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２１年度

（２００９年度）

平成２２年８月

目　次

はじめに 1

１．化　学　専　攻 2

１－１　専攻の理念と目標 2
１－２　専攻の組織と運営 2
１－２－１　教職員 5
１－２－２　教職員の異動 6
１－３　専攻の大学院教育 7
１－３－１　大学院教育の目標とアドミッション・ポリシー 7
１－３－２　大学院教育の成果とその検証 8
１－３－３　大学院生の国内学会発表実績 12
１－３－４　大学院生の国際学会発表実績 12
１－３－５　修士論文発表実績 13
１－３－６　博士学位 14
１－３－７　ＴＡの実績 15
１－３－８　大学院教育の国際化 15
１－４　専攻の研究活動 16
１－４－１　研究活動の概要 16
１－４－２　研究グループ別の研究活動の概要，発表論文，講演等 22
分子構造化学講座 22
構造物理化学研究グループ 22
固体物性化学研究グループ 26
錯体化学研究グループ 30
分析化学研究グループ 33
構造有機化学研究グループ 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 48
反応有機化学研究グループ 54
集積化学研究グループ 59
量子化学研究グループ 65
１－４－３　各種研究員と外国人留学生の受け入れ状況 70
１－４－４　研究助成金の受け入れ状況 71
１－４－５　学会ならびに社会での活動 72

１－５　その他特記事項 79
１－５－１　量子生命科学プロジェクト研究センター 79
2. 化　学　科 81
２－１　学科の理念と目標 81
２－２　学科の組織 82
２－３　学科の学士課程教育 84
２－３－１　アドミッション・ポリシーとその目標 84
２－３－２　学士課程教育の理念と達成のための具体策 84
２－３－３　学士課程教育の成果とその検証 85
２－３－４　卒業論文発表実績 95
２－４　その他特記事項 98
２－４－１　学生の表彰 98
報告書作成ワーキンググループ 99

はじめに

平成 21 年度化学専攻長
山本陽介

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きました。本年度の報告書は，第一期中期目標・中期計画のとりまとめ年度の報告書ということになります。すでに，平成 22 年度から始まっている第二期中期目標・中期計画への発展の礎にしたいと考えております。

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ました。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21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，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２１年度	化学専攻長	山本　陽介
	化学副専攻長	安倍　学
	化学専攻長補佐	高口　博志

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２１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

エックス線障害防止委員	◎ 水田　河内　岡田 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	田林　山本
人事交流委員会	山本
教務委員	楯
評価委員	井上＊＊ 田林＊
安全衛生委員	◎●安倍
広報委員	岡本＊
大学院委員	田林　山本
入学者選抜方法検討委員会	小島＊
エックス線障害防止委員	水田
地区防災対策委員	山本
教育交流委員	河内

◎は委員長　　●全学委員
＊は　任期２年（H21 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	小島　聡志	平成 21 年 4 月 1 日～
保健管理センター運営委員会	塚原　聡	平成 21 年 4 月 1 日～
学術戦略会議	江幡　孝之	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～
高等教育研究開発センター運営委員会	山崎　勝義	平成 21 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	安倍　学	平成 21 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～
男女共同参画推進委員会	相田　美砂子	平成 19 年 5 月 21 日～
副理事（男女共同参画担当）	相田　美砂子	平成 19 年 7 月 15 日～ 平成 21 年 12 月 31 日
若手研究人材養成委員会	江幡　孝之	平成 21 年 7 月 15 日～
若手研究人材養成センター副センター長	相田美砂子	平成 21 年 7 月 15 日～
量子生命科学プロジェクト研究センター長	相田美砂子	平成 15 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～
競争的資金獲得戦略室室長	相田美砂子	平成 22 年 1 月 1 日～

１－２－１　教職員

平成 22 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
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	水田	勉
助教	池田	俊明
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	高口	博志
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

契約一般職員	古寺	千鶴子
契約一般職員	加藤	道子
契約一般職員	中本	久美子

平成２１年度の非常勤講師

福山　透　　（東京大学大学院薬学系研究科/教授）
　授業科目名：有機合成化学特論
　担当：有機典型元素化学グループ
梶井　克純　　（首都大学東京/教授）
　授業科目名：大気環境科学
　担当：反応物理化学グループ
大塩　寛紀　　（筑波大学数理物質科学研究科／教授）
　授業科目名：無機物性化学特論
　担当：固体物性化学グループ
河合　壯　　（奈良先端科学技術大学院大学　物質創成科学研究科／教授）
　授業科目名：分子フォトニクス特論
　担当：構造有機化学グループ
江原　正博　　（自然科学研究機構　計算科学研究センター/教授）
　授業科目名：励起状態理論の基礎と応用
　担当：量子化学グループ

１－２－２　教職員の異動

平成２２年
　3 月 31 日　田林　清彦　　（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２１年度化学専攻在籍学生数

（平成 21 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 21 年度	40　(8)　{3}	4
平成 20 年度	34　(3)　[1]	8　(1)　[2]　{1}
平成 19 年度	1	5
平成 18 年度		1
平成 17 年度	1	1　〈1〉
平成 16 年度以前		1
合計	76　(11)　[1]　{3}	20　(1)　[2]　{1}　〈1〉

（　）内は女子で内数
〔　〕内は国費留学生数で内数
｛　｝内は私費留学生数で内数
〈　〉内は社会人学生数で内数

・チューター

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

	博士課程前期	博士課程後期
平成 21 年度生	安倍・高口	灰野
平成 20 年度生	相田・水田	岡田
平成 19 年度生	河内	灰野
平成 18 年度生	岡田	小島
平成 17 年度生	灰野	三吉

・ **平成２１年度化学専攻授業科目履修表**

授業科目		博士課程前期								担当教員
		１年次				２年次				
		1		2		3		4		
		単位	時間	単位	時間	単位	時間	単位	時間	
必修	物理化学概論	2	2							田林，江幡
	無機化学概論	2	2							井上，塚原
	有機化学概論	2	2							灰野
	化学特別研究	2	6	2	6	2	6	2	6	各教員
選択	現代英語			2	2					小島
	構造物理化学Ⅰ	2	2							井口
	構造物理化学Ⅱ			2	2					開講しない
	固体物性化学Ⅰ	2	2							開講しない
	固体物性化学Ⅱ			2	2					開講しない
	錯体化学Ⅰ	2	2							水田
	錯体化学Ⅱ			2	2					水田
	分析化学Ⅰ	2	2							藤原(照)，塚原
	分析化学Ⅱ			2	2					藤原(照)，塚原
	構造有機化学Ⅰ	2	2							開講しない
	構造有機化学Ⅱ			2	2					開講しない
	光機能化学			2	2					開講しない
	放射線反応化学	2	2							中島(自然科学研究支援開発センター)
	量子化学			2	2					相田，石橋
	集積化学	2	2							開講しない
	反応物理化学Ⅰ	2	2							山﨑，高口
	反応物理化学Ⅱ			2	2					山﨑，高口
	反応有機化学Ⅰ	2	2							小島
	反応有機化学Ⅱ			2	2					安倍
	有機典型元素化学Ⅰ	2	2							開講しない
	有機典型元素化学Ⅱ			2	2					開講しない
	計算情報化学	2	2							松原、相田
	計算化学演習			2						松原、相田
	物質科学特論			2	2					開講しない
	量子情報科学	2	2							開講しない
	計算機活用特論	2								開講しない
	計算機活用演習	2								開講しない
	構造物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	江幡，井口，福原
	固体物性化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	井上，速水，秋田
	錯体化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	水田，久保
	分析化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	藤原(照)，塚原，岡本
	構造有機化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	灰野
	量子化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	相田，石橋
	反応物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	山﨑，高口，高橋
	反応有機化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	安倍，小島，平賀，高木
	有機典型元素化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	山本，河内
	集積化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	田林，岡田，勝本
	光機能化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	齋藤(自然科学研究支援開発センター)
	放射線反応化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	中島(自然科学研究支援開発センター)
	有機化学系合同セミナー	1	2			1	2			安倍
	特別講義	無機物性化学特論（１単位，後期集中）								大塩寛紀(筑波大学)
		分子フォトニクス特論（１単位，後期集中）								河合壯(奈良先端科学技術大学院大学)
		励起状態理論の基礎と応用（１単位，後期集中）								江原正博(自然科学研究機構)

・平成２１年度化学専攻開講授業科目

	担当教員	授業のキーワード
現代英語	小島	英語，ヒアリング，リスニング，熟語
構造物理化学Ⅰ	井口	群論，光吸収，発光・散乱 Maxwell 方程式，時間を含む摂動論
錯体化学Ⅰ	水田	有機金属化学，有機合成への応用，常磁気性錯体，高酸化数錯体，高配位錯体，生物有機金属化学
錯体化学Ⅱ	水田	有機金属化学，有機合成への応用，触媒反応
分析化学Ⅰ	藤原（照），塚原	水溶液，ミセル溶液，非水溶媒，ソルバトクロミズム
分析化学Ⅱ	藤原（照），塚原	溶液内反応，溶媒和，溶媒効果，表面･界面，蛍光分光分析法
放射線反応化学	中島	放射線，放射線利用
量子化学	相田，石橋	量子力学，量子化学，分子軌道法，分光法
反応物理化学Ⅰ	山﨑，高口	微視的可逆性，詳細釣り合いの原理，RRKM 理論，遷移状態理論
反応物理化学Ⅱ	山﨑，高口	反応速度論，化学反応動力学
反応有機化学Ⅰ	小島	立体選択性，不斉合成反応
反応有機化学Ⅱ	安倍	有機反応機構，中間体の化学，有機光科学，励起状態有機分子の化学，有機合成
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
物理化学概論	田林，江幡	反応速度論，化学反応論，攝動論，変分法
無機化学概論	井上，塚原	電気化学，酸化還元，電気泳動，固体化学，無機固体の構造と物性
有機化学概論	灰野	構造有機化学，反応有機化学，有機合成

・各研究グループの在籍学生数

（平成 21 年　10 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	4	1	1	0	0	0	0
固体物性化学研究グループ	6	4	0	0	1	0	0
錯体化学研究グループ	3	3	0	0	0	0	0
分析化学研究グループ	5	2	0	1	0	0	1
構造有機化学研究グループ	1	4	0	0	0	0	0
光機能化学研究グループ	1	2	0	1	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	3	0	0	0	1	0	0
有機典型元素化学研究グループ	6	8	1	1	1	0	0
反応有機化学研究グループ	5	6	0	1	0	0	0
集積化学研究グループ	3	2	1	2	0	0	0
量子化学研究グループ	2	4	1	2	2	1	1
放射線反応化学研究グループ	1	0	0	0	0	0	0
計	40	36	4	8	5	1	2

・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	32(2)	24(2)	2(0)	1(0)	27(2)	1(0)	0	1(0)	3(0)	0	1(0)
後期修了*	3(0)	1(0)	0	0	1(0)	1(0)	0	1(0)	－	1(0)	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)	９７
博士課程後期(2)	２７
博士課程前期・後期共(3)	２

(2009(H21)年度の発表について記載：2009(H21)年4月から2010(H22)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)	１７
博士課程後期(2)	１３
博士課程前期・後期共(3)	０

(2009(H21)年度の発表について記載：2009(H21)年4月から2010(H22)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

赤瀬　大	水クラスターの水素結合パターンに関する理論化学的研究	量子化学
荒川　美紀	超臨界流体中で創製した金ナノ構造体における SERS 効果の検討	光機能化学
浦上　大輔	分子間相互作用に基づいた鉄（Ⅲ）錯体の光誘起スピン転移現象	固体化学
岡本　睦功	超臨界流体中での強光子場反応で創製した金ナノ構造体の構造解析と構造制御	光機能化学
角井　隆功	１６π骨格を有するアルキルポルフィリンの合成と性質	有機典型元素化学
吉川　俊郎	新規な環状４座リン配位子合成のためのリン架橋［1.1］フェロセノファンに対するベンジル型置換基導入法の検討	錯体化学
國西　剛基	プロリン骨格を有する新規不斉有機触媒の開発と不斉有機触媒能に関する研究	反応有機化学
久保崎　範行	隣接基間相互作用が Poly(*N*-isopropylacrylamide)の感熱応答性に与える影響	集積科学
小島　由寛	発光機能を有する強誘電性金属錯体液晶の創製	固体化学
齋藤　博史	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周辺修飾による分子集積構造の制御	構造有機化学
坂田　修一	柔軟な分子および分子クラスターの構造変化に関する理論化学的研究	量子化学
指原　慶彰	2 位に不斉を有するフラン環の立体選択的構築に関する研究	反応有機化学
島田　淳平	新規異核二座ルイス酸としての σ-(フルオロシリル)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	有機典型元素化学
村主　拓弥	新規 pincer 型三座配位子を用いた遷移金属錯体の合成とアルカンの脱水素化触媒への応用	有機典型元素化学
諏澤　宏	新規三座配位子を用いた超原子価 15 族元素化合物の合成と異性化	有機典型元素化学
園尾　将人	安定ポリ炭化水素ラジカルの合成と物性	固体化学
高木　一人	ビス（ホスフィンイミド）鉄錯体をメタラキレート配位子として用いた鉄-ロジウム環状二核錯体の合成、構造及び反応性	錯体化学
髙橋　秀行	逆ミセル界面反応場におけるルミノール化学発光（CL）への媒質効果と微量金属の FI-CL 定量法への応用	分析化学
田福　伸次	[2]カテナンと二級アンモニウム塩からなる擬ロタキサンの閉環メタセシスを鍵反応とする新規[5]カテナンの合成	構造有機化学
土居　英男	新しいモンテカルロ法の開発と水クラスターへの適応	量子化学
長江　沙織	TMP 塩基によるホウ素置換ベンゼンのオルトメタル化反応の開発と応用	有機典型元素化学
中村　岳史	局在化1,3-ジラジカルを基本骨格とするテトララジカルのスピン整列	反応有機化学
福崎　裕太	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	有機典型元素化学
本玉　直哉	超音速ジェットレーザー分光を用いたカリックス［４］アレンの包接構造に関する研究	構造物理化学

町田　康士	σ(フルオロシリル)フェニルリチウムを用いた新規 14 族元素低配位化学種および環状化合物の合成・構造・反応	有機典型元素化学
三枝　俊亮	双極子モーメントを用いたタンパク質の粗視化のための研究	量子化学
向井　一晃	液液界面に形成したリン脂質単分子膜の相転移挙動の *in situ* 顕微蛍光測定	分析化学
村上　哲哉	鉄－ホスフィンイミド錯体の求核性を鍵とした有機不飽和分子の取り込み反応－環化付加反応とリン上でのメタセシス反応－	錯体化学
矢野　倫之	1,8 位にメトキシ基を有するアクリジニウム骨格を用いた新規超原子価化合物の合成	有機典型元素化学
薮野　洋平	Paterno-Buechi 反応の位置および立体選択性に対する水酸基の効果に関する研究	反応有機化学
山本　幸明	グラブス触媒を用いた分子内[3+2]型環化付加反応による環状化合物の合成研究	反応有機化学
渡邉　亮英	ビスポルフィリンクレフトの分子認識を駆動力とした超分子集合体の合成	構造有機化学

１－３－６　博士学位

授与年月日を〔　〕内に記す。

東川　大志　　〔平成 22 年 3 月 23 日〕（甲）
Studies on Dzyaloshinsky-Moriya interactions and crystal space groups of octacyanometalate based magnets
（オクタシアノ金属イオンを含む磁性体におけるジアロシンスキー—モリヤ相互作用と結晶空間群に関する研究）
主査：井上　克也　教授
副査：中島　覚　教授，山﨑　勝義　教授，秋光　純　教授（青山学院大学 理工学研究科），岸根　順一郎　准教授（九州工業大学 工学院）

渡邊　信嗣　　〔平成 22 年 3 月 23 日〕（甲）
Vibrational Energy Transfer of $O_2(X^3\Sigma_g^-)$ by Collisions with Nonpolar Molecules
（$O_2(X^3\Sigma_g^-)$ の非極性分子との衝突による振動エネルギー移動）
主査：山﨑　勝義　教授
副査：相田　美砂子　教授，江幡　孝之　教授，田林　清彦　教授

山本　和弘　　〔平成 22 年 3 月 23 日〕（乙）
Study on Ethylene Polymerization Using Catalysts Supported on Solid Activators
（助触媒機能を担体に有する触媒を用いたエチレン重合の研究）
主査：小島　聡志　准教授
副査：安倍　学　教授，灰野　岳晴　教授，山本　陽介　教授

中辻　惇也　　〔平成 22 年 3 月 23 日〕（甲）
Development of Novel Tridentate Ligands Bearing the Carbonyl Oxygen Group as a Donor and Their Application to Synthesis of Hypervalent Compounds of Second Row Elements
（カルボニル酸素を配位原子とする新規三座配位子の開発とその第２周期超原子価化合物合成への応用）

主査：山本　陽介　教授
副査：安倍　学　教授，灰野　岳晴　教授，小島　聡志　准教授

１－３－７　ＴＡの実績

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

平成 21 年度のＴＡ

氏　　名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
日下　　良二	化学実験	構造物理化学	D1
堺　　真通	化学実験	集積化学	D2
下赤　　卓史	化学実験	集積化学	D2
光岡　　広樹	化学実験	集積化学	D1
渡辺　　信嗣	化学実験	反応物理化学	D3
Triana　Widianti	化学実験	反応有機化学	D2
平野　　雄一	化学実験	有機典型元素化学	D2
鈴川　　直幸	化学実験	有機典型元素化学	D1
安藤　　広司	化学実験	量子化学	D1
宮本　　秀範	化学実験・情報活用演習	量子化学	D2
坂宗　　和明	化学実験・情報活用演習	量子化学	D4
山田　　朋範	化学実験	量子化学	D3
前田　　俊樹	化学実験	量子化学	D3
前田　　晃宏	化学実験	量子化学	D2

１－３－８　大学院教育の国際化

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

１－４　専攻の研究活動

１－４－１　研究活動の概要

・講演会開催実績

日時：2009 年 5 月 28 日（金）
講師：Klaus Muller Dethlefs 教授(マンチェスター大学)
演題：Zeke Rydberg molecules in a crowd: A strongly-coupled ultra-cold Rydberg plasma
担当：構造物理化学グループ

日時：2009 年 6 月 26 日（金）13:30-
講師：福山 透 教授（東京大学）
演題：天然物全合成と反応開発
担当：有機典型元素化学グループ

日時：2009 年 10 月 8 日（木）13:30-
講師：河合 壯 教授（奈良先端科学技術大学院大学）
演題：高機能フォトクロミック分子材料の開発
担当：構造有機化学グループ

日時：2009 年 10 月 13 日（火）10:30-
講師：Klaus Hermann 教授（Fritz Haber Institute）
演題：Ab Initio Cluster Studies for X-ray Absorption Spectroscopy: from molecules to surfaces and bulk
担当：反応物理化学グループ

日時：2009 年 11 月 6 日（金）15:00-
講師：Pavel Lhotak 教授（プラハ化学工科大学）
演題：New Perspectives in Calixarene Chemistry (From fullerene recognition to novel thiacalixarenes)
担当：構造有機化学グループ

日時：2009 年 11 月 10 日（火）16:00-
講師：梶井 克純 教授（首都大学東京）
演題：都市大気の現状と将来
担当：反応物理化学研究グループ

日時：2009 年 11 月 12 日（木）11:00-
講師：JV Yakhmi 教授（Bhabha Atomic Research Center）
演題：Functions and devices from Prussian-blue related molecule-based magnets
担当：固体物性化学グループ

日時：2009 年 12 月 8 日（火）15:30-

講師：硤合 憲三 教授 （東京大学）
演題：不斉自己触媒反応とホモキラリティーの起源
担当：有機典型元素化学グループ・固体物性化学グループ

日時：2009 年 12 月 8 日（火）16:30-
講師：Janine Cossy 教授 （ESPCI, パリ高等物理化学学校）
演題：Efficient access to heterocyclic compounds using metals
担当：有機典型元素化学グループ・固体物性化学グループ

日時：2009 年 12 月 9 日（水）15:00-
講師：大塩 寛紀 教授（筑波大学）
演題：分子構造に基づく特異な磁性
担当：固体物性化学グループ

日時：2009 年 12 月 15 日（火）14:35-
講師：江原 正博 教授（自然科学研究機構 計算科学研究センター）
演題：理論精密分光と光物性化学
担当：量子化学グループ

日時：2010 年 2 月 1 日（月）15:00-
講師：Franz Renz 教授（ハノーバー大学）
演題：Complexes with physical and chemical induced spin crossover
担当：固体物性化学グループ

・セミナー等開催実績

ChemDraw の活用法セミナー
日時：2009 年 9 月 14 日
場所：中央図書館・ライブラリーホール
担当：安倍 学

第 50 回 中国四国産学連携化学フォーラム
日時：2009 年 4 月 10 日
場所：広島大学
担当：田林 清彦

第８回理学融合教育研究セミナー
日時：2009 年 10 月 9 日
場所：広島大学
担当：江幡 孝之

若手研究人材養成センター 第 1 回企業人材セミナー
日時：2009 年 11 月 13 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

若手研究人材養成センター 第 2 回企業人材セミナー
日時：2009 年 11 月 16 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

若手研究人材養成センター 第 3 回企業人材セミナー
日時：2009 年 11 月 18 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

