 岡田和正, 寺島妙美, 池本真理子, 為則雄祐, 鈴木 功, 田林清彦, 長岡伸一: イオン同時計測法によるパーフルオロシクロブタンの炭素 K 端での解離。日本化学会第 89 春季年会 (2009年3月, 船橋) (一般講演)
- 勝本之晶: 振動分光によって分子の機能性を調べるための同位体修飾法。広域物性研究会広島シンポジウム 2008 (2008年10月, 広島) (一般講演)
- 勝本之晶, 小山美紗緒, 久保崎範行: Poly (N-isopropylacrylamide)の立体規則性が水溶液の相分離挙動に与える影響。第 31 回溶液化学シンポジウム (2008年11月, 大阪) (一般講演)
- Yukiteru Katsumoto, Misao Koyama, Noriyuki Kubosaki: Effects of the Stereoregularity on the Phase Separation of Poly(N-isopropylacrylamide) in Water and Organic Solvents. 第 5 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム。 (2008年12月, 広島) (一般講演)
- Yukiteru Katsumoto: Molecular interpretation of phase behavior of water-soluble polymers. 第 4 回 L S Wシンポジウム (2009年1月, 北海道) (一般講演)
- 勝本之晶, 久保崎範行, 衛藤由希: アクリルアミド系高分子の立体規則性が溶液物性に与える影響について。高分子基礎研究会 2009 (2009年1月, 新潟) (一般講演)
- 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 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 2 回分子科学討論会 (2008年9月, 福岡) (一般講演)
- 寺島妙美, 岡田和正, 池本真理子, 為則雄祐, 清水亜由美, 新田晃子, 鈴木 功, 長岡伸一, 田林清彦: イオン同時計測法によるフッ素内殻励起パーフルオロシクロブタンの解離過程の研究。2008年日本化学会西日本大会 (2008年11月, 長崎) (一般講演)
- 池本真理子, 岡田和正, 末光 篤, 為則雄祐, 鈴木 功, 田林清彦: イオン同時計測法によるトリフルオロアセトニトリルの N および F K 端での解離ダイナミクス。日本化学会第 89 春季年会 (2009年3月, 船橋) (一般講演)
- 板垣裕子, 黒川孝幸, 古川英光, 田中良巳, 沐劍萍, 勝本之晶: 超高強度ゲルの創製[X_I_X]—自由水と結合水が力学物性に与える影響。第 57 回高分子討論会 (2008年9月, 大阪) (一般講演)
- 岡田和正, 堺 真通, 黄 超群, 八木 創, 中島 弘一, 片柳英樹, 見附孝一郎, 田林清彦: パーフルオロシクロブタンの光イオン化と解離。第 24 回化学反応討論会 (2008年6月, 札幌) (ポスター)

- 岡田和正, 寺島妙美, 池本真理子, 為則雄祐, 清水亜由美, 新田晃子, 鈴木 功, 田林清彦, 長岡伸一: 解離イオン対の相関スペクトルでみる F 1s 励起パーフルオロシクロブタンの解離。第 2 回分子科学討論会 (2008 年 9 月, 福岡) (ポスター)
- 堺 真通, 岡田和正, 大野啓一, 田林清彦: 電子衝撃法によるメチルピリジンの特異的解離。第 24 回化学反応討論会 (2008 年 6 月, 札幌) (ポスター)
- 山中 剛志, 高橋 修, 吉田 啓晃, 田林 清彦: アンモニアクラスターの電子状態と内殻励起光吸収過程。第 2 回分子科学討論会 (2008 年 9 月, 福岡市) (ポスター)
- 末光 篤, 岡田和正, 為則雄祐, 鈴木 功, 長岡伸一, 田林清彦: パーフルオロシクロブタンの F 1s 励起と解離。第 24 回化学反応討論会 (2008 年 6 月, 札幌) (ポスター)
- 山下和子, 高橋 修, 山崎勝義, 為則雄祐, 岡田和正, 田林清彦, 下條竜夫, 本間健二: アセトンクラスターの軟 X 線分光に関する理論的研究。第 2 回分子科学討論会 (2008 年 9 月, 福岡) (ポスター)
- 池本真理子, 岡田和正, 末光 篤, 為則雄祐, 鈴木 功, 田林清彦: 解離イオン対の相関スペクトルでみる N および F 1s 励起 CF₃CN 分子の解離ダイナミクス。第 22 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2009 年 1 月, 東京) (ポスター)
- 丁田 充, 山中剛志, 高橋 修, 吉田啓晃, 田林清彦: 酸素 K 殻電子励起によるアセトアルデヒド分子クラスターの光励起・誘起反応機構。日本化学会第 89 春季年会 (2009 年 3 月, 船橋市) (ポスター)
- 久保崎範行, 勝本之晶: poly(N-isopropylacrylamide)水溶液の相図に対する立体規則性の影響。第 57 回高分子年次大会 (2008 年 5 月, 横浜) (ポスター)
- 角田洋幸, 岡田哲男, 勝本之晶, 長谷川健: 直鎖ポリエチレンイミン水溶液の相分離機構の近赤外分光法による解析。第 57 回高分子年次大会 (2008 年 5 月, 横浜) (ポスター)
- 下赤卓史, 大野啓一, 勝本之晶: 水素結合パターンと強度の相関関係を用いた液体メタノールのネットワーク構造の研究。第 2 回分子科学討論会 (2008 年 9 月, 福岡) (ポスター)
- 久保崎範行, 勝本之晶: 立体規則性が Poly(N-isopropylacrylamide)の溶解性に与える影響。第 57 回高分子討論会 (2008 年 9 月, 大阪) (ポスター)
- 衛藤由希, 勝本之晶: Poly(N,N-diethylacrylamide)水溶液の相分離温度と立体規則性との相関。第 57 回高分子討論会 (2008 年 9 月, 大阪) (ポスター)
- 久保崎範行, 勝本之晶: Poly (N-isopropylacrylamide-co-N,N-diethylacrylamine)水溶液の相分離挙動。平成 20 年度中国四国地区高分子若手研究会 (2008 年 11 月, 松山) (ポスター)
- 下赤卓史, 勝本之晶: 水素結合パターンを考慮した水溶液の uncoupled OH 伸縮バンドの解析。第 31 回溶液化学シンポジウム (2008 年 11 月, 大阪) (ポスター)

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|------------|---------|---------|
| 学部 4 年生 | 2 | 4 |
| 博士課程前期 | 2 | 15 |
| 博士課程後期 | 0 | 4 |
| 博士課程前期・後期共 | 0 | 0 |