若手研究人材養成センター 第 4 回企業人材セミナー
日時：2009 年 11 月 27 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

若手研究人材養成センター 第 5 回企業人材セミナー
日時：2009 年 12 月 1 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

若手研究人材養成センター 第 6 回企業人材セミナー
日時：2009 年 12 月 4 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

第 133 回量子生命科学セミナー
日時：2009 年 12 月 11 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

量子情報科学セミナー
日時：2010 年 1 月 18 日
場所：広島大学
担当：相田美砂子

・ **研究論文・招待講演・特許出願等の総数**

化学専攻の教員による研究論文・著書・総説・特許（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	７４
著書	７
総説	５
国際会議	５５
国内学会（招待・依頼・特別講演）	１７
特許出願	０

・受賞実績

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

1992 年度 （平成 4 年度）	化学ソフトウェア学会学会賞	吉田　弘
1993 年度 （平成 5 年度）	第 50 回中国文化賞	菅　隆幸
1994 年度 （平成 6 年度）	日本分析化学会学会賞	熊丸 尚宏
1996 年度 （平成 8 年度）	フンボルト賞	秋葉 欣哉
1997 年度 （平成 9 年度）	日本化学会賞 日本化学会学術賞	秋葉 欣哉 谷本 能文
1998 年度 （平成 10 年度）	第 55 回中国文化賞	秋葉 欣哉
1999 年度 （平成 11 年度）	日本化学会賞	岩田 末廣
1999 年度 （平成 11 年度）	錯体化学研究会研究奨励賞	久保 和幸
2000 年度 （平成 12 年度）	紫綬褒章	秋葉 欣哉
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
2009 年度 （平成 21 年度）	Visiting Lectureship of the Chemistry Research Promotion Center (National Taiwan University)	灰野 岳晴

・ **学生の受賞実績**

高橋秀行　平成 21 年度日本分析化学会中国四国支部分析化学若手セミナー（ポスター賞）
向井一晃　平成 21 年度日本分析化学会中国四国支部分析化学若手セミナー（ポスター賞）
町田康士　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (The Best Student Presentation Award)
村主拓弥　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (The Best Student Presentation Award)
赤瀬 大　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (The Best Student Presentation Award)
河野七瀬　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Student Award)
日下良二　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Student Award)
山田朋範　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Student Award)
平野雄一　第 36 回有機典型元素化学討論会（ポスター賞）
諏沢 宏　第 36 回有機典型元素化学討論会（ポスター賞）
村主拓弥　第 56 回有機金属化学討論会（ポスター賞）
小西翔大　平成 21 年度日本分光学会年次講演会（若手ポスター賞）

・　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２１年度のＲＡ

大学院生氏名	日下　良二	所属研究グループ	構造物理化学
学年	Ｄ１	指導教員	江幡　孝之 教授
研究プロジェクト名	機能性分子のレーザー分光		

大学院生氏名	前田　晃宏	所属研究グループ	量子化学
学年	Ｄ２	指導教員	石橋　孝章 准教授
研究プロジェクト名	時間分解赤外分光による光触媒反応の研究		

大学院生氏名	Triana Widianti	所属研究グループ	反応有機化学
学年	Ｄ２	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	山田　朋範	所属研究グループ	量子化学
学年	Ｄ３	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	Quasi-classical direct ab initio MD 法に基づいた、分子の平均構造と振動スペクトルの予測		

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，機能性分子や分子クラスターの構造，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包接化合物，生体関連分子，比較的簡単な多原子分子のクラスターである。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２１年度の研究活動は次のとおりである。

代表的機能性分子であるカリックスアレンやクラウンエーテルと種々のゲスト分子との包接化合物を超音速分子線中に生成し，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。これらの研究から，カリックスアレンでは，水１分子が入った世界最小のカップ形成やアルゴンクラスターの選択的内包クラスター形成を見いだした．一方，クラウンエーテルでは水分子をゲストとして包接する際特定のコンフォマーが優先的に包接することを見いだした。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。さらに，不揮発性分子の新規質量分析法として，レーザー蒸発／真空紫外イオン化質量分析装置の開発を行っている。

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，一酸化二窒素クラスターイオン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を明らかにした。また，有機化学反応におけるハロゲン化物イオン—ハロゲン化メチル求核置換反応に対する微視的溶媒効果を明らかにする目的で，$I^-(CH_3I)(H_2O)_n$ クラスターイオンの赤外スペクトルを観測し，その反応曲面での安定構造に関する情報を得た。

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. Inokuchi, Y. Kobayashi, A. Muraoka, T. Nagata, and T. Ebata, (2009) Structures of water-CO_2 and methanol-CO_2 cluster ions: $[H_2O\bullet(CO_2)_n]^+$ and $[CH_3OH\bullet(CO_2)_n]_+$ (n = 1–7), *J. Chem. Phys*. **130**, 154304-154315

Y. Inokuchi, R. Matsushima, Y. Kobayashi, and T. Ebata, (2009) Ion core structure in $(N_2O)_n^+$(n=2–8) studied by infrared photodissociation spectroscopy, *J. Chem. Phys*. **131**, 044325-044330

Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi and Takayuki Ebata, (2009) Water-mediated conformer optimization in benzo-18-crown-6-ether/water system" , *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11**, 9132–9140

A. Muraoka, Y. Inokuchi, N. I. Hammer, J. Shin, M.A. Johnson, T. Nagata (2009) Structural evolution of the $[(CO_2)_n(H_2O)]^-$ cluster anions: Quantifying the effect of hydration on the excess charge accommodation motif", *J. Phys. Chem. A*, **113**, 8942-8948

○総説

Takayuki Ebata, “Study on the structure and vibrational dynamics of functional molecules and molecular clusters by double resonance vibrational spectroscopy”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **82**, 127-151 (2009)

○国際学会での講演

T. Ebata, “Elucidation of encapsulation structure of functional molecules in supersonic jets.”, Third symposium “Molecular Science for Supra Functional Systems” (June 3-5, 2009, Tokyo)(依頼講演)

T. Ebata, “Laser spectroscopic studies on functional molecules”, 2009 Gordon research conference on electronic spectroscopy and dynamics (July 19-24, 2009, Colby College, USA) (招待講演)

T. Ebata, “Elucidation of host-guest interaction of calixarene in supersonic jets” 4th Russian-Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 16-19, 2009, Orenburg state university, Russia) (招待講演)

T. Ebata, “Laser spectroscopic study on encapsulation structure of functional molecules in supersonic jets” , 69th Okazaki Conference on ”New frontier in quantum chemical dynamics” (Feb.21-23, 2010, Okazaki, Jpn.) (招待講演)

T. Ebata, “Laser spectroscopic study on encapsulation structure of functional molecules in supersonic jets” , 239th ACS National meeting & Exposition -Division of Physical Chemistry-(March 21-25, 2010, San Francisco, USA) (招待講演)

○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，「カリックス[4]アレン(C4A)水分子クラスターの構造 － 水分子は C4A に内包するか外接するか －」（ポスター）第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）

井口佳哉，「３原子分子クラスターイオン内における分子間共有結合の形成とその電子・幾何構造の研究」(ポスター)第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）

福原幸一，「オキサアルカノール及びオキサアルカン酸の融解挙動」（一般講演）第 45 回熱測定討論会（2009 年 9 月，八王子）

○学生の学会発表

「$(N_2O)_n^+$クラスターイオンのイオンコア構造と水分子付加がおよぼす構造変化)（口頭）第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）○松島陵子，井口佳哉，小林悠介，江幡孝之

「ベンゾ−１８−クラウン−６−エーテルの水分子包接におけるコンフォマー選択性」（口頭）第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）○日下良二，井口佳哉，江幡孝之

「カリックス[4]アレン-Ar クラスターの包接構造」（口頭）第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）○本玉直哉，井口佳哉，江幡孝之，灰野岳晴，Sotiris S. Xantheas

「レーザー蒸発／真空紫外イオン化をもちいた不揮発性分子の質量分析法の開発」（ポスター）第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）○吉川竜一，江幡孝之，井口佳哉，三枝洋之

「赤外光解離分光法による $I^-(CH_3I)_m(H_2O)_n$ クラスターの構造に関する研究」（ポスター）第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）○土井啓右，井口佳哉，江幡孝之

「ピコ秒赤外–紫外ポンプ・プローブ法によるベンゼン二量体の振動緩和の研究」(ポスター)第３回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）○片桐勇志，日下良二，井口佳哉，江幡孝

之

"Water-mediated conformer optimization in benzo-18-crown-6-ether/water system", (Oral) The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 12-13, 2009, Hiroshima Jpn.) ○Ryoji, Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata

"Structure of the Calix[4]arene-(H_2O) cluster – The world's smallest cup of water-", (Oral) The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 12-13, 2009, Hiroshima, Jpn.) ○Naoya Hontama, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Claude Dedondor-Lardeux, Christophe Jouvet, Sotiris S. Xantheas

○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)	1	4
博士課程後期(3)	1	1
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：Klaus Muller Dethlefs　教授（マンチェスター大学）"Zeke Rydberg molecules in a crowd: A strongly-coupled ultra-cold Rydberg plasma" 2009 年 5 月 28 日 (Hiroshima University)

○社会活動・学外委員

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委員会委員（2007−）

江幡孝之，日本学術振興会特別研究員等審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査員

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−）

○産学官連携実績

福原幸一，「汎用性の高い有機材料の低融点化・結晶化阻害新技術」，広島大学新技術説明会，(2009 年 5 月，東京)

福原幸一，「有機材料の低融点化・結晶化阻害技術」，広島大学共同研究中間報告会，(2009 年 10 月，大竹)

福原幸一，「汎用性の高い有機材料の低融点化・結晶化阻害新技術」，広島大学リエゾンフェア，(2009 年 11 月，広島)

福原幸一，共同研究「低粘度・低融点新規化合物を応用した潤滑油剤の開発」(2009-)

○ 国際共同研究・国際会議開催実績

国際会議開催

江幡孝之，　4th Russian - Japanese Seminar "Molecular and Biophysical Magnetoscience" (Sept. 16-19, 2009, Orenburg state university, Russia)

〇座長を行った学会・討論会の名称

江幡孝之，4th Russian - Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 16-19, 2009, Orenburg state university, Russia)

井口佳哉, 第 3 回分子科学討論会 2009 名古屋 (2009 年 9 月 21 日—24 日, 名古屋大学, 名古屋)

井口佳哉，”The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium” (Dec. 12-13, 2009, Hiroshima)

〇研究助成の受け入れ状況

江幡孝之，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マー特異性の発見と解明」（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）

井口佳哉，科学研究補助金 基盤研究(B)（2009-2012 年）「イオンクラスター分光による不飽和炭化水素の求核付加・置換反応メカニズムの解明」（代表）

福原幸一，共同研究（2009 年）「低粘度・低融点新規化合物を応用した潤滑油剤の開発」（代表）

〇その他特記事項

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(2009. 4-)

福原幸一，サイエンスカフェ活動

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）

〇研究活動の概要

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：スピンクロスオーバー、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が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。

〇発表原著論文

Kousaka, Yusuke, Ohsumi, Hiroyuki, Komesu, Takashi, Arima, Taka-hisa, Takata, Masaki, Sakai, Soichiro, Akita, Motoko, Inoue, Katsuya, Yokobori, Toshio, Nakao, Yuya, Kaya, Emi, Akimitsu, Jun (2009) Crystallographic Chirality of $CsCuCl_3$ Probed by Resonant Circularly-Polarized Hard X-ray Diffraction, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 123601.

H. Higashikawa, K. Inoue, K.Yu. Maryunina, G. V. Romanenko, A. S. Bogomyakov, O. V. Kuznetsova, E. Yu. Fursova, V. I. Ovcharenko (2009) Structure and magnetic properties of the pentanuclear complex $[Fe_2(CN)_{12}Ni_3(L)_6]$*$27H_2O$, where L is nitronyl nitroxide, Journal of Structural Chemistry, **50**, 1155.

Yoshida, Yusuke, Inoue, Katsuya, Kurmoo, Mohamedally (2009) Consecutive Irreversible Single-Crystal to Single-Crystal and Reversible Single-Crystal to Glass Transformations and Associated Magnetism of the Coordination Polymer, [Mn-II(rac-pnH)(H_2O)Cr-III(CN)(6)]center dot H_2O, *Inorg, Chem*., **48**, 10726-10736.

Urakami, Daisuke, Inoue, Katsuya, Hayami, Shinya (2009) Triphenyl{(E)-4-[4-(phenyldiazenyl)-phenyl]-4H-1,2,4-triazol-1-yl}boron, *Acta Cryst. Sec. E-Stru. Rep*., **65**, O2425.

Bukharov, A. A., Ovchinnikov, A. S., Baranov, N. V., Inoue, K (2009) Magnetic hysteresis in a molecular Ising ferrimagnet: Glauber dynamics approach, *Eur. Phys, J. B.*, **70**, 369-375

Daisuke Urakami, Katsuya Inoue, Shinya Hayami (2009) Dichlorido[1-(8-quinolyliminomethyl)-2-naphtholato]iron(III), *Acta Cryst. Sec. E-Structure Rep. Online*, **65**, 8001046.

Yasuo Yoshida, Tatsuya Kawae, Yuko Hosokoshi, Katsuya Inoue, Nobuya Maeshima, Kouichi Okunishi, Kiyomi Okamoto, Toru Sakai (2009) Magnetic Field versus Temperature Phase Diagram of the Spin-1/2 Alternating-Bond Chain Compound F5PNN, J. *Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 074716.

Ishikawa, Ryuta, Matsumoto, Kouzou, Onishi, Koji, Kubo, Takashi, Fuyuhiro, Akira, Hayami, Shinya, Inoue, Katsuya, Kaizaki, Sumio, Kawata, Satoshi (2009) Magnetic Properties of Iron(II) and Cobalt(II) Complexes of Tetrakis(2-pyridyl)methane. Spin-crossover Behavior in the Cobalt(II) Complex, *Chem Lett.*, **38**, 620-621.

Shinya Hayami, Soushi Miyazaki, Jun Kawamata, Katsuya Inoue (2009) Second-order non-linear optical response in LB films for the metal complexes, *POLYHEDRON*, **28**, 1722-1727.

Prasanna S. Ghalsasi, Katsuya Inoue (2009) Distorted perovskite structured organic-inorganic hybrid compounds for possible multiferroic behavior: [*n*-alkyl](2)$FeCl_4$, *POLYHEDRON*, **28**, 1864-1867.

Shinya Hayami, Yoshihiro Kojima, Daisuke Urakami, Kazuchika Ohta, Katsuya Inoue (2009) Mesophase and magnetic behavior in cobalt(II) and iron(II) compounds, *POLYHEDRON*, **28**, 2053-2057.

Shinya Hayami, Yoshihiro Kojima, Daisuke Urakami, Kazuchika Ohta, Katsuya Inoue (2009) Mesogenic and magnetic behavior in cobalt(II) and iron(II) compounds with long alkyl chains, *MONATSHEFTE FUR CHEMIE*, **140**, 829-838.

Hitoshi Kumagai, Motoko Akita-Tanaka, Satoshi Kawata, Katsuya Inoue, Cameron J. Kepert, Mohamedally Kurmoo (2009) Synthesis, Crystal Structures, and Properties of Molecular Squares Displaying Hydrogen and pi-pi Bonded Networks, *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, **9**, 2734-2741.

Shinya Hayami, Daiske Urakami, Shoya Sato, Yoshihiro Kojima, Katsuya Inoue, Masaaki Ohba (2009) Structures and Dielectric Properties in Thermochromic Nickel(II) Compounds, *Chem. Lett.*, **38**, 490-491.

Kousaka, Y., Nakao, Y., Kishine, J., Akita, M., Inoue, K., Akimitsu, J (2009) Chiral helimagnetism in T1/3NbS2 (T=Cr and Mn), *Nuclear Inst. & Methods Phys. Res. Sec.A-Accelerators Spectrometers Detectors And Associated Equipment*, **600**, 250-253.

Shinya Hayami, Kenji Hiki, Takayoshi Kawahara, Yonezo Maeda, Daisuke Urakami, Katsuya Inoue, Mitsuo Ohama, Satoshi Kawata, and Osamu Sato (2009) Photo-Induced Spin Transition of Iron(III) Compounds with p-p Intermolecular Interactions, *Chem. Eur. J.*, **15**, 3497-3508.

Shigetoh, Keisuke, Onimaru, Takahiro, shida, Akihiro, Akita, Motoko, Inoue, Katsuya, Nishi, Masakazu, Sato, Taku J., Adroja, Devashibhai T., Takabatake, Toshiro (2009) Magnetocrystalline Anisotropy and Crystal Fields in the Weak-Ferromagnet $Ce_4Ni_3Pb_4$, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **78**, 024701.

Yusuke Yoshida, Katsuya Inoue, Natalie Kyritsakas, Mohamedally Kurmoo (2009) Syntheses, structures and magnetic properties of zig-zag chains of transition metals with O--P--O bridges, *Inorg. Chem. Acta.*, **362**, 1428-1434.

Hayami, S; Kojima, Y; Inoue, K (2009) Spin Transition Induced by Mesophase Transition in the Cobalt(II) Compounds with Branched Alkyl Chains, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, **509**, 1051-1058.

Yoshida Y, Inoue K, Kurmoo M (2009) On the Nature of the Reversibility of Hydration-Dehydration on the Crystal Structure and Magnetism of the Ferrimagnet [MnII(enH)(H_2O)][CrIII($CN)_6$]・H_2O, *Inorg. Chem.*, **48**(1), 267-276.

Masaki Mito, Kazuyuki Iriguchi, Hiroyuki Deguchi, Jun-ichiro Kishine, Koichi Kikuchi, Hiroyuki Ohsumi, Yusuke Yoshida and Katsuya Inoue (2009) Giant nonlinear magnetic response in a

molecule-based magnet, *Phys. Rev. B*, **79**, 012406.

○国際会議

Katsuya Inoue, MAGNETS IN WONDERLAND-Magnetic Spin Structure of Chiral Magnets-, 3rd, Russia-Japan Workshop “Spin Chemistry”, Orenburg, Russia, 2009.9.17-18 (招待講演)

Katsuya Inoue, Hiroyuki Higashikawa, Yusuke Yoshida, Hirofumi Honda, Koichi Kikuchi, Junihiro Kishine, Masaki Mito, Iscom 2009, Niseko, 2009.9.12-17(ポスター)

Katsuya Inoue, Synthetic and structural studies for chiral magnets , Hiroshima Workshop “Susteinable Material Science, Hiroshima, 2009.11.13-15 (招待講演)

Katsuya Inoue, Spin dynamics and phase diagram of chiral molecule-based, inorganic magnets, 4th, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, Awaji, 2009.11.15-17 (招待講演)

Hiroyuki Higashikawa, Hirofumi Honda, Daisuke Urakami, Jun-ichiro Kishine, Motoko Akita, Katsuya Inoue, Magnetic Structures and Properties of W(V)-Cu(II) based Chiral Structural Magnets, 4th, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, Awaji, 2009.11.15-17 (ポスター)

○国内学会

井上克也、キラル磁性体の特異物性と磁気構造、早稲田大学グローバル COE プログラム「実践的化学知」教育研究拠点「The Symposium on Chiral Science & Technology: Mesochemistry & Chemical Wisdom」、早稲田、2009.09.24-25. (招待講演)

井上克也、結晶と磁性の Chirality、錯体化学討論会、長崎、2009.9.25-27. (口頭発表)

井上克也、MAGNETS IN WONDERLAND-Structures and Properties of Transparent Chiral Magnets-、東京理科大学講演会、東京、2009.10.29-30. (依頼講演)

秋田素子、ニトロキシドラジカルを架橋配位子とする分子性磁性体の構築、中国四国支部錯体化学研究会、岡山、2009.4.18. (依頼講演)

○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	2
博士課程前期(2)	0	1
博士課程後期(3)	2	1
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、4rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, 組織委員長, 淡路, 2009.11.15-17

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ックス国際共同研究：ロシア・ウラル州立大学、ロシア科学アカデミー・チェルノゴフカ・固体物性研究所、パルス磁場による高速磁化過程研究、2000-

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

井上克也、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、科学研究費補助金萌芽研究、「絶対不斉合成の研究」、(代表者)

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

井上克也、中電財団、「マルチフェロイックス研究」、(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　水田　勉（准教授），久保　和幸（助教）

〇研究活動の概要

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。

2つの金属を内包できるような大環状配位子を用いると，その間内の空間で2つの金属の協同効果により，有用な反応場を構築することができる．この目的のために，２つのリン配位子をフェロセンで２重に架橋したリン架橋[1.1]フェロセノファンを用い，このユニット同士が，ビスフェノールＡをリンカーとして環状に結ばれた大環状フェロセノホスフィンを合成した．この配位子は，3.7×9.7$Å^2$の大きさの広い内包空間を有している．得られた大環状配位子に対する金属の配位様式を明らかにするためにAg(Ⅰ)を用いて錯形成反応を行った. その結果, 期待どおり2つのAgフラグメントが互いに向かい合ってP原子に配位していることが確かめられた. また，2つのAgイオンで挟まれた空間には，溶媒として用いたアセトニトリルが4分子取り込まれていた. 次に, 触媒に多用されているPt錯体との反応を試みた. Pt(Ⅱ)フラグメントとして$PtCl_2$(cod)を用いた反応では，不溶性の沈殿が生成した．そこで，拡散法により配位子と$PtCl_2$(cod)を徐々に反応させると良好な単結晶が得られた. この結晶構造を調べると期待どおり2つの$PtCl_2$フラグメントが環内に取り込まれていた．さらに，Pt(０)錯体として$Pt(PPh_3)_4$や$Pt(PPh_3)_2$(PhC≡CPh)などを用いて大環状配位子との反応を行っても，Pt(L) (L= PPh_3, PhC≡CPh)が2ユニット取り込まれた生成物が得られた．PhC≡CPhが配位したもののX線結晶構造解析の結果, 各々のP-Pキレートの配位平面が互いに傾けるように, 配位子の構造が変化することで, 嵩高いジフェニルアセチレンを含むPtフラグメントでも大環状配位子の空間に収容できることが確かめられた．このことから，今回合成に成功した大環状リン配位子は，フェロセンユニットの嵩高さの割には，その構造を変化させるだけの柔軟性を持っており，様々なサイズの基質を複数結合させることができる反応場であることが判った．.

〇発表原著論文

T. Mizuta, Y. Inami, K. Kubo, K. Miyoshi (2009) Synthesis of Binuclear Complexes Bound in an Enlarged Tetraphosphamacrocycle: Two Diphosphine Metal Units Linked in Front-to-Front Style. *Inorganic Chemistry*, **48**(16), 7534-7536.

T. Mizuta, N. Tanaka, Y. Iwakuni, K. Kubo, K. Miyoshi (2009) Synthesis and Reactivity of Five-membered P(V)-Phosphapalladacycles. *Organometallics*, **28**(9), 2808-2817.

T. Mizuta, C. Miyaji, T. Katayama, J. Ushio, K. Kubo, K. Miyoshi (2009) Bi- and Trinuclear Complexes of Group 4 Metal and Palladium Bridged by $OPPh_2$ Groups: Synthesis and High Catalytic Activities in Double Hydrophosphinylation of 1-Octyne. *Organometallics*, **28**(2), 539-546.

〇総説

K. Miyoshi, T. Mizuta (2009) Synthesis of bi- and trinuclear complexes with Group IV metal and Pd and their catalytic activity of alkyne phosphinylation. *Organometallic News*, (3), 92-97.

久保和幸 (2009) 新しい配位子として期待される 0 価 2 配位炭素化合物. *Bulletin of Japan Society of Coordination Chemistry* **54**, 68-70.

○国内学会

川中伴拡・久保和幸・冨岡正雄・水田 勉・三吉克彦：リン上に種々の置換基を導入した鉄―ホスフィノボラン錯体の合成とP=B二重結合性，第59回錯体化学討論会（2009年9月，長崎）（一般講演）

村上哲哉・久保和幸・馬場敬之・水田 勉・三吉克彦：鉄とホスフィンイミド配位子の協同作用による有機不飽和分子の取り込み反応，第59回錯体化学討論会（2009年9月，長崎）（一般講演）

高路愉向・宮地ちひろ・久保和幸・水田 勉・三吉克彦：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，第59回錯体化学討論会（2009年9月，長崎）（一般講演）

寺本裕一・後河内将士・久保和幸・水田 勉：0価鉄錯体による1,2-diphospha- acenaphtheneの安定なP-P結合切断反応，日本化学会第90春季年会（2010）（2010年3月，大阪）（一般講演）

高木一人・久保和幸・秋本貴志・水田 勉・三吉克彦：リンと窒素からなる環状無機骨格を有する鉄―ロジウム二核錯体の合成と性質，第59回錯体化学討論会（2009年9月，長崎）（ポスター）

吉川俊郎・稲見裕太・青谷朋之・久保和幸・水田 勉・三吉克彦：リン架橋[1.1]フェロセノファンへの様々な置換基の導入法の開発と環状4座リン配位子合成への応用，第59回錯体化学討論会（2009年9月，長崎）（ポスター）

神野 弘・久保和幸・水田 勉・三吉克彦：ヘキサフェニルカルボジホスホランのオルトメタル化に対するロジウム錯体上の支持配位子の影響，第59回錯体化学討論会（2009年9月，長崎）（ポスター）

水田 勉・稲見裕太・久保和幸・三吉克彦：２つのジホスフィン金属ユニットがfront-to-front型で繋がれた大環状P4 二核錯体の合成，第56回有機金属化学討論会（2009年9月，京都）（ポスター）

小澤賢伯・稲見裕太・久保和幸・水田 勉：Front-to-Front型の大環状４座ホスフィン２核白金錯体の合成と水素分子との反応，日本化学会第90春季年会（2010）（2010年3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(1)	0	0
博士課程前期(2)	0	9
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(B) 「多様なメタロホスフィンキレートの合成法の開発と配位子としての機能の解明」　代表　水田　勉

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

○社会活動・学外委員

・学協会役員，委員

水田　勉　錯体化学討論会運営委員（2006 年 10 月－）

・高大連携事業

水田　勉　　広島県立神辺旭高等学校　模擬授業（2009 年 10 月）

水田　勉　　鳥取県立鳥取東高等学校　SSH 自然化学実験　（2009 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　（2009 年 9 月広島大学）

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）

〇研究活動の概要

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。平成 21 年度の研究成果を以下に掲げる。

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

(a) 逆ミセルメディア化学発光(CL)反応とフロー分析法：逆ミセル中でのルミノール CL 反応に対するコバルト(II)，マンガン(II)等の酢酸との錯体や鉄(II)のビピリジン錯体による触媒作用において観測される溶媒効果には，逆ミセルナノ界面場でのこれらの金属錯体の解離過程が深く関与していることを明らかにした。さらに，逆ミセル中でローダミン B－セリウム(IV)系化学発光が起こることを新たに見出し，ローダミン B を用いたイオン会合抽出法と組み合わせることにより，水溶液中のアンチモンを間接定量するフローインジェクション分析法を開発した。

(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 やフルオレセインの CTAC 逆ミセル溶液について，吸収および蛍光スペクトル測定を行って，これらの色素の酸－塩基挙動に対する逆ミセル効果を調べ，逆ミセルのバルク有機相，ナノ界面相及び内水相への色素の分配挙動について考察した。また，これらのスペクトル変化を利用して逆ミセルの CMC を決定し，逆ミセル界面場の安定性に対する界面活性剤と水のモル濃度比及びバルク溶媒組成の影響を明らかにした。

(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) 液液界面に形成したリン脂質単分子膜の動的挙動の in situ 顕微蛍光測定：アルカン／水界面に，様々な組成のリン脂質単分子膜を形成して，温度変化を行いながら，その動的挙動を蛍光顕微鏡で計測した。その結果，リン脂質単分子膜は，温度の下降に伴って相転移を起こし，部分的にゲル化すること，また温度上昇によって，均一な液晶状態になることが判った。その相転移挙動は，アルカンの種類やリン脂質の界面濃度，また組成によって影響されることを明らかにした。

２．電気加熱気化誘導結合プラズマ原子スペクトル分析

(a) ICP 発光分析法や ICP 質量分析法で固体試料を測定する場合，試料の分解，溶解，希釈を行い，溶液試料として装置へ導入するのが常である。しかし，溶液試料は試料調製に長い時間がかかり，さらに実験室環境からの汚染も招きやすい。固体試料を直接測定装置に導入することが可能であれば，煩雑な前処理操作を必要とせず，大幅な時間短縮ができ，実験室環境からの汚染も防ぐことができる。そこで本研究では，まず粒状金属の

場合を想定して，鉄鋼微粉末中の半金属元素の定量を行った。測定装置への供試を容易にするため，鉄が磁石に引き寄せられることに注目した。すなわち磁針の先端に鉄鋼試料を吊し，この針先の試料がタングステン製メタル炉のくぼみの上部に位置するように取り付けて加熱すれば，輻射熱で鉄鋼試料の温度がキュリー温度まで到達して磁性を失い，試料はメタル炉上に落下して熔融する。気化した目的元素をオンラインで ICP へ導入した。この自動装置により，硫黄・セレン・アンチモン・ビスマスを迅速定量した。

(b) 次に，非金属状試料を想定してプラスチック試料を溶液化することなく目的成分である鉛・クロム・ヒ素・アンチモンを直接加熱気化導入する迅速な測定方法を検討した。タングステン製のサンプルキュベットにプラスチックの試料片を入れ，高沸点有機溶媒を添加後，ホットプレート上で数分間加熱して試料を軟化させてサンプルキュベットの表面に密着させた。さらに加熱して軟化に使用した有機溶媒を完全に除去した後，このサンプルキュベットをメタル炉上に重ね合わせて置き，急速に加熱することで目的元素を気化させ，素早くアルゴンキャリヤーガスによりオンラインでプラズマに導入した。

〇発表原著論文

K. Nakada, I. U. Mohammadzai, S. Tsukahara and T. Fujiwara (2009) Adsorption Behavior of the Cetyltrimethylammonium Chloride Reverse Micelles on Porous Silica Gels. *Anal. Sci.*, *25*, 201-206.

S. Inoshita, S. Tsukahara and T. Fujiwara (2009) In Situ Fluorescence Microscopic Investigation into the Dependence of Conformation and Electrophoretic Velocity of Single DNA Molecules on Acid or Spermidine Concentration. *Anal. Sci.*, *25*, 293-299.

高橋秀行，占部泰章，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文 (2009) 逆ミセルを用いる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コバルトとマンガンの微量定量法．*分析化学*, *58*, 523-529.

Y. Okamoto, K. Yamamoto, H. Kataoka, S. Tsuakahara, T. Fujiwara, H. Uchihara, M. Ikeda, B. Hashimoto and K. Wagatsuma (2009) Direct Determination of Bismuth in Steel Samples by Magnetic Drop-In Electrothermal Vaporization Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry (MDI-ETV-ICP-AES). *Appl. Spectrosc.*, *23*, 1108-1111.

S. Tsukahara, R. Kobayashi and T. Fujiwara (2009) Formation of Gold Microparticles by Reduction with *dl*-α-Tocopherol at Liquid/Liquid Interfaces. *Solv. Extr. Res. Develop. Jpn.*, *16*, 37-45.

S. Tsukahara, Y. Kamiya and T. Fujiwara (2009) In Situ Measurements of emission transition dipole moment of individual ordered microdomain of diprotonated tetraphenylporphine aggregate formed at dodecane/aqueous H_2SO_4 interface. *Anal. Bioanal. Chem.*, *395*, 1047-1053.

〇著書

加藤正直, 塚原　聡 共著:物質工学入門シリーズ　基礎からわかる分析化学, 森北出版, 2009.

〇国際会議

T. Hasanin, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Spectroscopic study of acid–base ionization and aggregation processes of fluorescent dyes in a reversed micellar solution of cetyltrimethylammonium chloride in 1-hexanol-cyclohexane.　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec., 2009, Higashi-Hiroshima, Japan)　(一般講演)

〇国内学会

藤原照文：逆ミセル界面ナノ反応場の特異性と化学発光分析法への応用。日本分析化学会第

58 年会（2009 年 9 月，札幌）（依頼講演）

藤原照文：逆ミセルナノ界面場の特異機能を活用した新規な分離・検出法の開発。平成 21 年度広島地区分析技術講演会（2010 年 3 月，東広島）（依頼講演）

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動的挙動の in situ 顕微測定。第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）（一般講演）

藤崎慶子，平山顕大，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：メタル炉加熱気化導入—ICP 質量分析法によるプラスチック中の鉛の定量。第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）（一般講演）

八坂栄次，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：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 顕微分光測定。第 15 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2009 年 7 月，島根県出雲）（ポスター発表）

高橋秀行，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と試料溶媒の検討。第 15 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2009 年 7 月，島根県出雲）（ポスター発表）

向井一晃，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面に形成したリン脂質単分子膜の相転移現象の in situ 顕微蛍光測定。第 15 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2009 年 7 月，島根県出雲）（ポスター発表）

T. Hasanin，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文： Acid–Base and Aggregation Processes of Rhodamine B in a Reversed Micellar Medium of Cetyltrimethylammonium Chloride in 1-Hexanol-Cyclohexane。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

渡辺翔太，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面に生成したリン脂質単分子膜近傍における膜結合性タンパク質の動的挙動の顕微蛍光測定。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

芳賀徳光，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：CTAC 逆ミセル吸着シリカカラムにおける金属ポルフィリンの分離挙動。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

高橋秀行，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：CTAC 逆ミセル界面を反応場としたフローインジェクション化学発光への触媒作用に対する媒質効果。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

山本圭介，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文，内原博，池田昌彦，橋本文寿：ETV□ICP□AES による鉄鋼中の不純物元素の直接定量。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

塚原　聡，鶴田剛士，岡本泰明，藤原照文：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。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

向井一晃，渡辺翔太，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面におけるリン脂質単分子膜の相分離挙動の in situ 顕微蛍光測定。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

八坂栄次，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面に吸着したマンガン(III)ポルフィリン錯体のマイクロドメインの in situ 顕微分光測定。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

川原那津子，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：有機相／ヒドロゲル相界面で生成する金コロイドの in situ 顕微測定。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

篠田哲宏，宮本信頼，伊藤一明，森川　久，岡本泰明，藤原照文，廣川　健：粉乳中のヨウ素の定量。日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）（ポスター発表）

塚原　聡，井下翔平，岡本泰明，藤原照文：液液界面通過に伴う単一 DNA 分子の形態変化の in situ 顕微蛍光測定。第 28 回溶媒抽出討論会（2009 年 11 月，大阪府豊中市）（一般講演）

向井一晃，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面に形成したリン脂質単分子膜のダイナミクスの顕微蛍光測定。平成 21 年度広島地区分析技術講演会（2010 年 3 月，東広島）（一般講演）

〇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	12
博士課程後期(3)	1	1
博士課程前期・後期共(4)	0	0

〇社会活動･学外委員

・学協会役員，委員

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～）

・高大連携事業

藤原　照文，模擬授業，2005 年 10 月 26 日，廿日市（広島県立廿日市高等学校）
塚原　聡，模擬授業，2009 年 9 月 17 日，出雲市（島根県立出雲高等学校）

・論文誌編集委員

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～）

・討論会の組織委員

藤原　照文，日本分析化学会第 64 回分析化学討論会実行委員会委員（2002～2003）
藤原　照文，日本分析化学会第 71 回分析化学討論会実行委員会委員（2009～2010）
藤原　照文，日本化学会西日本大会実行委員会委員（2003）
藤原　照文，ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員会委員（2004～）
藤原　照文，日本分析化学会第 56 年会実行委員会委員（2006～2007）
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）
塚原　聡，日本分析化学会第 71 回分析化学討論会実行委員（2009～2010）

・その他の委員

藤原　照文，日本分析化学会中国四国支部第 37 回分析化学講習会実行委員（2000）
藤原　照文，日本分析化学会中国四国支部第 42 回分析化学講習会実行委員（2005）
塚原　聡，日本分析化学会中国四国支部第 42 回分析化学講習会実行委員（2005）
塚原　聡，日本分析化学会会誌「ぶんせき」編集委員（2008～2009）
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）

〇他研究機関での講義・客員

藤原　照文，徳島大学総合科学部，非常勤講師，2009 年 4 月 6 日-2010 年 3 月 24 日

〇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

〇受賞状況（学生）

高橋　秀行(M2)，平成 21 年度日本分析化学会中国四国支部分析化学若手セミナー（ポスター発表）優秀賞「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と試料溶媒の検討」(2009)
向井　一晃(M2)，平成 21 年度日本分析化学会中国四国支部分析化学若手セミナー（ポスター発表）優秀賞「液液界面に形成したリン脂質単分子膜の相転移現象の in situ 顕微蛍光測定」(2009)

〇座長を行った学会・討論会の名称

藤原　照文，第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）
塚原　聡，第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）
塚原　聡，日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）
塚原　聡，第 28 回溶媒抽出討論会（2009 年 11 月，大阪府豊中市）
岡本　泰明，第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）

構造有機化学研究グループ

スタッフ　灰野　岳晴（教授），池田　俊明（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。

2009 年度の研究成果の概要を以下に示す。

1. トリス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に光機能性置換基を導入することにより，光応答性の超分子集合体を構築することに成功した。光異性化を示すアゾベンゼンを導入した系では紫外光の照射によってゲルの崩壊を引き起こすことに成功した。また，蛍光色素としてペリレンビスイミドを導入した系では，温度・溶媒の変化によって顕著な光変調を示すことを明らかにした。
2. クラウンエーテルとアンモニウムカチオンの分子認識を駆動力としたカテナンの合成を行った。Grabbs 触媒を用いた閉環メタセシスを利用することによって，［３］カテナンおよび［５］カテナンの合成に成功した。
3. クレフト構造をもったポルフィリン二量体が自己集合により二量化し，また電子不足なゲスト分子とホスト—ゲスト錯体を形成するという相互作用を利用し，ポルフィリン超分子ポリマーの合成を行った。いずれの系においても顕微鏡によって繊維状の組織の観察に成功した。

○発表原著論文

T. Haino, T. Fujii, A. Watanabe, U. Takayanagi (2009) Supramolecular polymer formed by reversible self-assembly of tetrakisporphyrin. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, **106**, 10477-10481.

T. Haino, K. Fukuta, H. Iwamoto, S. Iwata (2009) Noncovalent Isotope Effect for Guest Encapsulation in Self-Assembled Molecular Capsules. *Chemistry A European Journal*, **15**, 13286-13290.

T. Haino, H. Saito (2009) A new organogelator based on 1,3,5-tris(phenylisoxazolyl)benzene. *Synthetic Metals, Special Issue: Super-Hierarchical Structure*, **159**, 821-826.

T. Haino, H. Shio, R. Takano, Y. Fukazawa (2009) Asymmetric Induction of Supramolecular Helicity in Calix[4]arene-based Triple-Stranded Helicate. *Chemical Communications*, **2009**, 2481-2484.

H. Iwamoto, K. Niimi, T. Haino, Y. Fukazawa (2009) Energetics of guest binding to calix[4]arene molecular containers. *Tetrahedron*, **65**, 7259-7267.

Y. Uehara, M. Mochizuki, K. Matsuno, T. Haino, A. Asai (2009) Novel high-throughput screening system for identifying STAT3–SH2 antagonists. *Biochemical and Biophysical Research Communications*, **380**, 627-631.

○著書

T. Haino: Fullerene-containing Supramolecular Polymers. In Fullerene Polymers - Synthesis and Properties (ed. by N. Marîn), Wiley-VCH, Weinheim, pp. 189-217, 2009.

T. Haino, H. Iwamoto: Compounds with All-Carbon Functions: Aromatic Ring Assemblies, Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, and Conjugated Polyenes. In Science of Synthesis, Houbo-Wel Methods of

Molecular Transformations (ed. by J. S. Siegel, Y. Tobe) Thieme, Stuttgart, 45b, pp. 1193–1266, 2009.

T. Haino, H. Iwamoto: 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. In 次世代共役ポリマーの超階層制御と革新機能, シーエムシー出版, 東京, pp. 97-105.