○研究助成の受け入れ状況

平成20年度科学研究費補助金基盤研究(C), 「量子化学計算を用いた誘起CD励起子相互作用による天然物の絶対配置決定法の確立」代表 細井信造

平成20年度池谷科学技術振興財団研究助成, 「多角入射分解分光法による高分子薄膜におよぼす界面場の影響の解析」代表 長谷川健

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。

①quasi-classical direct ab initio MD 法による 3 原子分子の基本音と平均構造

古典力学と量子力学の対応関係を考慮に入れ、分子の振動固有状態を MD でシミュレートする。このようにして、水分子の振動の基本音、および回転スペクトルや電子線回折から得られる OH 間距離と HOH 角に相当する値を計算し、実測とよく一致する値を得た。

②ONIOM-MD

ハイブリッド分子動力学法である ONIOM 分子動力学法によるシミュレーションを、体内で、抗癌剤活性化に重要な役割を果たす酵素、シトシンデアミナーゼに応用した。活性サイトの環境の効果を、熱運動を考慮に入れて解析した。

③ローヤルゼリーの薬理効果について

ミツバチのローヤルゼリーに含まれる脂肪酸は、ホルモンエストロゲンの薬理効果と同様に、自律神経失調、更年期障害、骨粗鬆症などに有効である。しかし、どのような作用によりこれらの効果を示すのかについては分かっていない。本研究では、ヒトのエストロゲン受容体 β とローヤルゼリーに含まれる脂肪酸の相互作用を理論的に解析した。

④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。DR-SFG の重要な応用として、分子薄膜のキラリティを検出がある。ポルフィリン (Tetrakis-4-sulfonatophenyl-porphyrin, TSPP) のキララな J-会合体薄膜について、振動 SFG バンドの振幅の可視プローブ波長依存性 (DR-SFG 電子励起スペクトル) を測定し、キララ SFG 信号の発生機構を検討した。電子励起スペクトルの測定は、会合体の J バンド (ピーク波長 490 nm) の付近について行った。検討した振動バンドのうち、1090, 1130 cm^{-1} バンドの励起スペクトルは、キララ SFG 信号とアキララ SFG 信号で異なり、電子吸収スペクトルとも異なった形となった。共鳴ラマンテンソルの分散として振電相互作用による簡略化した形を仮定すれば、二つの電子準位を中間状態として持つラマンテンソルの項の間の干渉効果として、観測されたスペクトル形を定性的に理解できることを見いだした。

○発表原著論文

M. Ohisa, H. Yamataka, M. Dupuis and M. Aida (2008) Two-dimensional free-energy surface on the exchange reaction of alkyl chloride/chloride using the QM/MM-MC method. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2008, **10**, 844-849.

T. Yamada, M. Aida (2008) Fundamental absorption frequencies and mean structures at vibrational ground state from quasi-classical direct ab initio MD: Triatomic molecule. *Chem. Phys. Lett.*, 2008, **452** (4-6), 315-320.

T. Matsubara, M. Dupuis, and M. Aida (2008) An Insight into the Environmental Effects of the Pocket of

the Active Site of the Enzyme. Ab initio ONIOM-Molecular Dynamics (MD) Study on Cytosine Deaminase. *Journal of the Computational Chemistry*, **29**, 458-465.

A. Padermshoke, Y. Katsumoto, R. Masaki, M. Aida (2008) Thermally induced double proton transfer in GG and wobble GT base pairs: A possible origin of the mutagenic guanine. *Chem. Phys. Lett.*, 2008, **457** (1-3), 232-236

T. Matsubara, H. Sugimoto and M. Aida (2008) A Theoretical Insight into the Interaction of Fatty Acids Involved in Royal Jelly with the Human Estrogen Receptor β . *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **81** (10), 1258-1266.

T. Maeda, T. Nagahara, M. Aida, T. Ishibashi (2008) Identification of chemical species of fluorescein isothiocyanate isomer-I (FITC) monolayers on platinum by doubly resonant sum-frequency generation spectroscopy. *J. Raman Spectrosc.*, 2008, **39** (11), 1694-1702.

○国際会議

T. Ishibashi: Development of a Multiplex Spectrometer for Doubly-Resonant SFG spectroscopy, The annual meeting of the Federation of Analytical Chemistry and Spectroscopy (FACSS) (Oct. 2008, Reno, USA) (招待講演 Plenary lecture)

M. Aida: QM/MM-MC Simulation of Reactions in Aqueous Solution, The 2nd International Symposium on "Molecular Theory for Real Systems", (2008年8月, 愛知) (依頼講演)

T. Yamada, M. Aida: Molecular Structures in ground and excited vibrational states from quasi-classical direct ab initio MD, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar—Molecular And Magneto Science—, (2008年12月, 東広島) (一般講演)

D. Akase, M. Aida: Distribution of H-bond patterns and enhancement of molecular dipole moment in water clusters, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar—Molecular And Magneto Science—, (2008年12月, 東広島) (一般講演)

S. Sakata, M. Aida: IR spectra of five-membered heterocycles by means of quasi-classical direct ab initio MD, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar—Molecular And Magneto Science—, (2008年12月, 東広島) (一般講演)

M. Jieli, M. Aida: Structures and infrared spectra of the topology-distinct protonated water clusters, $\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ ($n \leq 6$), Gordon Research Conference on Molecular & Ionic Clusters (Sep, 2008, Centre Paul Langevin in Aussois, France) (ポスター)

M. Jieli, M. Aida: Structures and Infrared Spectra of the Topology-distinct Protonated Water Clusters $\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ ($n \leq 6$), The World Association of Theoretical and Computational Chemists 2008 (Sep. 2008, Sydney, Australia) (ポスター)

T. Yamada, M. Aida: Theoretical study of molecular mean structures at vibrational excited states using quasi-classical direct ab initio MD, The Sixth Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, (Jul. 2008, Vancouver, Canada) (ポスター)

H. Miyamoto, M. Aida: Free Energy Change of Glycine Tautomerization in Aqueous Solution, The World Association of Theoretical and Computational Chemists 2008 (Sep. 2008, Sydney, Australia)

M. Jieli, M. Aida: Enumeration of Structures and Classification of OH bonds of the Topology-distinct Protonated Water Clusters $\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})_{n-1}$ ($n \leq 7$), The Horiba International Symposium on Simulations and Dynamics for Nanoscale and Biological Systems, (2009年3月, 東京) (ポスター)