○国際会議

T. Haino: Construction of Supramolecular Polymer via Noncovalent Forces. International Symposium on Chiral Compounds and Special Polymers (CCSP) (Sep., 2009, Harbin, China)（基調講演）

A. Watanabe, T. Haino: Supramolecular Polymer Triggered by Iterative Host-Guest Interaction of Bisporphyrin and Trinitrofluorenone. The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Hiroshima University (Dec., 2009, Hiroshima, Japan)（一般講演）

T. Haino: Self-Assembly of Functionalized Porphyrin. IUPAC 5th International Symposium on Novel Materials and Synthesis (NMS-V) 19th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers (FCFP-XIX) 3rd Symposium on Power Sources for Energy Storage and their Key Materials (PS-III) (Oct., 2009, Shanghai, China)（招待講演）

○国内学会

灰野岳晴：特異な分子間相互作用を基盤とした超分子ポリマーの開発。東京理科大学　講演会（2009 年 9 月，東京）（招待講演）

灰野岳晴：分子間相互作用を操りナノ空間で分子を並べる。日本化学会　第３回関東支部大会（2009 年 9 月，東京）（招待講演）

灰野岳晴：特異的包接により駆動される超分子配列構造の構築。第９回機能性分子シンポジウム（2010 年 1 月，茨城）（招待講演）

灰野岳晴:超分子化学を基盤としたナノ分子配列構造の制御。第六回有機元素化学セミナー（2010 年 2 月，京都）（招待講演）

灰野岳晴・平井恵梨・坂元克司：フラーレンとカリックス［５］アレーンのホスト–ゲスト相互作用による超分子フラーレンポリマーの構築。第５８回高分子討論会特定テーマ２．機能性共役高分子の精密合成の新展開（2009 年 9 月，熊本）（依頼講演）

灰野岳晴：特異な包接モチーフを用いた超分子集積構造の構築。日本化学会第９０春季年会特別企画「分子集積・組織化システムにおける協同効果と機能制御」（2010 年 3 月，大阪）（依頼講演）

灰野岳晴・平井恵梨：フラーレンをペンダントにもつポリフェニルアセチレンのホストーゲスト相互作用による超分子架橋。高分子学会年次大会（2009 年 5 月，兵庫）（一般講演）

灰野岳晴・平井恵梨・坂元克司：カリックス［５］アレーンとフラーレンの包接により形成される超分子ポリマー。第５回ホスト・ゲスト化学シンポジウム（2009 年 5 月，栃木）（一般講演）

渡辺亮英・藤井隆吏・高柳麗・灰野岳晴：ビスポルフィリンクレフトの分子認識により自己集合した超分子ポリマー。第２０回基礎有機化学連合討論会（2009 年 9 月，群馬）（一般講演）

田福伸次・岩本啓・灰野岳晴：［２］カテナンとアンモニウム塩からなる擬ロタキサンの閉環メタセシス反応による［５］カテナンの合成。日本化学会第９０春季年会（2010 年 3 月，大阪）（一般講演）

渡辺亮英・藤井隆吏・高柳麗・灰野岳晴：ビスポルフィリン誘導体の分子認識により自己集合する超分子ポリマー（１）。日本化学会第９０春季年会（2010 年 3 月，大阪）（一般講演）

渡辺亮英・藤井隆吏・高柳麗・灰野岳晴：ビスポルフィリン誘導体の分子認識により自己集合

する超分子ポリマー（２）。日本化学会第９０春季年会（2010 年 3 月，大阪）（一般講演）
増田哲也・石橋正浩・池田俊明・灰野岳晴：ペリレンビスイミドを導入したトリス（フェニルイソオキサゾリル）ベンゼンの合成と集合挙動。日本化学会第９０春季年会（2010 年 3 月，大阪）（一般講演）
渡辺亮英・灰野岳晴：電子不足芳香族を持つビスポルフィリンクレフトの自己集合。第５回ホスト・ゲスト化学シンポジウム（2009 年 5 月，栃木）（ポスター）
田福伸次・岩本啓・灰野岳晴：クラウンエーテルと二級アンモニウム塩からなる擬ロタキサンのオレフィンメタセシスによる［５］カテナンの合成研究。第３回有機π電子系シンポジウム（2009 年 12 月，大分）（ポスター）
渡辺亮英・灰野岳晴：ビスポルフィリンとトリニトロフルオレノンのホスト—ゲスト相互作用により自己集合した超分子ポリマー。第３回有機π電子系シンポジウム（2009 年 12 月，大分）（ポスター）

〇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)	1	7
博士課程後期(3)	0	0
博士課程前期・後期共(4)	0	0

〇セミナー・講演会開催実績
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）
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

〇研究助成の受け入れ状況
科学研究費補助金　基盤研究（B），特異な包接モチーフを用いた超分子らせんポリマーの構築と高度分子配列制御，灰野岳晴（代表者）
財団法人ひろしま産業振興機構，超分子化学による炭素クラスターナノ配列構造の構築と機能性材料への展開，灰野岳晴（代表者）
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（代表者）
科学研究費補助金　特別研究員奨励費，機能性ポルフィリンナノマテリアルの開発，池田俊明（代表者）

〇受賞状況（職員）
T. Haino: Visiting Lectureship of the Chemistry Research Promotion Center, Taiwan. National Chiao Tung University, Academia Sinica, National Taiwan University, 2009.

◯座長を行った学会・討論会の名称

灰野岳晴：第５回ホスト・ゲスト化学シンポジウム（2009 年 5 月，栃木）

灰野岳晴：第５８回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）

灰野岳晴：第２０回基礎有機化学連合討論会（2009 年 9 月，群馬）

灰野岳晴：日本化学会第９０春期年会（2010 年 3 月，大阪）

◯その他特記事項

灰野岳晴：日本学術振興会先端研究拠点事業「新規典型元素化合物の創製とその応用」研究協力者

灰野岳晴：広島大学薬品管理システム専門委員会委員（2004 年 4 月―）

灰野岳晴：広島大学図書館運営戦略会議委員（2009 年 4 月―）

分子反応化学講座

反応物理化学研究グループ

スタッフ　山崎　勝義（教授），　高口　博志（准教授），高橋　修（助教）

○研究活動の概要

1. 高振動励起分子の反応素過程の研究

振動励起分子と他分子の衝突により引き起こる多段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。主力装置である可視・紫外域レーザ誘起蛍光(LIF)検出システムを利用して，励起酸素原子 $O(^1D)$と OCS の反応過程の速度論的研究を開始した。$O(^1D)$＋OCS 反応により生成する高振動励起 $SO(X^3\Sigma^-)$を発光分散型 LIF 法により振動準位選択的に検出することに成功し，生成振動準位のエネルギー情報から高振動励起 $SO(X^3\Sigma^-)$が $O(^1D)$＋OCS 反応により生成していることを明らかにした。これまで，$O(^3P)$＋OCS 反応により $SO(X^3\Sigma^-)$が生成することは知られていたが, $O(^1D)$＋OCS 反応による $SO(X^3\Sigma^-)$生成を実証したのは本研究が初めてである。また，$O(^1D)$＋OCS 反応の速度定数は相対法による報告が 1 件のみという状況であったが, 本研究において $SO(X^3\Sigma^-)$生成速度の OCS 濃度依存性から $O(^1D)$＋OCS 反応の総括速度定数の直接測定を行い学術誌に発表した。

種々の化学反応の観測手段として水素原子検出を行うために，2 光子励起真空紫外レーザ誘起蛍光検出装置を新たに製作した。本手法では，水素原子を 243.2 nm レーザにより 2s ←← 1s 遷移を 2 光子励起し，2s 状態と他分子の衝突により生成する 2p 状態から 1s 状態への真空紫外発光(Lyman-α線，121.6 nm)を光電子増倍管で検出する。大部分を自作した装置により，プロパンへの 243.2 nm レーザ光照射で生成した水素原子を検出することに成功した。同装置は，レーザ強度 200 μJ/pulse でも水素原子を検出することができる高感度なものであり，今後，反応速度のみならず生成物量子収率や生成物分岐比など反応機構の解明を推進していく上できわめて有力な機器になると考えられる。

2. 量子状態選別分子イオン源を用いたイオン・分子反応ダイナミクスの研究

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。高真空チェンバー内に設置したピエゾ駆動型の超音速分子線バルブを用いて, NO 分子線に対する共鳴多光子イオン化法により NO^+イオンビームを発生させた。生成イオンのスペクトル測定から，イオンビームの回転・並進温度は 4K 以下の極低温であることが示された。このイオンビーム源は，上記の NO 分子の紫外光イオン化と同様にリドベルグ状態を経由する共鳴多光子イオン化法を用いることで，多様な有機分子種に対して振動・回転状態を選択した分子イオンを発生させることができ，内部エネルギーと衝突エネルギーを制御した反応実験に適用可能である。生成したイオンビームを反応領域に導入する RF イオンガイドと同時に，生成物の検出系の整備を進めている。検出系としては，反応機構に敏感である生成物散乱分布を可視化測定するための，光イオン化画像観測装置を製作し，これを用いてヨウ化メチルの光解離反応から生成されるメチルラジカルの散乱分布測定を行った。検出器上に生成物イオンが到着した位置が画像として観測され，画像観測システム全体は正常に動作していることが確認されている。一方で得られた散乱分布画像の歪みは，イオン化領域および検出器周辺の静電場の制御が完全ではないことを示しており，このことから今後の改良の方向性が得られた。

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。今回前年度の水表面の研究をふまえ，凝縮相アンモニア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

K. Orimi, S. Watanabe, H. Kohguchi, and K. Yamasaki (2009) Direct Determination of the Rate Coefficient for the Reaction of O(^{1}D) with OCS. *Chem. Phys. Lett.*, **483**(1-3), 16-20.

Y. Ogi, H. Kohguchi, D. Niu, K. Ohshimo, and T. Suzuki, (2009), Super-resolution photoelectron imaging with real-time subpixelation by field programmable gate array and its application to NO and benzene photoionization, *J. Phys. Chem. A.*, **113**(52), 14536–14544

O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, K. Ueda, H. Suezawa, and M. Nishio (2009) Origin of the relative stability of axial conformers of cyclohexane and cyclohexanone derivatives investigated by high-level ab initio MO calculations: Importance of the CH/n and CH/π hydrogen bonds, *Bull. Chem. Soc. Japan*, **82**(2) 272-276.

T. Tokushima, Y. Horikawa, Y. Harada, O. Takahashi, A. Hiraya, and S. Shin (2009) Selective observation of the two site-specific oxygens in carboxyl group (-COOH) of liquid acetic acid, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11**, 1679-1682.

Y. Kohno, R. I. Hiyoshi, Y. Yamaguchi, S. Matsumoto, A. Koseki, O. Takahashi, K. Yamasaki, and K. Ueda (2009) Molecular Dynamics Studies of the Structural Change of 1,3-Diamino-2,4,6-Trinitrobenzene (DATB) in the Crystalline State under High-Pressure, *J. Phys. Chem. A*, **113**, 2551-2560.

O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, K. Ueda, H. Suezawa, and M. Nishio (2009) The conformation of levopimaric acid investigated by high-level ab initio MO calculations. Possibility of the CH/π Hydrogen bond, *Tetrahedron*, **65**, 3525-3528.

O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, K. Ueda, H. Suezawa, and M. Nishio (2009) Origin of the generalized anomeric effect: Importance of the CH/n and CH/π hydrogen bonds, *Carbohydrate Res.*, **344**(10), 1225-1229.

S. Nagaoka, A. Nitta, Y. Tamenori, H. Fukuzawa, K. Ueda, O. Takahashi, T. Kakiuchi, Y. Kitajima, K. Mase, and I. H. Suzuki (2009) Auger-electron spectra of $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$ obtained by using monochromatized synchrotron radiation, *J. Elec. Spectrosc. Rel. Phenom.*, **175**, 14-20.

Y. Horikawa, T. Tokushima, Y. Harada, O. Takahashi, A. Chainani, Y. Senba, H. Ohashi, A. Hiraya, and S. Shin (2009) Identification of valence electronic states of aqueous acetic acid in acid-base equilibrium using site-selective x-ray emission spectroscopy, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11**, 8676-8679.

C. Huang, K. T. Wikfeldt, T. Tokushima, D. Nordlund, Y. Harada, U. Bergmann, M. Niebuhr, T. M. Weiss, Y. Horikawa, M. Leetmaa, M. P. Ljungberg, O. Takahashi, A. Lenz, L. Ojamae, A. P. Lyubartsev, S. Shin, L. G. M. Pettersson, and A. Nilsson (2009) The Inhomogeneous Structure of Water at Ambient Conditions, *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)*, **106**(36), 15214-15218.

I. H. Suzuki, A. Nitta, H. Fukuzawa, K. Ueda, O. Takahashi, Y. Tamenori, and S. Nagaoka (2009) Site-Specific Behavior in excitation and de-excitation spectra of $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$ in the Si 1s

Excitation Region, *J. Chem. Phys.*, **131**(16), 164309-8.

Y. Tamenori, O. Takahashi, K. Yamashita, Y. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, and K. Honnma (2009) Hydrogen bonding in acetone clusters probed by NEXAFS spectroscopy in the carbon and oxygen K-edge regions, *J. Chem. Phys.*, **131**(17), 174311-9.

O. Takahashi, K. Matsuyama, K. Tabayashi, and K. Yamasaki (2009) Chemical bond elongation following core-excitation of ammonia: Resonant Auger spectra calculation, *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **42**(24), 245102-6.

○著書

山崎勝義 (2009) Pauli 原理と Slater 行列式。分子科学会 Web ジャーナル, *Mol. Sci.* 3(1), AC0012.

山崎勝義 (2009) 平衡定数に関する誤解 －高等学校教科書の解説における問題点－。現代化学，pp. 66-69, 2009 年 4 月号，東京化学同人.

高口博志 (2009) 酸素原子とメタンの反応機構に新事実。化学，2009 年 5 月号，化学同人.

○国際会議

N. Kohno, M. Izumi, H. Kohguchi, and K. Yamasaki: Dramatic Acceleration of the Reaction OH + CO → H + CO_2 by Vibrational Excitation of OH. International Workshop on Chemistry in the Earth's Atmosphere (Sep. 2009, Tokyo, Japan) (ポスター)

O. Takahashi, I.H. Suzuki, A. Ikeda, Y. Kono, T. Ouchi, K. Ueda, I. Higuchi, Y. Tamenori, and S. Nagaoka**:** X-ray Absorption and Resonant Auger electron spectra of SiF_4 and $Si(CH_3)_4$ in the Si *K*-shell excitation region. International Workshop on Electronic Spectroscopy for Gas-phase Molecules and Solid Surfaces (Oct. 2009, Sendai, Japan) (ポスター)

○国内学会

渡辺信嗣，高口博志，山崎勝義，Rate Coefficients for the Single- and Multiquantum Vibrational Relaxation of $O_2(X^3\Sigma_g^-, v = 8 – 13)$ by Collisions with N_2。第 25 回化学反応討論会 (2009 年 6 月，大宮) (口頭)

泉 真里，高口博志，山崎勝義，プロパンの紫外多光子解離による水素原子生成機構の解明。西日本大会 2009 (2009 年 11 月，松山) (口頭)

折見健一，渡辺信嗣，高口博志，山崎勝義，$O(^1D)$＋OCS 反応による振動励起 SO 生成過程の速度論的研究。西日本大会 2009 (2009 年 11 月，松山) (口頭)

河野七瀬，高口博志，山崎勝義，OH の振動励起による OH＋CO → H＋CO2 反応の加速。西日本大会 2009 (2009 年 11 月，松山) (口頭)

折見健一，渡辺信嗣，高口博志，山崎勝義，Direct Determination of the Rate Coefficient for the Reaction of $O(^1D)$ with OCS。The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2009 年 12 月，東広島) (口頭)

河野七瀬，高口博志，山崎勝義，Acceleration of the Reaction OH + CO → H + CO_2 by Vibrational Excitation of OH。The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2009 年 12 月，東広島) (口頭)

泉 真里，高口博志，梅本宏信，山崎勝義，Generation of Hydrogen Atom in Multiphoton Dissociation of Propane at 243 nm。第 25 回化学反応討論会 (2009 年 6 月，大宮) (ポスター)

折見健一，渡辺信嗣，高口博志，山崎勝義，Generation of Highly Vibrationally Excited $SO(X^3\Sigma^-)$ in the Reaction of $O(^1D)$ + OCS。第 25 回化学反応討論会 (2009 年 6 月，大宮) (ポスター)

河野七瀬，渡辺信嗣，高口博志，山崎勝義，Kinetic Study on the Reactions of Vibrationally Excited $OH(X^2\Pi)$ with CO。第 25 回化学反応討論会 (2009 年 6 月，大宮) (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)	1	8
博士課程後期(3)	1	1
博士課程前期・後期共(4)	0	0

◯社会活動・学外委員

・学協会役員

山崎 勝義，日本分光学会代議員 (2004, 2006～)
山崎 勝義，日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2006)
高口 博志，原子衝突研究協会行事委員 (2004～2007)
山崎 勝義，日本分光学会中国支部会計監査 (2006～)
高口 博志，日本化学会代議員 (2007)
山崎 勝義，日本化学会中国四国支部会計幹事 (2008)
高口 博志，原子衝突研究協会運営委員 (2008～)
山崎 勝義，日本化学会中国四国支部事務局長 (2009)
高口 博志，原子衝突研究協会運営幹事行事委員長 (2009～)

・講習会・セミナー講師

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)
山崎 勝義，科学研究費補助金説明会「科学研究費補助金に採択されるためには，どのように研

究計画調書を書けばよいか」(2009 年 9 月，広島大学)

・高大連携事業(出張講義)

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)

・論文誌編集委員

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)

・討論会の組織委員

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)

山崎 勝義，第 26 回化学反応討論会実行委員会委員長 (2009～2010)

高口 博志，第 26 回化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)

高橋 修，第 26 回化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)

高口 博志，原子衝突研究協会第 35 回年会実行委員会委員長 (2009～2010)

・その他の委員

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 (2007～2009)

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 (2007～2009)

山崎 勝義，高等教育研究開発センター運営委員 (2009)

〇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

〇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

科学研究費補助金 基盤研究(B)，微視的有機反応系としてのイオン・分子反応ダイナミクスの研究，研究代表者　高口博志

環境研究総合推進費，レーザー光イオン化法を用いたニトロ有機化合物の新規検出法の開発，研究分担者　高口博志

◯座長を行った学会・討論会の名称

山崎 勝義，第 25 回化学反応討論会，大宮，2009 年 6 月

高口博志，第 25 回化学反応討論会，大宮，2009 年 6 月

高口博志，日本化学会西日本大会 2009，松山，2009 年 11 月

有機典型元素化学研究グループ

スタッフ　山本　陽介（教授），河内　敦（准教授）

〇研究活動の概要

2009 年度末に，博士（理学）の学位を 1 名が取得した。研究面では，新規三座配位子を用いた超原子価窒素ラジカルカチオンの合成と単離、また別の新規三座配位子を用いたイリジウム触媒を用いた脱水素の研究などで成果を挙げることが出来た。

新規なケイ素反応剤である *o*-(ボリル)(ジヒドロシリル)ベンゼンの合成と反応において興味深い知見を得ることができた。まず，*o*-(ボリル)(ジヒドロシリル)ベンゼンの効率的合成経路を開発した。*o*-(ボリル)(ジヒドロシリル)ベンゼンとケトンとを反応させた後，引き続いてフッ化物イオンで処理することにより，ケトンを対応するアルコールへと変換することに成功した。ケトンが存在しない場合，*o*-(ボリル)(ジヒドロシリル)ベンゼンを加熱すると，ケイ素原子とホウ素原子間での置換基交換とそれに続く分子内求電子付加反応により，ベンゾシラボリンが生成すること見出した。

〇発表原著論文

A. Kawachi, K. Machida and Y. Yamamoto (2009) Reactions of [*o*-(Fluorodimethylsilyl)phenyl]lithium with $GeCl_2$ and $SnCl_2$: Preparation of Polyfunctionalized Four-Membered and Five- Membered Cyclic Linkages of Heavier Group 14 Elements. *Organometallics*, **28**(21), 6347-6351.

T. Yano, T. Yamaguchi, and Y. Yamamoto (2009) Synthesis and Structure of Pentacoordiante Hypervalent Boron Compounds Bearing a 1,8-Dimethoxy-10-methylacridinium Skeleton, *Chem. Lett.*, **38**(8), 794-795.

山本陽介 (2009) 新規１６π ポルフィリンの合成と金属化合物との反応。*Organometallic News*, **No.1**, 12-15.

S. Matsukawa, H. Yamamichi, Y. Yamamoto, and K. Ando (2009) Pentacoordinate Organoantimony Compounds That Isomerize by Turnstile Rotation. *J. Am. Chem. Soc.*, **131**(10), 3418-3419.

A. Kawachi, T. Teranishi, and Y. Yamamoto (2009) Preparation and Oxidative Coupling of Bis[*o*-(hydrosilyl)phenyl]cuprates and Bis[*o*-(fluorosilyl)phenyl]cuprates. *Tetrahedron Letters*, **50,** 1226-1228.

M. Okimoto, A. Kawachi, and Y. Yamamoto (2009) Synthesis of Silicon-Functionalized 7-Silanorbornadienes and Their Thermolysis and Photolysis. *Journal of Organometallic Chemistry*, **694**(9-10), 1419-1426.

S. Matsukawa, Y. Yamamoto, and K-y. Akiba (2009) Solution and Crystal Structure of a Hexacoordinate Phosphoranate Bearing Two Martin Ligands and Two Methyl Groups. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, **184**(4), (Honoring the 70th Birthday of Marian Mikolajczyk), 928-935.