○国内学会

相田 美砂子: 計算化学の視点から・・・物理と生命のかけ橋。第18回インテリジェント・シ

- ステム・シンポジウム (2008年10月, 広島) (特別講演)
- 相田 美砂子: 量子化学シミュレーション。2008日本化学会西日本大会 (2008年11月, 長崎) (特別講演)
- 石橋 孝章: 振動電子二重共鳴 SFG 分光法 — 生体分子膜の高感度測定を目指して。特定領域研究「高次系分子科学」ミニ公開シンポジウム「イオンチャネルの構造ダイナミクス」(2008年7月, 福井) (招待講演)
- 石橋孝章・永原哲彦: ポルフィリン会合体薄膜の振動電子二重共鳴キラル SFG 分光。シンポジウム「表面・界面を観る非線形分光の新しい展開」(2009年3月, 和光) (招待講演)
- 相田 美砂子: 理系大学院の現状と課題 — 物理化学の視点から —。高等教育研究開発センター第36回研究員集会 (2008年10月, 広島) (依頼講演)
- 宮本 秀範, 相田 美砂子: グリシンの異性化に伴う水和自由エネルギーの変化に関する理論化学的研究。第11回理論化学討論会 (2008年5月, 神奈川) (一般講演)
- 正木 竜太, 相田 美砂子: 核酸塩基の異性化過程へのスタッキング相互作用の影響。第2回分子科学討論会 (2008年9月, 福岡) (一般講演)
- 山田 朋範, 相田 美砂子: 分子の振動基底状態および励起状態における平均構造の理論化学研究。第2回分子科学討論会 (2008年9月, 福岡) (一般講演)
- 宮本 秀範, 相田 美砂子: グリシンの水和自由エネルギーについての理論化学的研究。2008日本化学会西日本大会 (2008年11月, 長崎) (一般講演)
- 岡本 拓也, 相田 美砂子: QM/MM 法による水溶液中アスコルビン酸の構造についての理論化学的研究。2008年日本化学会西日本大会 (2008年11月, 長崎) (一般講演)
- 三枝 俊亮, 相田 美砂子: 直鎖分子の柔軟性についての理論化学的研究。日本化学会第89春季年会 (2009年3月, 東京) (一般講演)
- 赤瀬 大, 相田 美砂子: 水クラスター (H_2O)_n (n=3-6) の水素結合パターンについての理論化学的研究。第11回理論化学討論会 (2008年5月, 神奈川) (ポスター)
- 坂田 修一, 相田 美砂子: Quasi-classical direct ab initio MD 法による複素五員環のパックリングに関する理論化学的研究。第11回理論化学討論会 (2008年5月, 神奈川) (ポスター)
- 前田 晃宏, 石橋孝章: 時間分解赤外分光法を用いた二酸化チタン光触媒によるピバル酸分解反応の追跡。第2回分子科学討論会 2008 福岡 (2008年9月, 福岡) (ポスター)
- 前田 俊樹, 永原 哲彦, 相田 美砂子, 石橋 孝章: 白金上のフルオレセイン誘導体膜の二重共鳴 SFG 励起スペクトル。第2回分子科学討論会 (2008年9月, 福岡) (ポスター)
- 安藤 広司, 相田 美砂子: 直鎖分子の柔軟性についての理論化学的研究。第31回情報化学討論会 (2008年11月, 東京) (ポスター)
- 坂宗 和明, 相田 美砂子: Direct ab initio MD Study on Deuterium Cation (D^+) Exchange Reaction of DODOD^- 。2008年日本化学会西日本大会 (2008年11月, 長崎) (ポスター)
- 赤瀬 大, 相田 美砂子: 水クラスターの水素結合パターンによる分類と自由エネルギー計算。スーパーコンピューターワークショップ 2009 (2009年1月, 愛知) (ポスター)
- 前田 俊樹, 石橋 孝章: 二重共鳴 SFG 励起スペクトルのためのマルチプレックス SFG 分光装置の開発。シンポジウム「表面・界面を観る非線形分光の新しい展開」(2009年3月, 和光) (ポスター)

○学生の学会発表実績

| | 国際学会 件数 | 国内学会 件数 |
|------------|---------|---------|
| 学部4年生 | 0 | 1 |
| 博士課程前期 | 2 | 6 |
| 博士課程後期 | 6 | 7 |
| 博士課程前期・後期共 | 0 | 0 |

○セミナー・講演会開催実績

相田 美砂子, 「第 130 回量子生命科学セミナー」(2008 年 6 月)

相田 美砂子, 「第 131 回量子生命科学セミナー」(2008 年 7 月)

○共同プロジェクトへの参加状況

相田 美砂子, 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」実施責任者(2007-2009)

○研究助成の受け入れ状況

池谷科学技術振興財団研究助成, 「界面敏感振動和周波分光による有機伝導体無機基板界面の研究」(代表: 石橋 孝章)

文部科学省科学研究費補助金, 特定領域研究 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)

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)

○受賞状況(職員)

石橋 孝章, 2008 William F. Meggers Award, Society for Applied Spectroscopy

○受賞状況(学生)

前田 俊樹(博士課程後期 2 年) 2008 William F. Meggers Award, Society for Applied Spectroscopy

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
- ・ 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 20 年度（2008 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 | 0 |
| 文部科学省科学研究費補助金 | 特定領域研究 | 9 |
| | 基盤研究(A) | 2 |
| | 基盤研究(B) | 6 |
| | 基盤研究(C) | 6 |
| | 萌芽研究 | 2 |
| | 若手研究(A) | 0 |
| | 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） | | 6 |
| 委任経理金 | | 1 |

1-4-5 学会ならびに社会での活動

・学協会役員，委員

- 江幡孝之，分子科学会運営委員(2006-)
- 江幡孝之，分子科学研究所運営会議委員(2007-)
- 江幡孝之，実力養成化学スクール「物理化学」研修コース(日本化学会主催)主査(2007-)
- 井口佳哉，分子科学会総務委員会委員(2006-)
- 井口佳哉，日本分光学会学会誌編集委員(2007-)
- 福原幸一，日本熱測定学会委員(2005-)
- 井上克也，日本化学会欧文誌(Bull. Chem. Soc. Jpn.)編集委員(2007-)
- 井上克也，SPring-8 利用者懇談会「キラル磁性マルチフェロイック研究会」代表(2008-)
- 井上克也，SPring-8 利用者懇談会「キラル磁性研究会」代表(2007-2008)
- 井上克也，雑誌「固体物理」誌友(2008-)
- 三吉克彦，日本化学会理事(2007年3月-2009年2月)
- 三吉克彦，近畿化学協会有機金属部会幹事(2006年4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，日本化学会，中国四国支部地区幹事(2008)
- 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)
- 山崎勝義，日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2006)
- 山崎勝義，日本分光学会中国支部会計監査 (2006)
- 山崎勝義，日本化学会中国四国支部会計幹事 (2008)
- 高口博志，原子衝突研究協会行事委員 (2004-2007)
- 高口博志，日本化学会代議員 (2007)
- 高口博志，原子衝突研究協会運営委員 (2008)
- 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-)
 安倍 学, 日本化学会中国四国支部庶務幹事
 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-)
 岡田和正, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2007 年度)
 相田美砂子, 日本化学会中国四国支部代議員 (2008, 11.-)
 相田美砂子, 日本化学会情報化学部会幹事(1996-2007)
 相田美砂子, 日本化学会中国四国支部幹事(2002-2008)
 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 赤外ラマン部会 幹事(2005-)
 石橋孝章, 日本分析機器工業会 ラマン分光分析通則 JIS 新規原案作成委員会委員(2008-)