〇国際会議

Y. Yamamoto : Synthesis and Structire of Hypervalent Penta- and Hexacoordinate Carbon and Boron Compounds.　Symposium on Creation of Functional Materials (Dec. 2009, Tsukuba)（招待講演）

A. Kawachi : [*o*-(Fluorosilyl)phenyl]lithium: A Useful Tool for Functionalizing Main Group Element Compounds 4th Workshop on Organometallic Chemistry (WOMC)(Oct. 2009, Fukukoka)（招待講演）

S. Fuku-en, T. Yano, T. Yamaguchi, and Y. Yamamoto : Oxidation of the Allene Compounds Bearing Two Thioxanthene or Acridene Skeletons. The 12th Kyushu International Symposium on Physical Organic

Chemistry (KISPOC-12)　(Dec. 2009, Fukuoka)（一般講演）

T. Suguri, and Y. Yamamoto : Synthesis of Iridium complexes with a Novel Pincer Type Tridentate Ligand and Application to Catalysts for Dehydrogenation of Alkanes.　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima)　（一般講演）

K. Machida, A. Kawachi, and Y. Yamamoto: Synthesis and Reaction of a Benzosilagermacyclobutene Bearing *o*-(Fluorosilyl)phenylGroups. The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima)　（一般講演）

Y. Yamamoto : Isomerization of Pentacoordinate Antimony Compounds by Turnstile Rotation. The 3rd International Symposium on Synergy of Elements (Aug. 2009, Sapporo)（一般講演）

A. Kawachi, K. Machida, Y. Yamamoto: Synthesis, Structure, and Reaction of {Tris[*o*-(fluorodimethylsilyl)phenyl]germyl}potassium. 9th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-9) (Jun.-Jul. 2009,　Oviedo (Spain))　（一般講演）

A. Kawachi, H. Morisaki, Y. Yamamoto : Synthesis and Reactions of *o*-Dihydrosilyl(dimesitylboryl)benzenes. The 4th Hiroshima Workshop on Sustainable Materials Science) (Nov. 2009, Higashi-Hiroshima)（ポスター発表）

Y. Yamamoto, T. Kakui, S. Sugawara, Y. Hirata, N. Kobayashi, D. Hashizume, M. Uchiyama, A. Muranaka : Synthesis and Properties of 16 π Porphyrins. 第 14 回有機金属および配位化学に関する日韓合同シンポジウム(The 14th Japan-Korea Joint Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry)(Oct. 2009，Nagoya)　（ポスター発表）

N. Suzukawa, Y. Yamamoto,　T. Kashiwaba, and S. Matsukawa : Development of New Synthetic Methods for Spherands. The Eleventh International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-11)　(Nov. 2009，Kyoto)（ポスター発表）

〇国内学会

山本　陽介：偶然の発見：非芳香族性１６π ポルフィリンの合成とその後の展開。第 25 回若手研究者のための化学道場(2009 年 9 月，松山)（特別指南講演）

山本陽介 : 超原子価５配位炭素化合物を指向した新規３座配位子系の開発と遷移金属化合物合成への応用。 第 42 回有機金属若手の会　夏の学校（2009 年 7 月，岐阜）（特別講演）

島田　淳平，河内　敦，山本　陽介：*o*-(ジフルオロシリル)(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および動的挙動。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

河内　敦，森崎　宏，山本　陽介：*o*-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。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

平野　雄一，山本　陽介：二つのピリミジン環を有する超原子価 5 配位ホウ素化合物の合成。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

中辻　惇也，山本　陽介 : エステル型三座配位子を用いた超原子価 5 配位窒素ラジカルカチオン種の合成。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

福圓　真一，矢野　倫之，山口　虎彦，山本　陽介 : アクリデ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。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

菅原　峻，平田　祐介，宮碕　栄吾，瀧宮　和男，橋爪　大輔，小林　長夫，村中　厚哉，山本　陽介 : 16π 骨格を有するテトラフェニルテトラベンゾポルフィリン銅錯体の合成と性質。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

河内　敦，石部　徹，山本　陽介：二つのホスホニウムイリドを分子内配位子とする 5 配位ケ

イ素化合物の合成研究。日本化学会第 90 春季年会　(2010 年 3 月，東大阪)（一般講演）
中辻惇也，山本陽介：カルボニル酸素を配位原子とする新規三座配位子を用いた超原子価 5 配位窒素ラジカルカチオン種の合成。第 36 回有機典型元素化学討論会 (2009 年 12 月, 鳥取)（一般講演）
山本 陽介，角井 隆功，菅原 峻，平田 祐介，小林 長夫，橋爪 大輔，内山 真伸，村中 厚哉: 16π ポルフィリンの合成と性質。第 20 回基礎有機化学討論会(2009 年 9 月，桐生)（一般講演）
河内　敦：*o*-シリルおよび *o*-ボリルフェニルメタル化合物の合成と反応。文部科学省科学研究費補助金特定領域研究「プロセス化学を指向する精密有機合成化学」とりまとめシンポジウム (2009 年 6 月，京都) （一般講演）
山本陽介：16π ポルフィリンの安定化と金属錯体の合成。特定領域研究「元素相乗系の化学」第 5 回シンポジウム (2010 年 3 月，宇治)（ポスター発表）
平野雄一，山本陽介：ピリミジニル基を配位子とする超原子価 5 配位ホウ素化合物の合成。第 36 回有機典型元素化学討論会 (2009 年 12 月，鳥取)（ポスター発表）
島田淳平，河内　敦，山本陽介：*o*-(ジフルオロシリル)(ジメチルボリル)ベンゼンのフッ化物イオンとの錯形成および動的挙動。第 36 回有機典型元素化学討論会(2009 年 12 月，鳥取)（ポスター発表）
保田浩孝，山本陽介，山口虎彦，木下大輔，秋葉欣哉：2 つの van Koten 型配位子を有する超原子価 5 配位及び 6 配位炭素及びホウ素化合物の合成の検討。第 36 回有機典型元素化学討論会 (2009 年 12 月，鳥取)（ポスター発表）
諏沢　宏，山道秀映，松川史郎，山本陽介，安藤香織：新規三座配位子を用いた 5 配位アンチモン化合物の Turnstile Rotation 機構による異性化。第 36 回有機典型元素化学討論会 (2009 年 12 月，鳥取)（ポスター発表）
鈴川直幸，柏葉　崇，松川史郎，山本陽介：新規スフェランド誘導体の合成とアート錯体安定化の試み。第 36 回有機典型元素化学討論会 (2009 年 12 月，鳥取)（ポスター発表）
菅原　峻，平田祐介，宮碕栄吾，瀧宮和男，小林長夫，橋爪大輔，内山真伸，　村中厚哉，山本陽介：ベンゾ縮環した骨格を有する 16π ポルフィリンの合成と性質。第 36 回有機典型元素化学討論会 (2009 年 12 月，鳥取)（ポスター発表）
河内　敦，石部　徹，山本　陽介：二つのホスホニウムイリドを分子内配位子とする 5 配位ケイ素化合物の合成研究。第 13 回ケイ素化学シンポジウム (2009 年 10，唐津) (ポスター発表)
河内　敦，森崎　宏，山本　陽介：*o*-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第 13 回ケイ素化学シンポジウム (2009 年 10 月，唐津) (ポスター発表)
中辻 惇也，山本 陽介：新規三座配位子を用いた超原子価 5 配位窒素ラジカルカチオン種の合成の試み。第 20 回基礎有機化学討論会 (2009 年 9 月，桐生)（ポスター発表）
福圓 真一，山口 虎彦，山本 陽介：アクリデン又は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。第 20 回基礎有機化学討論会 (2009 年 9 月，桐生)（ポスター発表）
村主拓弥，土肥千里，松川史郎，山本陽介：新規 pincer 型三座配位子を用いた遷移金属錯体の合成とアルカンの脱水素化触媒への応用。第 56 回有機金属化学討論会 (2009 年 9 月，京都)（ポスター発表）
長江沙織，河内　敦，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 56 回有機金属化学討論会 (2009 年 9 月，京都)（ポスター発表）
角井　隆功：16π 骨格を有するアルキルポルフィリンの合成と性質。第 25 回若手研究者のための化学道場 (2009 年 9 月，松山) （ポスター発表）

黒﨑　章裕：超原子価 3 配位酸素ラジカルカチオン種(9-O-3)合成の試み。第 25 回若手研究者のための化学道場 (2009 年 9 月，松山（ポスター発表）)

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 配位炭素及びホウ素化合物の合成。第 25 回若手研究者のための化学道場 (2009 年 9 月，松山) （ポスター発表）

菅原　峻：新規な 16π 電子系を有するポルフィリン誘導体の合成と性質。第 25 回若手研究者のための化学道場 (2009 年 9 月，松山) （ポスター発表）

中辻　惇也：新規三座配位子を用いた超原子価窒素ラジカル種の合成。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

平野　雄一: ピリミジニル基を有した窒素系多座配位子の合成とその典型元素化合物への応用。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

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の試み。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

福崎　裕太 : 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 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

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。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

森崎　宏：ケイ素原子とホウ素原子の協同的相互作用を利用した新規反応剤の開発:*o*-(ジヒドロシリル)ボリルベンゼンの合成と反応。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

福圓　真一: アクリデ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。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

黒﨑　章裕 : 超原子価 3 配位酸素ラジカルカチオン種 (9-O-3)の合成。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

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。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

松本　耕太郎：π 供与性基を有する嵩高い新規配位子の開発と低配位不安定化合物の安定化。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （ポスター発表）

菅原　峻：新規な 16π 電子系を有するポルフィリン誘導体の合成と性質。第 44 回有機反応若手の会 (2009 年 7 月，上尾) （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	5
博士課程前期(2)	2	21
博士課程後期(3)	1	9
博士課程前期・後期共(4)	0	0

◯セミナー・講演会開催実績

日時：平成 21 年 6 月 26 日(金)

場所：理学部　E002 号室

講師：福山透教授（東京大学・大学院薬学系研究科）

演題：天然物全合成と反応開発

◯社会活動･学外委員

河内　敦，ケイ素化学協会理事，2008-
河内　敦，日本化学会中国四国支部庶務幹事
・外部評価委員など
山本 陽介，IUPAC Commission II-2, National Representative (2002－)
・高大連携事業
山本　陽介，2009 年 7 月，広島大学附属高等学校 SSH 事業
・論文誌編集委員
山本　陽介，Journal of Physical Organic Chemistry, Editorial Board (2005-)
・討論会の組織委員
第１１回国際有機化学京都会議 (IKCOC-11)，2009年11月，国内組織委員
・その他の委員
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）

〇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-)

〇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，配位空間制御に基づく相乗系超原子価元素化合物の創製，代表者　山本陽介
科学研究費補助金基盤研究(B)，スフェランドの新規誘導体合成を基盤とする新規超原子価アート錯体合成への応用，代表者　山本　陽介

〇受賞状況（学生）
菅原　峻(B4)，広島大学理学部長賞（2010)
町田康士(M2) The Best Student Presentation Award 受賞“Synthesis and Reaction of a Benzosilagermacyclobutene Bearing *o*-(Fluorosilyl)phenylGroups. ”The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2009)
村主拓弥(M2) The Best Student Presentation Award 受賞“Synthesis of Iridium complexes with a Novel Pincer Type Tridentate Ligand and Application to Catalysts for Dehydrogenation of Alkanes.　”The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2009)
平野雄一(D2)第 36 回有機典型元素化学討論会ポスター賞受賞 (2009)
諏沢　宏(M2)第 36 回有機典型元素化学討論会ポスター賞受賞 (2009)
村主拓弥(M2)第 56 回有機金属化学討論会ポスター賞受賞 (2009)

〇座長を行った学会・討論会の名称
山本陽介：第 14 回有機金属および配位化学に関する日韓合同シンポジウム
（平成 21 年 10 月，名古屋）
山本陽介：第 36 回有機典型元素化学討論会（平成 21 年 12 月，鳥取）
河内　敦：第 36 回有機典型元素化学討論会（平成 21 年 12 月，鳥取）
河内　敦：日本化学会第 90 春季年会（平成 22 年 3 月，東大阪）

〇その他特記事項

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 月ー）
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-）
山本　陽介，　組織的な若手研究者等海外派遣プログラム主担当研究者（理工農系：サステナブル社会の実現に貢献する自然科学系国際的若手研究者の育成プログラム）（2010.2-）
河内　敦，理学部教育交流会委員

反応有機化学研究グループ

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

〇研究活動の概要

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，その中間体を経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。さらには、ビラジカルのスピン多重度制御に基づくテトララジカルのスピン整列にも挑戦し、ビラジカルのスピン整列で得られた知見が応用できることを見出した。

有機合成に関する研究では、C_2 対称性をもつ光学活性ピペラジンを有機触媒として用いた高エナンチオ選択的 Michael 付加反応で，ドナー分子を検討することにより汎用性があることが示された。また，上記の Michael 反応と類似の反応剤の組合わせにより，フラン化反応が進行することを見出しているが，キラル補助基を適切に選ぶことにより，高ジアステレオ選択的に反応が進行することを見出した。そして，5 配位ホスホランを反応剤とする Wittig 型反応が進行し，高い Z-選択性が実現できることを見出した。オレフィンメタセシス反応の触媒として知られるグラブス試薬の新たな反応性を見出すため、両末端にジエンを有する鎖状化合物との反応を検討し、オレフィンメタセシス生成物ではなく 3+2 型環化付加生成物が得られることを見出した。

〇発表原著論文

A. Isogai, R. Kanda, Y. Hiraga, T. Nishimura, H. Iwata, N. Goto-Yamamoto (2009) Screening and Identification of Precursor Compounds of Dimethyl Trisulfide (DMTS) in Japanese Sake. *J. Agric. Food Chem.*, **57**, 189-195.

K. Yamamoto (2009) Olefin polymerizations with zirconocene supported on SiO2 modified by MgO, NaOH and LiOH. *Appl. Catal. A: Gen.* 368, 65-70.

K. Yamamoto, Y. Ishihama, E. Isobe, T. Sugano (2009) Ethylene polymerization behavior of Cr(III)-containing montmorillonite: Influence of chromium compounds. *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* 47, 2272-2280.

〇総説

安倍学(2009) 一重項ジラジカル化学への期待―ファジーな結合が拓く有機化学の新たな道―, 化学，64, 12-16.

〇国際会議

M. Abe: Cooperative Effect of Nitrogen and Silicon Atoms on the Singlet-Triplet Energy Spacing in 1,3-Diradicals and Reactivity of Their Singlet States. Gordon Research Conferences on Physical Organic Chemistry (June, 2009, New Hampsher, USA) (招待講演)

M. Abe: Cooperative Effect of Nitrogen and Silicon Atoms on the Singlet-Triplet Energy Spacing in 1,3-Diradicals and Reactivity of Their Singlet States. International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (ISRIUM) (July, 2009, Prague, Czech Republice) (招待講演)

M. Abe: Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry. ISNA-13 Satellite Meeting (July, 2009, Namur, Belgium) (特別講演)

M. Abe: Cooperative Effect of Nitrogen and Silicon Atoms on the Singlet-Triplet Energy Spacing in 1,3-Diradicals and the Reactivity of the Singlet States. 12th Kyusyu International Symposium on Physical Organic Chemistry (KISPOC 12) (December, 2009, Fukuoka, Japan) (招待講演)

Y. Sashihara, A. Iwamoto, S. Kojima, M. Abe: Diastereoselective Synthesisof Furans Bearing a Chiral Quatenary Stereocenter. 12th Kyusyu International Symposium on Physical Organic Chemistry (KISPOC 12) (December, 2009, Fukuoka, Japan)（ポスター）

A. Kosaka, Y. Umeda, A. Iwamoto, S. Kojima, M. Abe: Chiral C2-Symmetric Peperazines as Efficient Catalysts for the Michael Reaction. 12th Kyusyu International Symposium on Physical Organic Chemistry (KISPOC 12) (December, 2009, Fukuoka, Japan)（ポスター）

T. Nakamura, K. Furukawa, T. Kato, Y. Fujiwara, H. Dong, W. T. Borden, M. Abe: Spin Alignment in Tetraradicals, based on the Substituent Effects on the Ground State Spin-Multiplicity of Localized 1,3-Diyls. 12th Kyusyu International Symposium on Physical Organic Chemistry (KISPOC 12) (December, 2009, Fukuoka, Japan)（ポスター）

Y. Yabuno, Y. Hiraga, M. Abe: Study on the Stereoselectivity in the Paterno-Buchi Reaction of Furyl Alcohols. 12th Kyusyu International Symposium on Physical Organic Chemistry (KISPOC 12) (December, 2009, Fukuoka, Japan)（ポスター）

T. Nakagaki, T. Sakai, Y. Fujiwara, M. Abe: Alkoxy-group Effect on the Lifetime of Singlet 2,2-Dialkoxycyclopentane-1,3-diyls. 12th Kyusyu International Symposium on Physical Organic Chemistry (KISPOC 12) (December, 2009, Fukuoka, Japan)（ポスター）

S. Kojima, Y. Murai, and A. Nakagawa: Highly Z-Selective Olefination from
Aldehyde Adducts of Silylacetates,Catalyzed by DBU. 41st National Organic Chemistry Symposium (June 2009, Boulder, USA) (ポスター)

○国内学会

安倍　学：開殻系分子の安定化に基づく未開拓領域の研究。筑波大学学際物質科学研究センター(TIMS)第 6 回機能性分子シンポジウム（2009 年 6 月，つくば）（依頼講演）

薮野洋平，久本　謙，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。2009 年光化学討論会（2009 年 9 月，桐生）（一般講演）

中村岳史，田村大志，藤原好恒，安倍　学：局在化 1,3－ジラジカルを基本骨格とするテトララジカルのスピン整列。第 20 回基礎有機化学討論会（2009 年 9 月，桐生）（一般講演）

八木真吾，安倍　学：DBH 誘導体の脱窒素反応の立体選択性に及ぼす 7 位の置換基効果。第 90 日本化学会春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

久本謙，平賀良知，安倍　学：ゲラニオール類の Paterno-Buchi 反応における位置選択性。第 90 日本化学会春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

前田倫，中村岳史，古川貢，加藤立久，安倍　学：局在化 1,3－ビラジカルのスピン整列に基づくテトララジカルのスピン制御。第 90 日本化学会春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

中垣知幸，藤原好恒，安倍　学：一重項 2,2－ジアルコキシ－1,3－ビラジカルの寿命に及ぼすアルコキシ基の効果。第 90 日本化学会春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

有村淳也，小島聡志，安倍　学：新規 5 配位リン試剤を利用した高 Z-選択的オレフィン合成。日本化学会第 90 回春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

小坂有史，梅田康広，岩本明久，小島聡志，安倍　学：光学活性 β－アミノグアニジンの合成

と反応，日本化学会第 90 回春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

Triana Widianti，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を触媒とした不斉マイケル反応。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

國西剛基，Triana Widianti，平賀良知，安倍　学：新規有機触媒ホモプロリンメチルエステル誘導体の合成と不斉アルドール反応への適用。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（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-ペンタントリオールの不斉アセチル化を利用した非対称化。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（一般講演）

山本幸明・高木隆吉・安倍　学：グラブス試薬を用いた末端ジエン類の分子内[3+2]型環化付加反応。日本化学会第９０春季年会（2010 年 3 月、大阪）（一般講演）

有村淳也，小島聡志，安倍　学：5 配位リン試薬を用いた選択的 Wittig 反応。第 20 回基礎有機化学討論会（2009 年 9 月，桐生）（ポスター発表）

中村岳史，安倍　学：局在化ジラジカルの最安定スピン多重度と反応性に及ぼすケイ素と窒素元素の相乗効果。第 20 回基礎有機化学討論会（2009 年 9 月，桐生）（ポスター発表）

中垣知幸，坂井智子，藤原好恒，安倍　学：一重項 1,3－ジラジカルの寿命に及ぼす 2 位の置換基効果。第 20 回基礎有機化学討論会（2009 年 9 月，桐生）（ポスター発表）

安倍　学，中村岳史，前田倫，古川貢，加藤立久：テトララジカルのスピン整列に及ぼす置換基効果。第 48 回電子スピンサイエンス学会年会（2009 年 11 月，神戸）（ポスター発表）

〇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	4
博士課程前期(2)	4	14
博士課程後期(3)	0	1
博士課程前期・後期共(4)	0	1

〇セミナー・講演会開催実績

安倍　学，第 5 回分子情報ダイナミクス研究会，2009 年 3 月 29～30 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

小島聡志，特色 GP・大学院 GP 合同シンポジウム，2010 年 2 月，広島大学，協調演習特色 GP 事例報告―有機化学演習

〇社会活動･学外委員

安倍学

・学協会役員，委員

分子情報ダイナミクス研究会事務局(2005-2007)

分子情報ダイナミクス研究会代表(2007-)

・論文誌 EDITORIAL BOARD

ARKIVOC EDITORIAL BOARD OF REFEREES (2005-)

・論文誌編集委員

Bulletin of the Chemical Society of Japan (2009-)

・講習会・セミナー講師
Bowling Green State University，2009 年 4 月 1 日，Bowring Green
Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry
・講習会・セミナー講師
University of Cincinnati，2009 年 4 月 3 日，Cincinnati
Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry
・討論会の組織委員
基礎有機化学討論会組織委員(2007-)
小島聡志
・学協会役員，委員
有機合成化学協会中国四国支部事務局（2003-）
・講習会・セミナー講師
特色 GP・大学院 GP 合同シンポジウム，2010 年 2 月，広島大学，協調演習特色 GP 事例報告―有機化学演習

〇産学官連携実績
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」
カネカテクノリサーチ（株)，「天然化合物の精密構造解析に関する研究」

〇国際共同研究・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）
・国際会議組織委員
International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (2005-)
平賀良知
Satomi Niwayama 博士（米国 Texas Tech 大学）

〇他研究機関での講義・客員
平賀良知，広島県産業科学技術研究所，研究協力員，1998 年 4 月 1 日～）
平賀良知，広島工業大学情報学部，非常勤講師，2008 年 5 月 1 日から 2009 年 3 月 31 日）

〇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，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，新学術領域研究，炭素―炭素π1 重結合の創製・集積化による新規π電子系の構築，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，カネカテクノリサーチ（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

徳山科学技術振興財団，新しい分子構造に基づく新規有機材料の開発に関する研究，安倍　学

〇座長を行った学会・討論会の名称

安倍学，第 5 回分子情報ダイナミクス研究会，吹田，2009 年 3 月

安倍学，2009 年光化学討論会，桐生，2009 年 9 月

安倍学，第 20 回基礎有機討論会，桐生，2009 年 9 月

小島聡志，第 5 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム，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８９日本化学会春季年会，船橋，2009 年 3 月