・外部評価委員など

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-)

・講習会・セミナー講師

灰野岳晴, 社会人・大学教員による模擬授業, 「超分子化学」フラーレン芳香族を用いた分子集合体の合成と物性の制御(2008年12月, 広島井口高校)
 Takeharu Haino, “Construction and Function of Supramolecular Architectures via Multimolecular Assembly”, Department of Chemistry, Prague Institute of Chemical Technology, Nov. 2008.
 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)
 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)
 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 8 月, 日本化学会)
 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)
 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)

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」(2008年8月, 日本化学会)

山本陽介, 超原子価5配位および6配位炭素化合物研究から触媒反応への展開。先進機能物質研究センター講演会(2008年12月, 東広島)

山本陽介, 超原子価5配位・6配位炭素およびホウ素化合物の合成と構造。地域再生人材創出拠点形成特別講演会(2008年11月, 盛岡)

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
相田美砂子, 講演: 「理系のすすめ ~自分らしさを発揮するために~」

(男女共同参画のまちづくり講演会(八本松小学校)主催: 東広島市 2008年6月)

相田美砂子, 体験実験コーナー「コンピュータで遊ぼう」(「おもしろワクワク化学の世界'08 広島化学展」(2008年7月, 広島市こども文化科学館)

相田美砂子, 体験実験コーナー「リカだいすき!」(「おもしろワクワク化学の世界'08 広島化学展」(2008年7月, 広島市こども文化科学館)

・ 高大連携事業

水田 勉, 鳥取県立鳥取東高等学校 SSH 自然化学実験(2008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(2008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)

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)

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」(2008年7月, 広島県立広島皆実高等学校)

山本陽介, 広島大学附属高等学校 SSH 事業, (2008年7月)

安倍 学, 出張講義, (2008年7月16日, 基町高等学校)

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, 実習「コンピュータで化学する」「体験科学講座~女子高生特別コース~」(2008年8月, 広島大学理学部)

・ 論文誌編集委員

井上克也, 日本化学会欧文誌(Bull. Chem. Soc. Jpn)編集委員(2006.3-)

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–)
 安倍 学, ARKIVOC EDITORIAL BOARD OF REFEREES, EDITORIAL BOARD (2005–)
 安倍 学, *Bulletin of the Chemical Society of Japan* (2009–)
 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)

・学会・討論会の組織委員

井上克也, 分子研研究会「シングレットビラジカルの化学と展望」提案者, 2009年
 井上克也, 放射化学討論会実行委員、2008年
 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(2002–2003)
 藤原照文, 日本化学会西日本大会実行委員(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(2004–)
 藤原照文, 日本分析化学会第56年会実行委員(2006–2007)
 藤原照文, The 15th International Conference of Flow Injection Analysis (ICFIA 2008) 組織委員(2008)
 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(2006–2007)
 灰野岳晴, 第2回有機 π 電子系シンポジウム実行委員長, 2008年
 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
 高口博志, 第15回化学反応討論会実行委員会委員 (1999)
 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)
 山本陽介, 基礎有機化学討論会組織委員(2007–)
 安倍 学, 基礎有機化学討論会組織委員(2007–)
 安倍 学, International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (2005–)
 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, 第16回化学反応討論会実行委員会事務局 (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(2000–2001)
 田林清彦, 2004分子構造総合討論会実行委員 (2003–2004)
 田林清彦, 第44回燃焼シンポジウム実行委員 (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(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)
 岡田和正, 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 (2005–2007)
 勝本之晶, 2004分子構造総合討論会実行委員 (2004)
 相田美砂子, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar—
 Molecular And Magneto Science — 実行委員長 (2008年12月)
 相田美砂子, 第6回 QuLiS シンポジウム「情報と教育」オーガナイザー(2009年3月)

・その他の委員

- 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-)
- 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)
- 塚原 聡, 日本分析化学会会誌編集委員(2008-)
- 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, 広島大学北京研究センター運営委員 (2006-)
- 山崎勝義, 広島大学図書館 リポジトリ・アドバイザー (2007-)
- 山崎勝義, 特色ある大学教育プログラム(特色 GP)取組担当者 (2007-)
- 山崎勝義, 広島大学大学院理学研究科理学融合教育研究センター運営委員 (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(2007-2008)
- 岡田和正, 日本原子力研究開発機構 光科学専門部会委員 (2008年度-)
- 相田 美砂子, 広島大学副理事 (男女共同参画担当) (2007. 5.21-)
- 相田 美砂子, 広島大学男女共同参画推進委員会副委員長 (2007. 5.21-)
- 相田 美砂子, 広島大学男女共同参画推進室長 (2008. 4.1-)

・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-2009年3月31日
- 山本陽介, 熊本大学理学部, 非常勤講師, 2008年6月12日-2008年6月13日
- 山本陽介, 東京工業大学理学部, 非常勤講師, 2008年6月19日-2008年6月20日
- 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-)
- 平賀良知, 広島工業大学情報学部, 非常勤講師, 2008年5月1日-2009年3月31日)
- 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-2009年3月

・講習会・セミナー講師

- 安倍 学, University of North Texas, 2008年3月24日, Denton Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry
- 安倍 学, University of Texas at San Antonio, 2008年3月25日, San Antonio Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry
- 安倍 学, North Dakota State University, 2008年3月28日, North Dakota Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry
- 安倍 学, Ohio State University, 2008年3月31日, Columbus Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry

・座長を行った学会・討論会の名称

- 江幡孝之, Third Japanese - Russian Seminar "Molecular and Magneto-science" (Dec. 12-23, 2008)
- 井口佳哉, 第2回分子科学討論会(福岡), 2008年9月
- 井口佳哉, Third Japanese - Russian Seminar "Molecular and Magnetoscience" (Hiroshima, Dec. 12-23, 2008)
- 福原幸一, 第44回熱測定討論会(つくば), 2008年10月
- 井上克也, 分子研研究会「シングレットビラジカルの化学と展望」, 2009年3月5-6日
- 三吉克彦, 第58回錯体化学討論会(2008年9月, 金沢)