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

2009 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, O–H…O/N–H…N 水素結合分子クラスターを用いて明らかにしてきた。今回，強い極性の相互作用を持つと考えられるアセトアルデヒド分子クラスターにおいて，実験的にまた量子化学的計算により O 1s/C 1s 内殻励起における C–H…O 水素結合効果を検討した。二量体を主とするクラスターにおいて $O1s^{-1}\pi^{*}_{CO}$ バンドに高エネルギーシフトが観測され，そのエネルギーシフトは T 型配向で生ずる n/π^{*}_{CO} 軌道間の HOMO–LUMO 相互作用によるものと判明した。また，この二量体の振動構造において，“blue-shifting”水素結合が存在することが認められた。

②内殻電子励起による有機分子の励起サイト選択的・状態選択的解離ダイナミクス

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。先に，三フッ化酢酸メチル($CF_3C(O)OCH_3$)は，顕著な励起サイト選択性と状態選択性を示す代表的な系であることを見出した。本研究では，内殻共鳴励起とそれに続くオージェ状態での動的挙動を検討するために, 等価内殻近似(ECA)を用いて励起初期過程におけるポテンシャルエネルギー面を密度汎関数法で検討した。O_{OCH3} サイト励起($O1s_{OCH3}^{-1}\pi^{*}_{CO}$)の初期過程は強い反発ポテンシャル上での CH_3O^{+}，CHO^{+}の生成過程が，他方，O_{CO} サイト励起($O1s_{CO}^{-1}\pi^{*}_{CO}$)の初期過程は束縛性のポテンシャル面での動力学的過程の進行が認められた。これら初期内殻励起状態で瞬時にもたらされる動力学的挙動が，最終的なサイト選択的解離過程を大きく特徴付けていることが確かめられた。

③電子衝撃法によるピコリンの内殻励起・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。この選択的結合開裂と電子状態との相関を調べるために ab initio 分子軌道計算を行った。まず，MP2/6-31++G(d,p)レベルでの自己重畳局所状態密度(LDOS)計算から，窒素内殻領域で観測される特徴的な正常オージェ終状態を $n_N^{1}\pi_2^{1}\pi_3^{2}$ および $n_N^{0}\pi_2^{2}\pi_3^{2}$ と帰属した。つづいて CASSCF-MP2(4,3)法を用い，基底状態のピコリンを基準としたこれら終状態の相対エネルギー計算を行った。その結果，選択的結合開裂による生成物へはこれらのオージェ終状態を経れば進行できることが分かり，窒素近傍での選択的結合開裂現象を合理的に解釈できた。

④イオン多重同時計測運動量画像分光法による内殻励起分子の解離ダイナミクス

分子を内殻励起するとオージェ過程により多価イオンが生成し，クーロン爆発によって同時に複数の解離イオンが生成する。これら解離イオンの運動量相関を計測すれば，解離に伴う立体ダイナミクスを考察することができる。その目的のために，高い位置・時間分解能を有するイオン検出器を用いた解離イオンの運動量イメージング測定に着手した。3,3,3-

トリフルオロプロペンの内殻励起ではフッ素転位後の解離という興味深い反応を観測した。その解離ダイナミクスの詳細な考察をはじめている。

⑤四員環フルオロ化合物の光イオン化と解離

温室効果ガスのイオン化と解離は，基礎科学的にも環境科学の観点からも興味深い。パーフルオロ化合物は地球温暖化係数が高いため代替ガスの探索が急務の課題であるが，これらの光解離に関する情報はいまだ不充分である。本研究では，多価イオン化領域におけるこれらの分子の光励起・解離メカニズムの解明を目指している。25–170 eV 領域におけるパーフルオロシクロブタンの主な解離イオン種は $C_3F_5^+$と $C_2F_4^+$であるが，それらの収量は光エネルギー増加とともに大きく減少した。解離イオンの同時計測から，$C_3F_5^+$イオンは親分子から F 原子が脱離した後に生成していることが分かった。

⑥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た。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。多変量解析を用いて，水素結合パターンとそのエネルギーとの相関について明らかにした。

⑦水溶性高分子の立体規則性と溶解性の相関

Poly(*N*-isopropylacrylamide)（PNiPA）および Poly(*N*,*N*-diethylacryladmie) (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。その結果，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。ダイマーモデル化合物の水への溶解性を理論と実験の両面から調べ，立体規則性と高分子の溶解性を分子論的に明らかにした。

○発表原著論文

K. Tabayashi, T. Yamanaka, H. Namatame, and M. Taniguchi (2008) Inner-shell excitation and fragmentation of nitromethane clusters at the oxygen *K*-edge. *Adv. Synchrotron Rad.* **1**(2), 255–264.

T. Yamanaka, K. Tabayashi, T. Maruyama, C. Harada, and H. Yoshida (2009) Distinct site- and state-selective dissociation of methyl trifluoroacetate observed in core-electron excitation at the oxygen *K*-edge region. *J. Phys.: Conf. Ser.* **190,** 012149 (4 pages).

Y. Tamenori, O. Takahashi, K. Yamashita, T. Yamaguchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Gejo, and K. Honma (2009) Hydrogen bonding in acetone clusters probed by near-edge x-ray absorption fine structure spectroscopy in the carbon and oxygen *K*-edge regions. *J. Chem. Phys.* **131**(17), 174311 (9 pages).

O. Takahashi, K. Matsuyama, K. Tabayashi, and K. Yamasaki (2009) Chemical bond elongation following core-excitation of ammonia: Resonant Auger spectra calculation. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42**(24), 245102 (6 pages).

Y. Katsumoto, T. Tanaka, Y. Ozaki, and S. Hosoi (2009) Effects of dipole interaction and solvation on the C=O stretching band of *N*,*N*-dimethylacetamide in nonpolar solutions: Infrared, isotropic and anisotropic Raman measurements. *Vib. Spectrosc.* **51**, 119–124.

S. Hosoi, T. Tanaka, I. Takahashi, A. Sakushima, and Y. Katsumoto (2009) Induced circular dichroism and conformational analysis of 2,2’-binaphthyl esters derived from primary alcohols possessing a stereogenic center in the β-position. *Lett. Org. Chem.* **6**(2), (2009) 120–125.

H. Mitsuoka, S. Morita, T. Suzuki, Y. Matsuura, Y. Katsumoto, and H. Sato (2009) Optical

characterization of a hollow fiber Raman probe toward non-invasive measurements of living tissues. *Appl. Phys. Express* **2**, 027001 (3 pages).

H. Kakuda, T. Okada, M. Otsuka, Y. Katsumoto, and T. Hasegawa (2009) Multivariate analysis of DSC-XRD simultaneous measurement data: A study of multistage crystalline structure changes in a linear poly(ethylene imine) thin film. *Anal. Bioanal. Chem.* **393**(1), 367–376.

○国際会議

K. Tabayashi, T. Yamanaka, T. Maruyama, C. Harada, and H. Yoshida: Site- and state-selective dissociation of methyl trifluoroacetate observed in core-electron excitation at the oxygen *K*-edge region. The 14th International Conference on X-Ray Absorption Fine Structure (July, 2009, Camerino, Italy) (Poster)

K. Tabayashi, K. Yamamoto, T. Maruyama, K. Okada, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, T. Gejo, and K. Honma: Inner-shell excitation and fragmentation processes of acetic-acid clusters at the oxygen *K*-edge. The 14th International Conference on X-Ray Absorption Fine Structure (July, 2009, Camerino, Italy) (Poster)

K. Tabayashi, M. Chohda, T. Yamanaka, H. Yoshida, and O. Takahashi: Inner-shell excitation and fragmentation of small acetaldehyde clusters at the oxygen *K*-edge. The 11th International Symposium on Radiation Physics (Sept., 2009, Melbourne, Australia) (Poster)

K. Tabayashi, M. Chohda, T. Yamanaka, O. Takahashi, and H. Yoshida: Core-electron excitation spectra of small acetaldehyde clusters studied in the oxygen *K*-edge region. International Workshop on Electronic Spectroscopy for Gase-phase Molecules and Solid Surfaces (Oct., 2009, Sendai, Japan) (Poster)

K. Okada, M. Sakai, C. Huang, H. Yagi, H. Katayanagi, K. Mitsuke, and K. Tabayashi: Dissociative photoionization of perfluorocyclobutane. The 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (Oct., 2009, Nara, Japan) (Poster)

M. Sakai, K. Okada, and K. Tabayashi: Specific fragmentation of the K-shell excited 2-, 3-, and 4-methylpyridine molecules studied by electron impact. The 11th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (Oct., 2009, Nara, Japan) (Poster)

○国内学会

勝本之晶：立体制御された poly(*N*-isopropylacrylamide)の物理ゲル化と溶媒和。第 2 回田中豊一記念シンポジウム（2009 年 8 月，福岡）（依頼講演）

勝本之晶：振動分光法による立体制御された高分子の局所構造と溶媒和の研究。2009KIPS 若手高分子シンポジウム（2009 年 12 月，京都）（依頼講演）

久保崎範行，勝本之晶：Poly(*N*-isopropylacrylamide-co-*N*,*N*-diethylacrylamide)の水溶液中における感熱応答性と分子内水素結合。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（一般講演）

勝本之晶：振動分光法と量子化学計算による高分子の溶媒和と分子内相互作用の同定。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（一般講演）

中野慎也，小木曽貴生，中村佳征，福澤慎吾，喜多理王，新屋敷直木，八木原 晋，勝本之晶，米山 賢：立体規則性を変えたポリ(*N*-イソプロピルアクリルアミド)水溶液のゲル化点と曇り点測定および光散乱法と誘電分光法による解析。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（一般講演）

板垣裕子，中島 祐，勝本之晶，黒川孝幸，古川英光，グン剣萍：DN ゲルの強度に対する水の効果～FT-IR によるゲル－溶媒間相互作用解析。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）

（一般講演）

長谷川 健，龍田俊太郎，勝本之晶：ポリ（*N*-イソプロピルアクリルアミド）薄膜の分子間相互作用の赤外分光法による研究。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（一般講演）

下赤卓史，勝本之晶：水素結合パターンと強度の相関関係を用いた水およびメタノールの振動バンドの解析。第 32 回溶液化学シンポジウム（2009 年 11 月，新潟）（一般講演）

堤 勇樹，田林清彦，丁田 充，為則雄祐，樋口 格，鈴木 功，長岡伸一，下條竜夫，本間健二：アセトアルデヒド分子クラスターにおける C1s の内殻励起。第 23 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2010 年 1 月，姫路）（ポスター）

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：Fragmentation processes of the K-shell excited perfluorocyclobutane molecule studied with an ion–ion coincidence technique。第 25 回化学反応討論会（2009 年 6 月，大宮）（ポスター）

堺 真通，岡田和正，田林清彦：Fragmentation of 2-, 3-, and 4-methylpyridine and aniline studied by electron impact。第 25 回化学反応討論会（2009 年 6 月，大宮）（ポスター）

末光 篤，岡田和正，寺島妙美，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内殻励起パーフルオロシクロブタンの解離ダイナミクス。第 3 回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）（ポスター）

丁田 充，岡田和正，末光 篤，足立純一，柳下 明：イオン同時計測法による 3,3,3-トリフルオロプロペンの内殻励起と解離ダイナミクス。第 27 回 PF シンポジウム（2010 年 3 月，つくば）（ポスター）

中島 徹，岡田和正，丁田 充，堺 真通，片柳英樹，見附孝一郎：*cis*-ヘキサフルオロシクロブタンの光イオン化と解離。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（ポスター）

丁田 充，岡田和正，末光 篤，足立純一，柳下 明：イオン同時計測法による内殻励起 3,3,3-トリフルオロプロペンの解離ダイナミクス。日本化学会第 90 春季年会（2010 年 3 月，東大阪）（ポスター）

中野慎也，小木曽貴生，喜多理王，新屋敷直木，八木原 晋，勝本之晶：立体規則性を変えたポリ(*N*-イソプロピルアクリルアミド)水溶液のゲル化点･曇り点測定および誘電分光法による分子ダイナミクス。第 58 回高分子学会年次大会（2009 年 5 月，神戸）（ポスター）

久保崎範行，勝本之晶：Poly(*N*-isopropylacrylamide-co-*N*,*N*-diethylacrylamide)水溶液の相分離挙動に対する高分子の分子内水素結合の影響。第 58 回高分子学会年次大会（2009 年 5 月，神戸）（ポスター）

山本光恵，勝本之晶：アクリルアミド系高分子の側鎖の違いが相分離挙動に与える影響について－蛍光プローブ法による検討。第 58 回高分子学会年次大会（2009 年 5 月，神戸）（ポスター）

勝本之晶，久保崎範行，衛藤由希：アクリルアミド系高分子水溶液の相図に対する立体規則性の影響。第 58 回高分子学会年次大会（2009 年 5 月，神戸）（ポスター）

勝本之晶，久保崎範行，衛藤由希：立体規則性がアクリルアミド系高分子水溶液の相図に与える影響。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（ポスター）

山本光恵，勝本之晶：感熱応答性高分子の側鎖構造の違いが相分離挙動に与える影響について。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（ポスター）

中野慎也，喜多理王，新屋敷直木，八木原 晋，勝本之晶，米山 賢：誘電分光法による立体規則性を与えたポリ（*N*-イソプロピルアクリルアミド）水溶液のゾルーゲル転移における分子ダイナミクス。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（ポスター）

中野慎也，小木曽貴生，中村佳征，福澤慎吾，喜多理王，新屋敷直木，八木原 晋，勝本之晶，米山 賢：立体規則性を与えたポリ（*N*-イソプロピルアクリルアミド）水溶液のゲル化点・曇

り点曲線および光散乱法による分子特性解析。第 58 回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）（ポスター）

下赤卓史，勝本之晶：水素結合におけるパターンと強度の相関関係を用いた水のネットワーク構造の研究。第 3 回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）（ポスター）

勝本之晶，久保崎範行，衛藤由希：主鎖の立体配置がアクリルアミド系高分子の親水性に与える影響。第 3 回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）（ポスター）

下田直嗣，衛藤由希，勝本之晶：Poly(*N*,*N*-diethylacrylamide)の水和挙動を低分子モデル化合物を用いて解明する試み。第 32 回溶液化学シンポジウム（2009 年 11 月，新潟）（ポスター）

勝本之晶，久保崎範行，衛藤由希，下田直嗣：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。第 5 回 LSW シンポジウム（2010 年 1 月，札幌）（ポスター）

〇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	2
博士課程前期	2	11
博士課程後期	2	3
博士課程前期・後期共	0	1

〇セミナー・講演会開催実績

田林清彦，第 50 回中国四国産学連携化学フォーラム（日本化学会中国四国支部・中国四国化学と工業懇話会）（2009 年 4 月 10 日，広島大学）

〇社会活動･学外委員

・学協会役員，委員

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 (2007–2009)

岡田和正，　日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2007 年度)

・講習会・セミナー講師

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

・高大連携事業

田林清彦，　模擬授業「クラスターの化学」 (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)

・論文誌編集委員

岡田和正，　日本分光学会「分光研究」編集委員 (2003–2007 年度)

・討論会の組織委員

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会委員(2000–2001)

田林清彦，　2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2003–2004)

田林清彦，　第 44 回燃焼シンポジウム実行委員会委員 (2005–2006)

田林清彦，　第 20 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム実行委員会委員(2005–2007)
岡田和正，　2004 分子構造総合討論会実行委員会事務局 (2003–2004)
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会委員 (2005–2007)
岡田和正，　第 26 回化学反応討論会実行委員会委員 (2009–2010)
勝本之晶，　2004 分子構造総合討論会実行委員会委員 (2004)

・その他の委員

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–)

○他研究機関での講義・客員

岡田和正，　自然科学研究機構分子科学研究所，客員准教授，2007 年 4 月–2009 年 3 月

○研究助成の受け入れ状況

平成 21 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 21 年度科学研究費補助金若手研究（B），「高分子と水との相互作用に対する立体規則性の影響を分子レベルで解明する試み」代表　勝本之晶

○座長を行った学会・討論会の名称

田林清彦，　第 50 回中国四国産学連携化学フォーラム，東広島，2009 年 4 月
岡田和正，　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium，東広島，2009 年 12 月

○その他特記事項

岡田和正，　広島大学若手研究人材養成センター 研究科連絡 WG（2009 年度–）
岡田和正，　広島大学理学部化学教室創設 80 周年記念事業実行委員会委員（2009 年）
岡田和正，　第 1 回若手研究人材養成センター成果報告会，企業派遣プログラム報告～メンターから～，東広島，2010 年 3 月
堺　真通，　第 1 回若手研究人材養成センター成果報告会，架橋ポリマーの構造解析技術の確立，東広島，2010 年 3 月

量子化学研究グループ

スタッフ　相田　美砂子（教授），石橋　孝章（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。

①プロトン化水クラスターの構造と振動数：　プロトン化水クラスター$(H_3O)^+(H_2O)_{n\text{-}1}$　は，トポロジー的に異なる多様な構造をとることができる。トポロジー的に可能な水素結合パターンをすべて得るために，プロトン化水クラスターの構造を水素結合パターンによって粗視化した。小さなクラスター（n=2～4）については，すべての安定構造を得た。n=7 までのクラスターの解析から，安定構造が存在しうる制限付水素結合パターンを見出した。

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，生分解性プラスチックを分解する酵素に適用し，反応機構を明らかにした。

③蛋白質活性部位の構造予測：　新薬の開発には，ターゲットとなる蛋白質の遺伝子探索から臨床開発まで様々な段階があり，10 年以上の期間と数百億円という莫大な費用を要する。そこで，研究開発効率を挙げるために，計算機を用いた in silico 仮想スクリーニングを行う必要がある。標的蛋白質の精密な立体構造情報がない場合は，とくに理論的取り組みが重要となる。有望な薬物標的であるが立体構造が不明の G 蛋白質共役型受容体に着目し，進化計算法を用いてそのリガンド結合立体構造を求める方法を開発した。

④二重共鳴 SFG 電子励起スペクトルの自動化測定：　振動バンド毎の界面選択的な電子スペクトルである二重共鳴 SFG 電子励起スペクトの測定の効率化の為に、マルチプレックス SFG 分光装置を可視プローブ波長の自動変更が可能なように拡張した。拡張した装置では，可視プローブ光波長，前置および主分光器の設定波長，試料部でのプローブレーザーパワーおよび位置，可視プローブ光学遅延ステージ，可動式試料ステージが PC により制御される。拡張の結果、励起スペクトルの測定効率が格段に向上した。

⑤水溶液中のシランカップリング膜の振動 SFG 測定のための新規基板開発：　生体分子界面の研究において、生理学的な条件である水溶液中での測定が重要となる。シランカップリングによって作成した分子膜の水溶液中での振動 SFG 分光を可能とする新規の基板の開発を行っている。試作基板として CaF_2 基板上にシリカ層を積層したものを作製した。シリカ層の薄膜化によって，紫外から赤外わたる広い領域において透明で，シランカップリング法を適用可能な基板を開発できた。この基板を使用し基板側から紫外／可視と赤外プローブを入射すれば，赤外プローブの水による吸収の妨害を受けることなく，シリカ層上の分子膜の振動 SFG スペクトルを水中で測定することが可能になる。

○発表原著論文

M. Jieli, M. Aida (2009) Classification of OH Bonds and Infrared Spectra of the Topology-Distinct Protonated Water Clusters $H_3O^+(H_2O)_{n\text{-}1}$ ($n \leq 7$). *The Journal of Physical Chemistry A*, **113**(8), 1586-1594.

Y. Sakae, T. Matsubara, M. Aida, H. Kondo, K. Masaki, H. Iefuji (2009) ONIOM Study on the Mechanism of the Enzymatic Hydrolysis of Biodegradable Plastics. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **82**(2), 338-346.

石野 洋子，原田 隆範，相田 美砂子 (2009) 実数値 GA を用いた薬物標的 GPCR の活性型立体構造の探索. *人工知能学会論文誌*, **24**(5), 386-396.

T. Nagahara, K. Kisoda, H. Harima, M. Aida, T. Ishibashi (2009) Chiral Sum Frequency Spectroscopy of Thin Films of Porphyrin J-Aggregates. *The Journal of Physical Chemistry B*, **113** (15), 5098-5103.

○総説

石橋 孝章 (2009) 振動電子二重共鳴和周波発生分光による有機分子膜による有機分子膜の研究。レーザー研究, 37, 752-759.