- 水田 勉, 第 58 回錯体化学討論会(2008 年 9 月, 金沢)
- 水田 勉, 日本化学会第 89 春季年会(2009)(2009 年 3 月, 千葉)
- 灰野岳晴, 第 5 回ホスト・ゲスト化学シンポジウム, 宇都宮, 2008 年 5 月
- 灰野岳晴, 第 19 回基礎有機化学討論会, 札幌, 2008 年 10 月
- 灰野岳晴, 日本化学会第 89 春季年会, 船橋, 2008 年 3 月
- 藤原照文, The 15th International Conference of Flow Injection Analysis (FIA) and the 25th Anniversary Meeting of Japanese Association for FIA (September, 2008, Nagoya, Japan)
- 塚原 聡, 日本分析化学会第 69 回分析化学討論会, 名古屋国際会議場, 名古屋市, 2008 年 5 月
- 塚原 聡, 日本分析化学会第 57 年会, 福岡大学, 福岡市, 2008 年 9 月
- 山本陽介, 第 19 回基礎有機化学討論会, 大阪, 2008 年 10 月
- 山本陽介, 第 35 回有機典型元素化学討論会, 八王子, 2008 年 12 月
- 河内 敦, 日本化学会第 89 春季年会, 船橋, 2009 年 3 月
- 松川史郎, 日本化学会第 89 春季年会, 船橋, 2009 年 3 月
- 安倍 学, 第 4 回分子情報ダイナミクス研究会, 吹田, 2008 年 9 月
- 安倍 学, 2008 年光化学討論会, 堺, 2008 年 9 月
- 安倍 学, 第 19 回基礎有機討論会, 吹田, 2008 年 10 月
- 小島聡志, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar—Molecular And Magneto Science —, 東広島, 2008 年 12 月
- 小島聡志, 第 89 日本化学会春季年会, 船橋, 2009 年 3 月
- 平賀良知, 2008 年日本化学会西日本大会, 長崎, 2008 年 11 月
- 高木隆吉, 第 8 9 日本化学会春季年会, 船橋, 2009 年 3 月
- 岡田和正, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar—Molecular And Magneto Science —, 東広島, 2008 年 12 月
- 岡田和正, 日本化学会第 89 春季年会, 船橋, 2009 年 3 月
- 相田美砂子, 特定領域研究「実在系の分子理論」平成 20 年度成果報告会, 札幌, 2008 年 12 月
- 石橋孝章, The 5th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 3rd Japanese-Russian Seminar—Molecular And Magneto Science —, 東広島, 2008 年 12 月

1-5 その他特記事項

1-5-1 量子生命科学プロジェクト研究センター

Center for Quantum Life Sciences (QuLiS)

メンバー

理学研究科化学専攻

相田 美砂子 (代表), 井上 克也, 江幡 孝之, 石橋 孝章, 小島 聡志, 勝本 之晶
理学研究科数理分子生命理学専攻

井出 博, 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)

松原 世明, 吉田 智喜

外国人客員研究員

Adchara Padermshoke

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 20 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。要旨等の詳細は上記 HP を参照してください。

第 130 回 2008 年 6 月 24 日 (火) 15:00~16:30 理学部小会議室 (E202 室)

講演題目: Reading bond orders from the density matrix

講演者: Dr. Mike Schmidt

(Department of Chemistry, Iowa State University)

第 131 回 2008 年 7 月 29 日 (火) 16:00~17:30 理学部 B101 室

講演題目: 量子力学の第 2 革命と生命科学へのインパクト

講演者: 神沼 二眞

(広島大学大学院理学研究科 NaBiT プログラム、東京医科歯科大学 バイオ医療オミックス人材育成計画、情報計算法学生物学会)

第 132 回 2008 年 9 月 9 日 (火) 15:00~16:30 理学部 E209 室

講演題目: 振動分光法と多変量解析

講演者: 新澤 英之

(独立行政法人 理化学研究所 佐藤光バイオプシー開発研究ユニット)

② 第 6 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 6 回 QuLiS シンポジウム「情報と教育」

日時: 2009 年 3 月 9 日 (月) 13:00~17:00

場所: 広島大学理学部 大会議室

1. 13:00~13:45 角屋 重樹 (広島大学大学院教育学研究科)

「情報処理能力としての PISA 型学力と問題解決」

2. 13:45~14:30 伊藤 眞人、高木 正則、勅使河原 可海 (創価大学工学部)

「大学教育でのインターネット活用への新規な取り組み: 学生が協調的に作問可能な WBT システム「CollabTest」の「有機化学」の授業での活用例」

3. 14:30~15:15 佐藤 明子、室伏 きみ子

(お茶の水女子大学大学院人間文化創成科学研究科)

「海外の大学の初等・中等教育への関わりーサイエンスアウトリーチ」

4. 15:30~16:15 上原 隆平 (北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科)

「北陸先端科学技術大学院大学における教育の電子化」

5. 16:15~17:00 細矢 治夫 (お茶の水女子大学 名誉教授)

「感性より感受性をー科学教育の基本ー」

④理学研究科の正式授業科目として「計算化学演習」を集中講義として実施した。この演習において、総合研究実験棟 6 階にある計算機（約 50 ノードの PC クラスタ）を使用した。

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

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21年3月1日現在）および平成20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 | |
| | 安倍 学 | 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 | |
| | 井上 克也 | 化学専攻分子構造化学講座 | |
| | 井上 将彦（非常勤） | 富山大学大学院医学薬学研究部 | |
| | 江幡 孝之 | 化学専攻分子構造化学講座 | |
| | 酒井 健（非常勤） | 九州大学大学院理学研究院 | |
| | 楯 真一 | 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 | 自然科学研究支援開発センター | |
| | 中田 聡 | 数理分子生命理学専攻生命理学講座 | |
| | 灰野 岳晴 | 化学専攻分子構造化学講座 | |
| | 藤原 照文 | 化学専攻分子構造化学講座 | |
| | 三吉 克彦 | 化学専攻分子構造化学講座 | |
| | 山崎 勝義 | 化学専攻分子反応化学講座 | |
| | 山本 陽介 | 化学専攻分子反応化学講座 | |
| | 准教授 | 石橋 孝章 | 化学専攻分子反応化学講座 |
| | | 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 | | 自然科学研究支援開発センター | |
| 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 | |

【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20年度 化学科長 楯 真一
副化学科長 藤原 照文
化学科長補佐 河内 敦

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20年度の各種委員会の委員一覧を次にあげる。

| | |
|-----------------------------|--|
| 図書委員 | ◎ 灰野 井口 秋田 久保 岡本 高橋 河内 安倍 岡田 石橋 楯 芦田 |
| 化学実験委員 | ◎ 石橋 岡本 久保 藤原（昌） 勝本 芦田 松川 |
| 教務問題検討委員 | ◎ 岡田 楯 田林 石橋 小島 速水 |
| 情報処理委員 | ◎ 相田 岡本 久保 安倍 高橋 芦田 |
| 野外研修企画委員 および 担当研究グループ | ◎ 泉 楯 物理環境 錯体化学 分析化学 化学 量子化学 有機典型 元素化学 |
| 当番研究グループ | 構造物理化学研究グループ |
| 安全衛生委員 | ◎ 山本 福原 岡本 久保 塚原 岩本 高橋 河内 平賀 勝本 藤原（好） 芦田 大前 |
| 危険薬品庫管理者 | 平賀 |
| シリンダーキャビネット室管理者 | 岩本 |
| 就職担当 | 井上 H19年10月～H20年9月末 田林 H20年10月～H21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20年度化学科在籍学生数

平成20年5月1日現在

| 入学年度 | 在籍学生数 |
|--------|---------|
| 平成20年度 | 65(24) |
| 平成19年度 | 73(11) |
| 平成18年度 | 64(14) |
| 平成17年度 | 66(17) |
| 平成16年度 | 9(1) |
| 平成15年度 | 7(0) |
| 平成14年度 | 3(1) |
| 合計 | 287(68) |

() 内は女子で内数

・チューター

| 入学年度 | チューター |
|--------|------------|
| 平成20年度 | 楯, 河内, 福原 |
| 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20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 | 高橋 | 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 | 田林 | 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 | 井上, 灰野 | 原子・分子, 化学結合, 化学熱力学, 化学平衡, 化学反応, 有機化学 |
| 教養 | 3前 | 必修 | 化学英語演習1 | 山崎, 安倍, 速水 | 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 | 泉, 石橋, 久保, 山本, 藤原(好), 塚原 | 化学的情報の収集・整理・提供 |
| 専門 | 3後 | 選択必修 | 先端化学 | 楯 | 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 | 楯 | 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 | 生化学, 分子生物学, 酵素化学, 核酸化学 |
| 専門 | 3後 | 選択 | バイオインフォマティクス | 芦田, 大前 | 分子生物学, 構造生物学, 情報化学, 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2 | 藤原(照), 江幡, 山本 | 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 | 微視的状态と巨視的状态, ボルツマン分布, 分子分配関数, 集団分配関数, 局在系と非局在系 |
| 専門 | 2後 | 必修 | 物理化学IIB | 相田 | 原子構造, 分子構造, 量子化学 |
| 専門 | 2後 | 選択 | 生体物質化学 | 泉 | 蛋白質・脂質・糖・生理活性物質・生体構築物質・生体機能物質 |
| 専門 | 3前 | 選択 | 物理化学演習 | 片柳, 山崎, 井口, 齋藤, 藤原(好) | 熱力学, 化学平衡, 相平衡, 量子力学, 回転・振動分光法, 統計熱力学 |
| 専門 | 2後 | 必修 | 物理化学演習II | 石橋, 岡田, 齋藤, 勝本, 高橋 | 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 | 河内, 岩本, 高木, 平賀 | 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 | 石橋 | 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 | 気体分子運動論, 反応断面積, 反応速度, 反応速度定数, 遷移状態理論 |
| 専門 | 3 前 | 選択 | 分子構造化学 | 江幡 | 分光法, スペクトル, 回転・振動・電子状態 |
| 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 | 蛋白質構造, 蛋白質を対象とした計測技術, 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 | 中田 | 光, 電子, 電磁波, 励起, スペクトル, 光化学 |
| 専門 | 3 後 | 選択 | 集積化学 | 田林 | 分子集合体, クラスタ, 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・超分子化学 |
| 専門 | 3 前 | 選択 | 生物化学 | 泉 | 生体成分の代謝, エネルギー代謝 |
| 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 | 軌道概念, 第二周期と第三周期以降元素との違い, 還元 |
| 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 | 有機化合物・命名法・官能基・立体化学・共鳴 |
| 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, 原子とイオンのサイズ, 結合力, 混成軌道と VSEPR 則 |
| 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 | 河内 | 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, 結晶場分裂と結晶場安定化 |
| 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 | 石橋 | 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 | 山崎, 井口, 片柳 | 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 | 楯 | Advanced Chemistry, Frontier of Chemistry |

集中講義

酒井 健 (九州大学大学院理学研究院教授)
 授業科目名: 機能性錯体特論 (3・4 年次生対象)
 (担当: 化学専攻分子構造化学講座錯体化学研究グループ)
 井上 将彦 (富山大学大学院医学薬学研究部教授)
 授業科目名: 生物有機化学特論 (3・4 年次生対象)
 (担当: 化学専攻分子構造化学講座構造有機化学研究グループ)

・担当授業科目一覧

平成20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 | 化学英語演習 1 | | ◎ |
| | 泉 俊輔 | 生体物質化学, 生物化学, システムバイオロジ- ー, 教養ゼミ | | | ◎ |
| | 井上 克也 | 無機固体化学, 化学概説 B (分担) | | | ◎ |
| | 井上 将彦 | 生物有機化学特論 | | | |
| | 江幡 孝之 | 基礎化学 A, 分子構造化学 | 化学英語演習 2 | | ◎ |
| | 酒井 健 | 機能性錯体特論 | | | |
| | 楯 真一 | 生体高分子化学, 教養ゼミ, 化学インターンシ ップ, Modern Chemistry, 先端化学 | | | ◎ |
| | 田林 清彦 | 集積化学, 化学概説 A | | | ◎ |
| | 中島 覚 | 放射化学 | | | ◎ |
| | 中田 聡 | 分子光化学 | | | ◎ |
| | 灰野 岳晴 | 有機化学 II, 構造有機化学, 化学概説 B (分担) | | | ◎ |
| | 藤原 照文 | 機器分析化学 | 化学英語演習 2 | | ◎ |
| | 三吉 克彦 | 基礎無機化学, 無機化学 III | 無機化学演習 | | ◎ |
| | 山崎 勝義 | 物理化学 IIA, 反応動力学 | 物理化学演習 (分担), 総合 演習 (分担), 化学英語演習 1 | | ◎ |
| | 山本 陽介 | 有機典型元素化学, 基礎化学 B, 教養ゼミ | 化学英語演習 2 | | ◎ |
| 准教授 | 石橋 孝章 | 物理化学 IA, 化学実験, 教養ゼミ | 物理化学演習 II (分担), 化学 実験 A | ◎ | ◎ |
| | 井口 佳哉 | 基礎物理化学 B | 物理化学演習 (分担), 総合 演習 (分担) | ○ | ◎ |
| | 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 | 物理化学演習 (分担), 総合 演習 (分担) | ○ | ◎ |
| | 河内 敦 | 有機化学 I, 有機分析化学 | 有機化学演習 (分担) | ○ | ◎ |
| | 小島 聡志 | 基礎有機化学 | | ○ | ◎ |
| | 高口 博志 | | | ○ | ◎ |
| | 齋藤 健一 | 光機能化学 | 物理化学演習 (分担), 物理化 学演習 II (分担) | ○ | ◎ |
| | 塚原 聡 | 無機化学 II, 教養ゼミ | | ○ | ◎ |
| | 速水 真也 | 無機化学 I | 化学英語演習 1 | ○ | ◎ |
| | 藤原 好恒 | 基礎物理化学 A, 教養ゼミ | 物理化学演習 (分担) | ○ | ◎ |
| | 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 | | 物理化学演習 II (分担) | ○ | ○ |
| | 久保 和幸 | 教養ゼミ | | ○ | ○ |
| | 高木 隆吉 | | 有機化学演習 (分担) | ○ | ○ |
| | 高橋 修 | | 物理化学演習 II (分担), 情 報活用演習 | ○ | ○ |
| | 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 | | | ○ | ○ |