○国際会議

T. Ishibashi: Vibrational and electronic structures of organic and biomolecular interfaces studied by SFG spectroscopy The 3rd Symposium on Molecular Science for Supra Functional Systems (June 2009, Tokyo, Japan) （一般講演）

T. Ishibashi: Vibrationally-Electronically Doubly-Resonant Sum-Frequency Generation Spectroscopy of Molecular Thin Films. The Division of Laser Science (DLS) of the American Physical Society (APS) 25th annual meeting (Oct. 2009, San Jose, USA) （招待講演）

T. Yamada, M. Aida: Fundamental frequency from quasi-classical direct ab initio MD: $(H_2O)_2$ and $(H_2O)_2H^+$. The 6th Nano Bio Info Chemistry Simposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima, Japan) （一般講演）

D. Akase, M. Aida: H-bond pattern of water octamer at finite temperature. The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima, Japan) （一般講演）

H. Miyamoto, M. Aida: Solvation Free Energy Change of Glycine in Aqueous Solution. The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima, Japan) （一般講演）

T. Yamada, M. Aida: Observable structures of ground and excited vibrational states from quasi-classical direct ab initio MD: di- and tri-atomic molecules. 13th International Congress of Quantum Chemistry (June.2009, Helsinki, Finland) （ポスター）

H. Miyamoto, M. Aida: Hydration free energy change and IR spectrum of glycine in aqueous solution. 13th International Congress of Quantum Chemistry (June.2009, Helsinki, Finland) （ポスター）

H. Ando, M. Aida: Theoretical study on activation free energy taking account of the width of TS region. International Symposium on “Reaction Dynamics of Many-Body Chemical Systems” (RDMCS2009) (June 2009, Kyoto, Japan)（ポスター）

D. Akase, M. Aida: H-bond pattern distribution of water cluster $(H_2O)_n$, $n \leq 8$ in finite temperature. International Symposium on “Reaction Dynamics of Many-Body Chemical Systems” (June 2009, Kyoto, Japan) （ポスター）

T. Okamoto, M. Aida: Conformation of L-ascorbic acid in aqueous solution using QM/MM-MD simulation. International Symposium on “Reaction Dynamics of Many-Body Chemical Systems” (RDMCS2009) (June 2009, Kyoto, Japan) （ポスター）

S. Mieda, M. Aida: Study of amino acid models for coarse graining of protein, 2009 CREST International Symposium on Theory and Simulations of Complex Molecular Systems & International Symposium on Theory of Molecular Structure, Function and Reactivity (July 2009, Kyoto, Japan) （ポスター）

S. Konishi, A. Padermshoke, T. Maeda, M. Ara, H. Tada, T. Ishibashi: Vibrational Sum Frequency Generation Spectroscopy of Dye Monolayers Chemisorbed on Thin Silica Layers in Aqueous Environments, The Annual Meeting of the Spectroscopical Society of Japan, (January 2010, Kyoto, Japan) （ポスター）

D. Akase, M. Aida: H-bond patterns of water clusters: thermodynamic stability and dipole moment. The 3rd International Symposium on “Molecular Theory for Real Systems” (January 2010, Kyoto, Japan)（ポスター）

○国内学会

赤瀬 大, 相田 美砂子:水クラスターアンサンブルの水素結合パターンによる理論化学的研究。第 12 回理論化学討論会（2009 年 5 月，東京）（一般講演）

赤瀬 大，相田 美砂子：水クラスターの水素結合パターンと双極子モーメント。低温科学研究所共同利用研究集会「H_2O を科学する」（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

岡本 拓也，相田 美砂子：QM/MM 法による水溶液中における分子の構造とゆらぎ。低温科学研究所共同利用研究集会「H_2O を科学する」（2009 年 9 月，札幌）（一般講演）

前田 俊樹，細井 宜伸，古川 行夫，石橋 孝章：ペリレンテトラカルボキシルジイミド誘導体の薄膜の振動電子二重共鳴 SFG 分光。第 3 回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）（一般講演）

宮本 秀範，相田 美砂子：QM/MM-MC 法によるアミノ酸-水相互作用構造。第 31 回情報化学討論会（2009 年 10 月，宇部）（一般講演）

安藤 広司，吉田 智喜，杉本 廣之，相田 美砂子：共有結合性 PPARγリガンドについての理論化学的研究。第 32 回情報化学討論会（2009 年 10 月，宇部）（一般講演）

赤瀬 大，相田 美砂子：水クラスターの水素結合パターンと双極子モーメント。第 32 回情報化学討論会（2009 年 10 月，宇部）（一般講演）

服部 菜々，相田 美砂子：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。2009 日本化学会西日本大会（2009 年 11 月，松山）（一般講演）

古田 奈穂子，相田 美砂子：タンパク質二次構造のアミノ酸配列依存性における非経験的分子軌道法による理論化学的研究。2009 日本化学会西日本大会（2009 年 11 月，松山）（一般講演）

前田 美貴，相田 美砂子：1 族と 2 族のカチオンの水和についての理論化学的研究。2009 日本化学会西日本大会（2009 年 11 月，松山）（一般講演）

三枝 俊亮，相田 美砂子：双極子―双極子相互作用に基づく粗視化によるタンパク質のMDシミュレーション。日本化学会第90春季年会（2010年3月，大阪）（一般講演）

安藤 広司, 吉田 智喜, 相田 美砂子:共有結合性リガンドの反応性についての理論化学的研究。日本化学会第90春季年会（2010年3月，大阪）（一般講演）

安藤 広司，相田 美砂子：分子の柔軟性を考慮に入れた反応における活性化自由エネルギーの算出についての理論化学的研究。第 12 回理論化学討論会（2009 年 5 月，東京）（ポスター）

岡本 拓也, 相田 美砂子:水溶液中における L-アスコルビン酸の構造に関する理論化学的研究。第 12 回理論化学討論会（2009 年 5 月，東京）（ポスター）

山田 朋範，相田 美砂子：Quasi-classical direct ab initio MD法による水クラスターおよびプロトン化水クラスターの赤外およびラマンスペクトル。第3回分子科学討論会（2009年9月，名古屋）（ポスター）

A. Padermshoke, S. Konishi, T. Maeda, M. Ara, H. Tada, T. Ishibashi: Vibrational SFG Spectroscopy of Organic Monolayers Fabricated on Silica-deposited CaF2 Substrate. 第 3 回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）（ポスター）

前田 晃宏，石橋 孝章：時間分解赤外分光法による二酸化チタン光触媒上での低級カルボン酸分解反応の研究。第3回分子科学討論会（2009年9月，名古屋）（ポスター）

坂田 修一，相田 美砂子：Quasi-classical direct ab initio MD 法を用いた柔軟な分子の構造変化の追跡。第 3 回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）（ポスター）

岡本 拓也，相田 美砂子：QM/MM-MD 法を用いた L-および D-アスコルビン酸の水和構造の比較。第 3 回分子科学討論会（2009 年 9 月，名古屋）（ポスター）

前田 俊樹，仲武 昌史，生天目 博文，谷口 雅樹，石橋 孝章：白金上のフルオレセイン誘導体単分子膜の光電子分光。第 29 回表面科学学術講演会（2009 年 10 月，東京）（ポスター）

S. Mieda, M. Aida: Study of coarse graining for prediction of interaction between protein and DNA，日本生物物理学会第 47 回年会（2009 年 10 月，徳島）（ポスター）

宮本 秀範，相田 美砂子：アミノ酸の水和自由エネルギーについての理論化学的研究。日本化学会第90春季年会（2010年3月，大阪）（ポスター）

前田 晃宏，石橋 孝章：赤外分光法を用いた二酸化チタン光触媒上でのピバル酸分解反応過程の時間分解観察。第105回触媒討論会（2010年3月，福岡）（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	3
博士課程前期	6	10
博士課程後期	5	10
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 133 回量子生命科学セミナー」（2009 年 12 月）

相田 美砂子，企業人材セミナー（第 1 回～第 6 回）（2009 年 12 月）

相田 美砂子，第 1 回広島大学若手研究人材養成シンポジウム（2009 年 12 月）

相田 美砂子，第 1 回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会（2010 年 3 月）

○社会活動･学外委員

・学協会役員，委員

相田 美砂子，日本化学会情報化学部会幹事（1996－2007）

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－）

相田 美砂子，分子科学会運営委員（2008－）

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

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

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（河内小学校）主催：東広島市　2009 年 9 月）

相田 美砂子，体験実験コーナー「リカとコンピュータ」（「おもしろワクワク化学の世界’09 広島化学展 mini 版」（2009 年 10 月，広島市こども文化科学館）

相田 美砂子，実習「分子を目で見て動かして！」（女子中高生のための科学教室（理学編）広島大学理学部）2009 年 11 月

・高大連携事業

相田 美砂子，出張講義「コンピュータで化学する」(2009 年 9 月，広島県立呉三津田高等学校)
相田 美砂子，出張講義「コンピュータで化学する」(2009 年 10 月，広島県立尾道北高等学校)

・論文誌編集委員

相田 美砂子，日本生物物理学会「生物物理」編集委員（2003－2004）

・討論会の組織委員

相田 美砂子，The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium　実行委員長　（2009 年 12 月）

〇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）

相田 美砂子，科学技術振興調整費（イノベーション創出若手研究人材養成）「地方協奏による挑戦する若手人材の養成計画」実施責任者（2009－2013）

〇研究助成の受け入れ状況

文部科学省科学研究費補助金　特定領域研究　計画研究　「溶液内反応の QM/MM-MC および MD シミュレーション」（代表：相田 美砂子）

文部科学省科学研究費補助金，特定領域研究　計画研究　「SFG分光法による有機および生体分子膜界面の電子振動状態の研究」（代表：石橋 孝章）

平成 21 年度第Ⅱ期国際学会等派遣事業，第 93 回アメリカ光学会年次大会 光学の最前線 2009／レーザー科学 25（代表：石橋 孝章）

〇受賞状況（学生）

小西 翔大（博士課程前期 1 年）平成 21 年度日本分光学会年次講演会若手ポスター賞（2009 年 11 月，東京）

赤瀬 大（博士課程前期 2 年）The Best Student Presentation Award, The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima, Japan)

山田 朋範（博士課程前期 3 年）Student Award, The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima, Japan)

〇座長を行った学会・討論会の名称

相田 美砂子，The 3rd International Symposium on Molecular Theory for Real Systems (Jan. 2010, Kyoto, Japan)

石橋 孝章, The 3rd Symposium on Molecular Science for Supra Functional Systems (June 2009, Tokyo, Japan)

石橋 孝章，The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima, Japan)

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２１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 21 年度（2009 年度）に受けた研究費等の総数を示す。

項目	分類	件数
文部科学省科学研究費補助金	特定領域研究	6
	新学術領域	1
	基盤研究(A)	1
	基盤研究(B)	8
	基盤研究(C)	5
	挑戦萌芽研究	1
	若手研究(A)	0
	若手研究(B)	2
	若手研究(スタートアップ)	0
その他の研究費（公募）		11

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～)
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）
山崎勝義，日本分光学会代議員 (2004, 2006～)
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)
山崎勝義，日本化学会中国四国支部事務局長 (2009)
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～)
高口博志，原子衝突研究協会運営幹事行事委員長 (2009～)
安倍　学，分子情報ダイナミクス研究会事務局(2005～2007)
安倍　学，分子情報ダイナミクス研究会代表(2007～)
小島聡志，有機合成化学協会中国四国支部事務局（2003～）
田林清彦，日本化学会中国四国支部事務局長 (2000)

田林清彦，日本化学会中国四国支部幹事 (2001)
田林清彦，日本化学会代議員 (2007～2009)
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～）
相田美砂子，分子科学会運営委員（2008～）
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～）
河内　敦，ケイ素化学協会理事，(2008～)
河内　敦，日本化学会中国四国支部庶務幹事

・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
山崎勝義，放送大学面接授業(集中型)講師「大気化学」(2001 年 2 月，放送大学新潟学習センター)
山崎勝義，広島大学理工フェア「サイエンス(＝科学＝理学)の魅力と楽しみ方」(2007 年 5 月，福山商工会議所)
山崎勝義，日本化学会実力養成化学スクール「化学反応論・遷移状態理論」(2007 年 8 月，日本化学会)
山崎勝義，広島大学図書館学術講演会「単行書の公開と機関リポジトリへの期待」(2007 年 10 月，広島大学図書館)
山崎勝義，中四国 6 大学による第 1 回理系大学教育に関する研究フォーラム「協調演習による理学的知力の育成支援」(2007 年 12 月，高知大学総合研究棟)
山崎勝義，図書館における学習環境提供に関する懇談会「協調演習による理学的知力の育成支援」(2008 年 2 月，広島大学図書館)
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)
山崎勝義，科学研究費補助金説明会「科学研究費補助金に採択されるためには，どのように研究計画調書を書けばよいか」(2009 年 9 月，広島大学)
高口博志，上智大学理工学部物理学科コロキウム「開殻系原子分子の衝突過程と化学反応」(2007 年 5 月，上智大学)
高口博志，第 4 回原子・分子・光科学(AMO)討論会ディスカッションリーダー (2007 年 5 月，電気通信大学)
高口博志，分子科学若手の会夏の学校講師「ラジカル分子の反応と分光の基礎」(2007 年 8 月，長良川会館)
高橋　修，情報メディア教育研究センター＆INSAM 共同企画：ハイパフォーマンスコンピューティングセミナー「数値シミュレーション技法基礎セミナー」(2007 年 9 月，広島大学情報メディア教育研究センター)
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（河内小学校）主催：東広島市，2009 年 9 月）

相田美砂子，体験実験コーナー「リカとコンピュータ」（「おもしろワクワク化学の世界'09 広島化学展 mini 版」（2009 年 10 月，広島市こども文化科学館）

相田美砂子，実習「分子を目で見て動かして！」（女子中高生のための科学教室（理学編）広島大学理学部）2009 年 11 月

安倍　学，Bowling Green State University，2009 年 4 月 1 日，Bowring Green，Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry

安倍　学，University of Cincinnati，2009 年 4 月 3 日，Cincinnati，Generation of Long-lived Singlet Diradicals and Related Chemistry

小島聡志，特色 GP・大学院 GP 合同シンポジウム，2010 年 2 月，広島大学，協調演習特色 GP 事例報告―有機化学演習

・高大連携事業

水田　勉，広島県立神辺旭高等学校　模擬授業（2009 年 10 月）

水田　勉，鳥取県立鳥取東高等学校　SSH 自然化学実験　（2009 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　（2009 年 9 月広島大学）

藤原照文，模擬授業，2005 年 10 月 26 日，廿日市（広島県立廿日市高等学校）

塚原聡，模擬授業，2009 年 9 月 17 日，出雲市（島根県立出雲高等学校）

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，2009 年 7 月，広島大学附属高等学校 SSH 事業

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，出張講義「コンピュータで化学する」（2009 年 9 月，広島県立呉三津田高等学校）

相田美砂子，出張講義「コンピュータで化学する」（2009 年 10 月，広島県立尾道北高等学校）

・ 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

水田　勉，錯体化学討論会運営委員（2006 年 10 月～）
井上克也，4rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”，組織委員長，淡路, 2009.11.15～17
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会委員（2002～2003）
藤原照文，日本分析化学会第 71 回分析化学討論会実行委員会委員（2009～2010）
藤原照文，日本化学会西日本大会実行委員会委員（2003）
藤原照文，ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員会委員（2004～）
藤原照文，日本分析化学会第 56 年会実行委員会委員（2006～2007）
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）
塚原　聡，日本分析化学会第 71 回分析化学討論会実行委員（2009～2010）
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
山崎勝義，第 18 回化学反応討論会実行委員会委員 (2002)
山崎勝義，第 26 回化学反応討論会実行委員会委員長 (2009～2010)
高口博志，第 15 回化学反応討論会実行委員会委員 (1999)
高口博志，第 14 回理論化学シンポジウム実行委員会委員 (2007)
高口博志，第 26 回化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)
高口博志，原子衝突研究協会第 35 回年会実行委員会委員長 (2009～2010)
高橋　修，第 16 回化学反応討論会実行委員会委員 (2000)
高橋　修，第 26 回化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)
山本陽介，第 11 回国際有機化学京都会議 (IKCOC-11)，2009 年 11 月，国内組織委員
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)
岡田和正，第 26 回化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)
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 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium　実行委員長（2009 年 12 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～）
灰野岳晴，広島大学図書館運営戦略会議委員（2009 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「ぶんせき」編集委員（2008～2009）
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 (2007～2009)
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 (2007～2009)
山崎勝義，高等教育研究開発センター運営委員 (2009)
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～）
岡田和正，広島大学若手研究人材養成センター 研究科連絡 WG（2009 年度～）
岡田和正，広島大学理学部化学教室創設 80 周年記念事業実行委員会委員（2009 年）
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(2009.4～)
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～）
山本陽介，組織的な若手研究者等海外派遣プログラム主担当研究者（理工農系：サステナブル社会の実現に貢献する自然科学系国際的若手研究者の育成プログラム）（2010.2～）
河内　敦，理学部教育交流会委員

・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
藤原照文，徳島大学総合科学部，非常勤講師，2009 年 4 月 6 日～2010 年 3 月 24 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

・座長を行った学会・討論会の名称

江幡孝之，4th Russian - Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 16-19, 2009, Orenburg state university, Russia)

井口佳哉，第 3 回分子科学討論会 2009 名古屋（2009 年 9 月 21 日～24 日，名古屋大学，名古屋）

井口佳哉，”The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium” (Dec. 12-13, 2009, Hiroshima)

灰野岳晴，第５回ホスト・ゲスト化学シンポジウム（2009 年 5 月，栃木）

灰野岳晴，第５８回高分子討論会（2009 年 9 月，熊本）

灰野岳晴，第２０回基礎有機化学連合討論会（2009 年 9 月，群馬）

灰野岳晴，日本化学会第９０春期年会（2010 年 3 月，大阪）

藤原照文，第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）

塚原　聡，第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）

塚原　聡，日本分析化学会第 58 年会（2009 年 9 月，札幌）

塚原　聡，第 28 回溶媒抽出討論会（2009 年 11 月，大阪府豊中市）

岡本泰明，第 70 回分析化学討論会（2009 年 5 月，和歌山）

山本陽介, 第 14 回有機金属および配位化学に関する日韓合同シンポジウム（平成 21 年 10 月，名古屋）

山本陽介，第 36 回有機典型元素化学討論会（平成 21 年 12 月，鳥取）

河内　敦，第 36 回有機典型元素化学討論会（平成 21 年 12 月，鳥取）

河内　敦，日本化学会第 90 春季年会（平成 22 年 3 月，東大阪）

安倍　学，第 5 回分子情報ダイナミクス研究会，吹田，2009 年 3 月

安倍　学，2009 年光化学討論会，桐生，2009 年 9 月

安倍　学，第 20 回基礎有機討論会，桐生，2009 年 9 月

小島聡志，第 5 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム，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８９日本化学会春季年会，船橋，2009 年 3 月

田林清彦，第 50 回中国四国産学連携化学フォーラム，東広島，2009 年 4 月

岡田和正，The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium，東広島，2009 年 12 月

相田美砂子，The 3rd International Symposium on Molecular Theory for Real Systems (Jan. 2010, Kyoto, Japan)

石橋孝章, The 3rd Symposium on Molecular Science for Supra Functional Systems (June 2009, Tokyo, Japan)

石橋孝章，　The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2009, Higashi-Hiroshima, Japan)

山崎勝義，第 25 回化学反応討論会，大宮，2009 年 6 月

高口博志，第 25 回化学反応討論会，大宮，2009 年 6 月

高口博志，日本化学会西日本大会 2009，松山，2009 年 11 月

・セミナー・講演会開催実績

相田美砂子，「第 133 回量子生命科学セミナー」（2009 年 12 月）

相田美砂子，企業人材セミナー（第 1 回～第 6 回）（2009 年 12 月）

相田美砂子，第 1 回広島大学若手研究人材養成シンポジウム（2009 年 12 月）

相田美砂子，第 1 回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会（2010 年 3 月）

田林清彦，第 50 回中国四国産学連携化学フォーラム（日本化学会中国四国支部・中国四国化

学と工業懇話会）（2009 年 4 月 10 日，広島大学）

江幡孝之，4th Russian - Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 16-19, 2009, Orenburg state university, Russia)

・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」

平賀良知，カネカテクノリサーチ（株），「天然化合物の精密構造解析に関する研究」

福原幸一，「汎用性の高い有機材料の低融点化・結晶化阻害新技術」，広島大学新技術説明会，(2009 年 5 月，東京)

福原幸一，「有機材料の低融点化・結晶化阻害技術」，広島大学共同研究中間報告会，(2009 年 10 月，大竹)

福原幸一，「汎用性の高い有機材料の低融点化・結晶化阻害新技術」，広島大学リエゾンフェア，(2009 年 11 月，広島)

福原幸一，共同研究「低粘度・低融点新規化合物を応用した潤滑油剤の開発」(2009～)

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

〇研究活動の概要
　量子生命科学プロジェクト研究センター（*Center for Quantum Life Sciences* ：QuL*i*S）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。
　平成 21 年度科学技術振興調整費「イノベーション創出若手研究人材養成」（文部科学省）として「地方協奏による挑戦する若手人材の養成計画」が採択され、活動が開始した（平成 21 年 7 月）。量子生命科学プロジェクト研究センター（QuL*i*S）は、このプロジェクトの活動母体である。「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」アドバンストコースの母体としての活動実績をふまえ、新しい分野における教育や研究を推進し、さらに若手研究人材の養成をめざしている。

〇平成 21 年度の活動の記録
《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，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。受託研究員や大学院生が一緒になって，生体系に関する研究・開発を推進している。

《２》「地方協奏による挑戦する若手人材の養成計画」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 「企業人材セミナー」の開催

第 1 回　三菱レイヨン（株）　平成 21 年 11 月 13 日（金）
第 2 回　旭化成ケミカルズ（株）　平成 21 年 11 月 16 日（月）
第 3 回　宇部興産（株）　平成 21 年 11 月 18 日（水）
第 4 回　（株）三井化学分析センター、広島ガス（株）　平成 21 年 11 月 27 日（金）
第 5 回　ナガセケムテックス（株）　平成 21 年 12 月 1 日（火）
第 6 回　マツダ（株）　平成 21 年 12 月 4 日（金）