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 Semester)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Semester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20年度入学生から適用する。

平成20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別な事例の場合、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 | | | | | | | | |
| | 教 養 ゼ ミ | 2 | 教養ゼミ | 2 | 必修 | ② | | | | | | | | | | | | | | | |
| 共通科目 | 英語 (注1) | コミュニケーション I | コミュニケーション I A | 1 | 必修 | ① | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | コミュニケーション I B | 1 | | ① | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | コミュニケーション II | コミュニケーション II A | 1 | | | ① | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | コミュニケーション II B | 1 | | | ① | | | | | | | | | | | | | | |
| | | コミュニケーション III | コミュニケーション・ライティング | 1 | 選択必修 | | | | ○ | ○ | | | | | | | | | | | |
| | | | エクステンシブ・リーディング | 1 | | | | | ○ | ○ | | | | | | | | | | | |
| | オーラル・プレゼンテーション | | 1 | | | | | ○ | ○ | | | | | | | | | | | | |
| | インターメディアエット・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) | 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 | | | | | | | | | | | |
| 1 | | 生物学実験または地学実験から1科目 | 各1 | 選択必修 | | | ○ | | | | | | | | | | | | | | |
| 4 | | 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 | | | | | | | | | | |
| | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | | | | | | | | | | | | | | |
| 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 I A | 2 | | | | ② | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | 物理化学 I B | 2 | | | | | ② | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | 物理化学 II A | 2 | | | | | | ② | | | | | | | | | | | | | |
| | | | 物理化学 II B | 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 | 43 | 15 以上 | 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「先端理科学科目」から1科目2単位 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | 18 以下 | 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 | | | | | | | | | | | | | | ○ | | | | | | | | |
| 計算法学・同演習 | 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) | | | | | | | | | | | | | | | | | | ○ | | | | | |
| 化学実験 | 10 | 18 | 卒業研究 | 必修 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 卒業研究 | 8 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 理学部他プログラムで開講される専門基礎科目及び専門科目の授業科目 | | | | | 選択 | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | | |
| 専門教育科目 小計 | | 78 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 科目区分を問わない | | 6 | (注4) | | 制限付選択 | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | ○ | | | | |
| 合計 | | 128 | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

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

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

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

- ・自然科学領域以外の「領域科目」
- ・「基礎科目」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20年度化学科卒業生進路状況

(平成21年5月1日現在)

() 内は女子で内数

| 卒業生総数 | 就職者 | | | | | | | | | | | 進学 | その他 | | |
|------------|-------|-------|-------|----------|--------|---------|-------|-------|--------|-------|-------|--------|-------|-------|-----|
| | 一般職 | | | | | | | | | 教職 | | | 進学 | 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 | | | | |
| 69 (14) | 1 (1) | 3 (2) | 2 (1) | 1 (0) | 3 (1) | 2 (0) | 0 (0) | 0 (0) | 12 (5) | 3 (1) | 3 (1) | 52 (7) | 0 (0) | 2 (1) | |

2-3-4 卒業論文発表実績

【1】平成20年度卒業研究生の各研究グループ配属者数

| 研究グループ名 | 卒研究生数 | スタッフ名 |
|------------------------------|-------|------------------|
| 化学専攻分子構造化学講座 構造物理化学研究グループ | 5 | 江幡, 井口, 福原 |
| 固体物性化学研究グループ | 6 | 井上, 速水, 秋田 |
| 錯体化学研究グループ | 5 | 三吉, 水田, 久保 |
| 分析化学研究グループ | 7 | 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 | 5 | 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 | 6 | 安倍, 小島, 平賀, 高木 |
| 集積化学研究グループ | 4 | 田林, 岡田, 勝本 |
| 量子化学研究グループ | 3 | 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 | 6 | 中田, 藤原(好), 藤原(昌) |
| 生物化学研究グループ | 6 | 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 | 1 | 齋藤 |
| 放射線反応化学研究グループ | 2 | 中島 |
| 計 | 72 | |

【2】平成20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)

- 編田 宏一「膜イオンチャネルタンパク質の NMR 構造解析」(分子生物物理学)
- 有村 淳也「リンの特性を活かした反応の開発」(反応有機化学)
- 生田 総司「東広島市の環境放射能の変動」(放射線反応化学)
- 石橋 正浩「ペリレンビスイミドを一つ有するトリス(フェニルイソオキサゾイル)ベンゼン誘導体の合成研究」(構造有機化学)
- 石部 徹「二つのイリド配位子を有する高配位ケイ素化合物の合成」(有機典型元素化学)
- 泉 真里「2光子励起レーザー誘起蛍光法を用いる水素原子の検出」(反応物理化学)
- 岩田 雄樹「植物由来成分をリードとするウニ胚繊毛除去物質の構造活性相関」(生物化学)
- 上村 将史「微小重力環境下における2相液体球界面の形状観測とエネルギー計算」(物理環境化学)
- 後河内 将士「シス配置に孤立電子対が固定されたジホスフィンの単離と2座配位子としての機能」(錯体化学)
- 内田 淳也「イオンシミュレーションによる安定軌道の探索とイオン-分子反応装置の開発」(反応物理化学)
- 岡本 拓也「QM/MM-MD法によるL-アスコルビン酸の水溶液中構造についての理論化学的研究」(量子化学)
- 折見 健一「 $O(^1D) + OCS$ 反応で生成する振動励起 SO ラジカルの検出」(反応物理化学)
- 鹿島 健児「光 BZ 反応系の空間的な同調現象」(物理環境化学)
- 仮屋 和貴「大環状フェロセノホスフィントリマーの合成法の開発」(錯体化学)
- 川上 竜司「強誘電性金属錯体液晶の創製」(固体物性化学)
- 川中 伴弘「アンフォテリック性を有するメタラホスフィノボランモノマーの合成と反応性の検討」(錯体化学)
- 川原 那津子「ポリアクリルアミドゲル中における金コロイドの動的挙動の顕微測定」(分析化学)
- 河村 亮「キラル配位子を含む室温強磁性を示すナノ錯体の合成と物性」(固体物性化学)
- 吉川 竜一「レーザー蒸発-真空紫外イオン化法による、不揮発性分子のための新規質量分析法の開発」(構造有機化学)
- 黒崎 章裕「超原子価酸素化合物(9-O-3)合成の試み」(有機典型元素化学)
- 河野 七瀬「振動励起 OH と CO の衝突素過程の速度論的研究」(反応物理化学)
- 高路 愉向「Zr-Pd 二核錯体を触媒とした $Ph_2P(O)CH=CH_2$ への $Ph_2P(O)H$ のヒドロホスフィニレーション反応」(錯体化学)
- 河野 陽「膜貫通ペプチド, Melittin の膜内ダイナミクス-アセチル化修飾によるゆらぎの速度論的考察-」(生物化学)
- 國分 聡「超音速ジェットレーザー分光と量子化学計算による Dibenzo-24-crown-8-ether のコンフォメーションに関する研究」(構造物理化学)
- 小坂 有史「キラルアミン類触媒を用いた Michael 反応の検討」(反応有機化学)

- 坂井 智子「一重項 2,2-ジアルコキシ-1,3-ビラジカルの反応挙動に及ぼす置換基効果」(反応有機化学)
- 貞廣 達也「包接空間を2つもつカリックス[4]アレーン自己集合錯体の合成研究」(構造有機化学)
- 佐藤 翔矢「長鎖を有する金属錯体の動的現象」(固体物性化学)
- 三宝 雅子「強磁場による重力制御環境がカイワレダイコンの生長に及ぼす影響について」(物理環境化学)
- 下田 直嗣「テトラキスカリックス[5]アレーンとポルフィリンを含むダンベル型フラーレンのホスト-ゲスト相互作用による超分子ポリマーの合成研究」(構造有機化学)
- 庄司 礼絵「レプチンはアルブミンと複合体を形成する一肥満のメカニズムの解明に向けて」(生物化学)
- 神野 弘「平面型ロジウム錯体におけるヘキサフェニルカルボジホスホラン配位子のオルトメタル化の制御」(錯体化学)
- 住田 基樹「ヒト由来 DNA 修復酵素 SMUG1 の X 線構造解析」(分子生物物理学)
- 竹内 晴留香「磁場下の微小動空間を利用した固体薄膜の作成」(物理環境化学)
- 玉光 弘典「光の三原色で発光するシリコンナノ結晶における Si/SiO₂ コアシェル構造の考察」(光機能化学)
- 田村 大志「局在化 1,3-ビラジカルを基本骨格とするテトララジカル誘導体のスピン整列」(反応有機化学)
- 丁田 充「アセトアルデヒドクラスターの酸素内殻励起スペクトルと光誘起反応過程」(集積化学)
- 寺島 妙美「イオン同時計測法による内殻励起パーフルオロシクロブタンの解離」(集積化学)
- 土手 遥「集積型鉄錯体の混晶化とスピン状態」(放射線反応化学)
- 豊田 咲「プレゴン還元酵素の立体選択性は蛋白質複合体が決定する」(生物化学)
- 中村 孝「オキサアルキルグリコールエーテルの特異な熱物性と分子構造の相関」(構造物理化学)
- 中村 嘉宏「3 位水酸基を保護した 1,3,5-トリオールのリパーゼによる不斉非対称エステル化反応に関する研究」(反応有機化学)
- 平山 顕大「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鉛の定量」(分析化学)
- 福圓 真一「チオキサンテン骨格を有するアレン化合物の酸化による安定な三重項カルベンの合成の試み」(有機典型元素化学)
- 船守 宏和「2 次元ペルブスカイト型化合物の合成とマルチフェロイック物性」(固体物性化学)
- 豊東 葵「 π 共役系トリスニトロキシドラジカルを架橋配位子とする遷移金属錯体の構造と磁気的性質」(固体物性化学)
- 前田 倫「低温ガスマトリクス中におけるトリメチレンメタン(TMM)誘導体の光反応」(反応有機化学)
- 松島 陵子「赤外光解離分光による(N₂O)_n⁺クラスターのイオンコア構造の決定」(構造物理化学)
- 松田 康彦「結晶構造解析に向けた胃がん遺伝子産出タンパク質 RegIV の調製法の確立」(分子生物物理学)

- 宮川 峻「動脈硬化関連受容体タンパク質 Lox-1 の大量精製法の確立」(分子生物物理学)
- 村上 舞「自律運動系の界面化学制御」(物理環境化学)
- 森崎 宏「(ジヒドロシリル) (ジメシチルボリル) ベンゼンの合成と反応」(有機典型元素化学)
- 八坂 栄次「液液界面に吸着したマンガン(III)ポルフィリン錯体の in situ 顕微吸光光度測定」(分析化学)
- 保田 浩孝「2つの van Koten 型配位子を有する超原子価 5 配位、及び 6 配位炭素化合物の合成の検討」(有機典型元素化学)
- 山本 圭介「鉄鋼中のアンチモンとビスマス同時直接定量のための Drop-in 加熱気化導入-ICP 発光分析」(分析化学)
- 山本 光恵「蛍光ラベル法による高分子鎖近傍の局所的溶媒環境測定」(集積化学)
- 山本 良彦「質量分析法によるリパーゼの加水分解機構の解析」(生物化学)
- 吉崎 北斗「長鎖アルキル鎖を有するコバルト(II)錯体の希釈効果」(固体物性化学)
- 吉田 優也「超音速ジェット中に生成するカリックス[4]アレーン-希ガスクラスターの包接構造に対する再考察」(構造物理化学)
- 渡辺 翔太「液液界面に生成したリン脂質単分子膜に対するアミロイドβの吸着挙動の in situ 顕微蛍光測定」(分析化学)
- 加納 明日香「ビピリジンを配位子にもつカリックス[4]レゾルシンアレーンキャビタントの金属配位によって誘起される自己集合カプセルの合成研究」(構造有機化学)
- 山下 寛之「銀ナノ粒子生成反応に対する磁場の影響」(物理環境化学)
- 小川 公嗣「逆ミセル反応場におけるルミノール化学発光に対する金ナノ粒子の影響」(分析化学)
- 河本 将和「金基板上の単分子膜の偏光子回転方式による偏光変調赤外反射吸収測定」(量子化学)
- 小西 翔大「シリカ基板上の色素単分子膜の作製と分光学的研究」(量子化学)
- 亀井 信太郎「エノン類還元酵素の構造および機能解明」(生物化学)
- 千田 祐輔「氷の光刺激脱離反応に関する理論的研究」(反応物理化学)
- 廣口 典輝「蛋白質のリガンド依存的分子形態変化解析」(分子生物物理学)

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

| | |
|-------|----------------------|
| 井上 克也 | (平成20年度化学科自己点検・評価委員) |
| 秋田 素子 | (化学専攻分子構造化学講座) |
| 高木 隆吉 | (化学専攻分子反応化学講座) |
| 高橋 修 | (化学専攻分子反応化学講座) |