②「量子生命科学セミナー」の開催

第 133 回 2009 年 12 月 11 日(金) 15:00～16:30　理学部小会議室(E202 室)
講演題目:　About theories and methods in computational chemistry
講演者:　Dr. Michel Dupuis　(Pacific Northwest National Laboratory)

③ The 6th Nano Bio Info Chemistry Symposium　の開催

Date:　Dec 12 (Sat) - 13 (Sun), 2009
Venue:　Reception Hall of the Faculty Club, Hiroshima University (Higashi-Hiroshima)
英語での口頭発表のみの「第 6 回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム」を開催した。
・口頭発表：22（内学生の発表数：14）
・参加者数：87 人（内学生数＝63 人）
・学生賞授与（参加者（学生を除く）の投票により決定）

The Best Student Presentation Award　3 名

Takuya Suguri “Synthesis of Iridium complexes with a Novel Pincer Type Tridentate Ligand and Application to Catalysts for Dehydrogenation of Alkanes”
Koji Machida “Synthesis and Reaction of a Benzosilagermacyclobutene Bearing o-(Fluorosilyl)Phenyl Groups
Dai Akase “H-bond pattern of water octamer at finite temperature”

Student Award　3 名

Nanase Kohno “Acceleration of the Reaction OH + CO → H + CO_2 by Vibrational Excitation of OH”
Ryoji Kusaka “Water-mediated conformer optimization in benzo-18-crown-6-ether/water system”
Tomonori Yamada “Fundamental frequency from quasi-classical direct ab initio MD: $(H_2O)_2$ and $(H_2O)_2H^+$ “

④ 理学研究科の正式授業科目として「プロテオミクス実験法・同実習」、「量子情報科学」、「計算化学演習」を集中講義として実施した。「計算化学演習」において，総合研究実験棟 6 階にある計算機（約 50 ノードの PC クラスター）を使用した。

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２２年３月１日現在）および平成２１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
	江幡　孝之	化学専攻分子構造化学講座
	梶井　克純（非常勤）	首都大学東京
	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
	福山　透（非常勤）	東京大学大学院薬学系研究科
	藤原　照文	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
	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
	池田　俊明	化学専攻分子構造化学講座
	大前　英司	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	岡本　泰明	化学専攻分子構造化学講座
	勝本　之晶	化学専攻分子反応化学講座
	久保　和幸	化学専攻分子構造化学講座
	高木　隆吉	化学専攻分子反応化学講座
	高橋　修	化学専攻分子反応化学講座
	仲　一成	化学専攻分子反応化学講座
	平賀　良知	化学専攻分子反応化学講座
	福原　幸一	化学専攻分子構造化学講座
	藤原　昌夫	数理分子生命理学専攻生命理学講座

【２】化学科の運営

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

平成２１年度　化学科長　藤原　照文
副化学科長　井上　克也
化学科長補佐　藤原　好恒

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２１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
化学実験委員	○ 井口　久保　秋田　藤原（昌） 勝本　平賀　大前
教務問題検討委員	○ 楯　岡田　田林　石橋 小島
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	○ 田林　藤原（照）　反応有機化学　反応物理化学 構造物理化学　分子生物物理　固体物性化学
当番研究グループ	分子生物物理化学グループ
安全衛生委員	○ 安倍　福原　岡本　久保 塚原　高木　高橋　河内 平賀　勝本　藤原（好）　芦田 大前
危険薬品庫管理者	水田　久保
シリンダーキャビネット室管理者	河内
就職担当	田林　H20年10月～H21年9月末 山本　H21年10月～H22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２１年度化学科在籍学生数

平成 21 年 5 月 1 日現在

入 学 年 度	在 籍 学 生 数
平成 21 年度	65(24)
平成 20 年度	64(24)
平成 19 年度	73(11)
平成 18 年度	64(14)
平成 17 年度	6(3)
平成 16 年度	6(1)
平成 15 年度	2(0)
合　　計	280(77)

（　）内は女子で内数

・チューター

入 学 年 度	チューター
平成 21 年度	藤原（照），藤原（好），秋田
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２１年度化学科開講授業科目**

科目区分	開設期	履修指定	開講科目名	担当教員名	授業のキーワード
教養	1 前	必修	教養ゼミ	藤原(照),井上,高口,安倍,福原,片柳,岡田	化学的情報の収集・整理・提供
基盤	1 前	他学科用	＊化学概説Ａ【理】	田林	原子・分子，化学結合，量子化学，熱力学，反応速度と化学平衡
基盤	1 後	他学科用	＊化学概説Ｂ【理】	井上,灰野	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、有機化学
情報	1 前	必修	情報活用演習[1 理化]	高橋	コンピュータ，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
基盤	3 前	必修	化学英語演習[3 理化]	楯,齋藤,相田	化学英語，英文読解，英作文
基盤	3 前	必修	化学英語演習[3 理化]	中島,河内,中田	化学英語
専門	3 後	選択	先端化学	藤原(照),齋藤	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	藤原(照)	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，熱力学第零-第三法則，自由エネルギー，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、波動関数
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	微視的状態と巨視的状態，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	高口	電子構造、分子軌道法、量子化学
専門	3 前	選択	物理化学演習	岡田,福原,高橋,大前,勝本	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	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	
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，生命情報学
専門	3 後	必修	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	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	有機反応機構，有機典型元素化学
専門	2 後	必修	無機化学 III	水田	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	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	2 後	必修	無機化学演習	藤原(照),秋田,塚原,岡本,水田,久保	無機化学・錯体化学・分析化学の演習
専門	2 後	必修	有機化学演習	小島,平賀,高木,池田	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	井口	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	分光学、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，クラスター，分子間相互作用，分子間エネルギー移動
専門	3 前	選択	機器分析化学	藤原(照)	分配平衡，溶媒抽出，イオン交換，クロマトグラフィー，分光分析法，電気化学分析法
専門	3 前	選択	無機固体化学	井上	固体物性、誘電・伝導・磁性体、相転移
専門	3 後	選択	有機金属化学	水田	典型元素および遷移金属の有機金属化学,１８電子則,酸化付加,還元的脱離,挿入反応,金属錯体触媒
専門	3 後	選択	放射化学	中島	放射線、放射性同位元素、化学状態、放射線計測、原子核反応
専門	2 後	選択	有機分析化学	河内	構造解析，機器分析，核磁気共鳴法（NMR），赤外分光法（IR）
専門	2 後	選択	生物構造化学	片柳	蛋白質，核酸，分光法，回折法，X 線構造解析，立体構造
専門	3 前	選択	構造有機化学	灰野	立体化学・キラリティ・立体配座・高ひずみ化合物・芳香族性・超分子化学
専門	3 前	選択	生物化学	泉	
専門	1 前	必修	基礎化学Ａ	江幡	力学、波動、電気，原子の構造、分子の構造、物質の状態
専門	1 前	必修	基礎化学Ｂ	山本	有機化学・命名法・官能基・立体化学・有機化合物の構造
専門	1 後	必修	基礎無機化学	井上	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	藤原(照)	無機化学 I
専門	2 前	必修	無機化学 II	塚原	化学量論，化学平衡，活量，酸塩基，酸化還元，錯形成，沈殿生成
専門	4 前後	必修	卒業研究	各指導教員	課題研究
		留学生用	Modern Chemistry	藤原(照),楯	
教職	3 前		化学実験Ａ	井口	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（化学科）	楯,河内,福原	人類及び社会全体にかかわる課題,生徒指導方法と技術

集中講義

化学特別講義（有機合成化学特論）　福山　透（東京大学大学院薬学系研究科/教授）
担当：有機典型元素化学グループ

化学特別講義（大気環境科学）　梶井　克純（首都大学東京/教授）
担当：有機典型元素化学グループ

・ **担当授業科目一覧**

平成 21 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	化学英語演習，量子化学，計算化学・同演習	化学演習		◎
	安倍　学	有機化学 III，反応有機化学，教養ゼミ			◎
	泉　俊輔	生体物質化学，生物化学，システムバイオロジー			◎
	井上 克也	基礎無機化学，無機固体化学，教養ゼミ，化学概説 B			◎
	江幡 孝之	基礎化学 A，分子構造化学			◎
	楯　真一	化学英語演習，生体高分子化学	総合演習（化学科）		◎
	田林 清彦	集積化学，化学概説 A			◎
	中島　覚	放射化学	化学英語演習		◎
	中田　聡	分子光化学	化学英語演習		◎
	灰野 岳晴	有機化学 II，構造有機化学，化学概説 B			◎
	藤原 照文	教養ゼミ，先端化学，機器分析化学，化学インターンシップ	無機化学演習		◎
	山﨑 勝義	物理化学 IIA，反応動力学，			◎
	山本 陽介	基礎化学 B，有機典型元素化学			◎
准教授	石橋 孝章	物理化学 IA，		○	◎
	井口 佳哉	基礎物理化学 B，化学実験 A		◎	◎
	岡田 和正	教養ゼミ，物理化学 IB，	物理化学演習，化学演習	○	◎
	片柳 克夫	教養ゼミ，生物構造化学		○	◎
	河内　敦	化学英語演習，有機化学 I，有機分析化学	総合演習（化学科）	○	◎
	高口 博志	教養ゼミ，物理化学 IIB		○	◎
	小島 聡志	基礎有機化学	有機化学演習	○	◎
	齋藤 健一	光機能化学	化学英語演習	○	◎
	塚原　聡	無機化学 II	無機化学演習	○	◎
	藤原 好恒	基礎物理化学 A		○	◎
	水田　勉	無機化学 III，有機金属化学	無機化学演習	○	◎
助教	秋田 素子		無機化学演習	○	○
	芦田 嘉之	バイオインフォマティクス		○	○
	池田 俊明		有機化学演習	○	○
	大前 英司	バイオインフォマティクス	物理化学演習	○	○
	岡本 泰明		無機化学演習	○	○
	勝本 之晶		物理化学演習	○	○
	久保 和幸		無機化学演習	○	○
	高木 隆吉		有機化学演習	○	○
	高橋　修		情報活用演習，物理化学演習	○	○
	仲　一成 [1]				
	平賀 良知		有機化学演習	○	○
	福原 幸一	教養ゼミ	物理化学演習，総合演習（化学科）	○	○
	藤原 昌夫			○	○

[1] 内地研究員

・化学プログラム履修要領

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

１　必修の授業科目は，授業科目履修表に定められた年次に修得しておくことが望ましい。未修得科目が生じた場合には,次年次の授業科目と開講時間が重なるために受講できない場合があり，留年の原因となる。
重なった場合には，未修得科目を優先して履修することが望ましい。

２　受講基準１により化学実験を履修することができない場合には，卒業が遅れることになる。この場合でも，化学実験以外の授業科目は履修することができるが，未修得の必修科目の履修を優先させなければならない。

３　教養教育科目は３年次後期(６セメスター)までに修得しておかないと,受講基準２により卒業研究が履修できない場合がある。

４　教養教育科目「領域科目」で卒業の要件として修得すべき単位（以下，卒業要件単位）にできるのは，自然科学領域以外の科目に限る。

５　教養教育科目「基盤科目」のうち数学，理科系の「概説」科目としては「物理学概説Ａ」「物理学概説Ｂ」を履修することが望ましい。「概説」科目の修得単位は，専門科目（選択）の単位に振り替えることができないが,「科目区分を問わない」科目の単位にすることができる。
　ただし,「化学概説Ａ」「化学概説Ｂ」は卒業要件単位に算入することができない。

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

７　特別講義は，一定期間に集中的に開講される講義である。
化学プログラムでは,「化学特別講義」又は「理学部他プログラムの特別講義」から，最大２単位まで専門科目(選択)として認めることができる。

８　理学部他プログラムの専門基礎及び専門科目は，８単位まで専門科目(選択)の要修得単位にできる。
なお,「理学部他プログラムの特別講義」の単位を卒業要件単位とする場合，理学部他プログラムの単位で専門科目（選択）の卒業要件単位とできる単位数は，８単位から「理学部他プログラムの特別講義」の単位数を引いた数が上限となる。

９　「科目区分を問わない」科目として６単位必要である。この６単位は，以下の科目の単位から振り替えることができる。詳細についてはチューターと相談のこと。
・自然科学領域以外の「領域科目」
・「基盤科目」の数学，理科系の「概説」科目（「化学概説Ａ，Ｂ」を除く）
・理学部他プログラムの「専門基礎科目」及び「専門科目（「特別講義」を除く）」

１０　「教職に関する科目」は，卒業要件単位に算入することができない。

・化学プログラム専門教育科目受講基準

１　化学実験(５，６セメスター)を履修するためには，各科目群において次に示す単位数以上（合計６３単位）を修得していなければならない。(括弧内の数字は，４セメスターまでに修得することになっている卒業に必要な単位数を表す。)

教養ゼミ	２単位(２)	スポーツ実習科目	２単位（２）
外国語科目	９単位(10)	基盤科目	１２単位*1(16)
情報科目	２単位(２)	専門基礎科目	２８単位(34)
パッケージ別科目	４単位(６)	科目区分を問わない科目	２単位(6)
領域科目	２単位(２)		

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

２　卒業研究(７，８セメスター)を履修するためには，各科目群において次に示す単位数以上（合計１０８単位）を修得していなければならない。(括弧内の数字は，卒業研究を除いた卒業に必要な単位数を表す。)

教養ゼミ	２単位(２)	基盤科目	１６単位(18)
外国語科目	１０単位(10)	専門基礎科目	２９単位(3５)
情報科目	２単位(２)	先端理学科目	２単位(２)
パッケージ別科目	６単位(６)	化学実験	１０単位(10)
総合科目	２単位(２)	専門科目(選択)	２１単位(23)
領域科目	２単位(２)	科目区分を問わない科目	４単位(6)
スポーツ実習科目	２単位(２)		

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

付記　この履修要領は，平成２１年度入学生から適用する。

平成２１年度新入生用化学科授業科目履修表

化学プログラム履修表

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

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

（教養教育）

区分	科目区分				要修得単位数		授業科目	単位数	履修指定	履修年次（下段の数字はセメスターを示す） 1年次 前期 1	1年次 後期 2	2年次 前期 3	2年次 後期 4	3年次 前期 5	3年次 後期 6	4年次 前期 7	4年次 後期 8
教養教育	共通科目	教養ゼミ			2		教養ゼミ	2	必修	②							
		外国語科目	英語（注1）	コミュニケーションⅠ	4		コミュニケーションⅠA	1	必修	①							
							コミュニケーションⅠB	1		①							
				コミュニケーションⅡ			コミュニケーションⅡA	1			①						
							コミュニケーションⅡB	1			①						
				コミュニケーションⅢ	2		コミュニカティブ・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・プリゼンテーション	1				○	○				
							インターミディエット・カンバセーション	1				○	○				
							メディア・リスニング	1				○	○				
							チャレンジングTOEIC(R)	1				○	○				
							上記6科目のうちから2科目2単位										
			英語以外の外国語（ドイツ語，フランス語，スペイン語，ロシア語，中国語，韓国語のうちから1言語選択）		4		ベーシック外国語Ⅰ	2	選択必修	○							
							ベーシック外国語Ⅱ	2			○						
							Ⅰ，Ⅱは同一言語を選択すること										
		情報科目			2		情報活用演習	2	必修	②							
	教養コア科目	パッケージ別科目			6		「パッケージ別科目」の1パッケージのうちから	各2	選択必修		○	○					
		総合科目			2		「総合科目」のうちから	2	選択必修			○	○				
		領域科目			2		領域科目のうちから （注2）	1または2	選択必修	○	○	○	○				
		基盤科目			18	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 前期 1	1年次 後期 2	2年次 前期 3	2年次 後期 4	3年次 前期 5	3年次 後期 6	4年次 前期 7	4年次 後期 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ＩＡ	2				②					
				物理化学ＩＢ	2				②					
				物理化学ⅡＡ	2					②				
				物理化学ⅡＢ	2					②				
				無機化学Ⅰ	2				②					
				無機化学Ⅱ	2				②					
				無機化学Ⅲ	2					②				
				有機化学Ⅰ	2				②					
				有機化学Ⅱ	2				②					
				有機化学Ⅲ	2					②				
				無機化学演習	1					①				
				有機化学演習	1					①				
				物理化学演習	1						①			
	専門科目	43	2	先端数学	2	選択必修					○			
				先端物理科学	2							○		
				先端化学	2							○		
				先端生物学	2						○			
				先端地球惑星科学	2							○		
				上記5科目の「先端理学科目」から1科目2単位										
			15以上	生物構造化学	2	選択				○				
				生体物質化学	2					○				
				有機分析化学	2					○				
				反応動力学	2						○			
				分子構造化学	2						○			
				量子化学	2						○			
				無機固体化学	2						○			
				機器分析化学	2						○			
				構造有機化学	2						○			
				生物化学	2						○			
				光機能化学	2						○			
				システムバイオロジー	2						○			
				生体高分子化学	2							○		
				分子光化学	2							○		
				集積化学	2							○		
				有機金属化学	2							○		
				放射化学	2							○		
				有機典型元素化学	2							○		
				反応有機化学	2							○		
				バイオインフォマティクス	2							○		
				計算化学・同実習	2							○		
				化学演習	1								○	
				化学インターンシップ	1						○			
				化学特別講義 （注3）							○	○	○	○
			18	化学実験	10	必修					←⑩→			
				卒業研究	8								④	④
			0～8	理学部他プログラムで開講される専門基礎科目及び専門科目の授業科目		選択	○	○	○	○	○	○	○	
	専門教育科目 小計	78												
科目区分を問わない		6		（注4）		制限付選択	○	○	○	○	○	○	○	○
合計		128												

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

（注4） 卒業要件単位数は128であるので，各科目区分の要修得単位数(教養教育科目44単位，専門教育科目78単位 合計122単位)に加えて，科目区分を問わず，さらに6単位以上修得することが必要である。
ただし，パッケージ別科目は含まれず，以下の科目の単位に限定される。詳細についてはチューターと相談のこと。
・自然科学領域以外の「領域科目」
・「基盤科目」の数学・理科系の「概説」科目（「化学概説A，B」を除く）
・理学部他プログラムの「専門基礎科目」及び「専門科目（「特別講義」を除く）」

・平成２１年度化学科卒業者進路状況

（平成 22 年 5 月 1 日現在）

（　）内は女子で内数

卒業者総数	就職者											進学	その他	
	一　般　職									教　職			研究生	その他
	公務	製造業	情報通信業	教育・学習支援業	金融・保険業	小売り・卸売業	医療・福祉	その他	小計	学校教育	小計			
60 (17)	0（0）	3（0）	1（1）	0（0）	1（1）	1（1）	0（0）	0 (0)	6 (3)	2（0）	2 (0)	48 (11)	0 (0)	4 (3)

２－３－４　卒業論文発表実績

【１】平成２１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	卒研生数	スタッフ名
化学専攻分子構造化学講座		
構造物理化学研究グループ	4	江幡，井口，福原
固体物性化学研究グループ	3	井上，秋田
錯体化学研究グループ	4	水田，久保
分析化学研究グループ	5	藤原（照），塚原，岡本
構造有機化学研究グループ	4	灰野，池田
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
反応有機化学研究グループ	5	安倍，小島，平賀，高木
集積化学研究グループ	5	田林，岡田，勝本
量子化学研究グループ	5	相田，石橋
数理分子生命理学専攻		
物理環境化学研究グループ	5	中田，藤原（好），藤原（昌）
生物化学研究グループ	5	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	0	齋藤
放射線反応化学研究グループ	0	中島
計	61	

【２】平成２１年度の卒業生と研究題目

池口　彩加	リン脂質単分子膜に対するステロイド系物質の相互作用	物理環境化学
石本　哲也	希土類イオンとキラル配位子を含むプルシアンブルー型錯体の合成と物性	固体物性化学
大下　智子	3ヵ所のゲスト包接部位を有するヘキサキスポルフィリンホストの合成研究	構造有機化学
小澤　賢伯	Front-to-Front 型の大環状４座ホスフィン２核白金錯体のポリヒドリド化反応	錯体化学
尾下　隆英	α-効果を利用した新規求核触媒の開発	反応有機化学
柏原　孝基	キラル源としてビナフチル骨格を導入したテトラキスカリックス[5]アレーンの合成研究	構造有機化学
片桐　勇志	新規レーザー蒸発法による不揮発性分子の質量分析	構造物理化学
片山　和也	水性二相系における単一 DNA 分子の形態変化の *in situ* 顕微蛍光測定	分析化学
金子　翔平	カリックス［４］アレンのアンモニアおよびメタン包接クラスターの構造研究	構造物理化学
後藤　準平	リン－炭素間に二重結合性を有する新規ホスホニウムイリド-*P*-鉄錯体の合成	錯体化学
小西　宏明	チオール化合物固定のためのシリカ基板上マレイミド膜の作製	量子化学
坂本　勇哉	新規複素環求核触媒の合成と反応	反応有機化学
篠森　直樹	液液界面におけるサフラニン O の全内部反射－光退色後蛍光回復測定と拡散係数の推算	分析化学
清水　里恵	超伝導磁石を用いた15Tesla強磁場における花粉管の磁気配向	物理環境化学
新里　達也	胃がん遺伝子産生タンパク質 RegIV の X 線解析に向けた安定な精製法の検討	分子生物物理学
末吉　愛	細胞接着因子デスモグレイン－１の結晶化に向けた調製法の確立	分子生物物理学
菅原　峻	新規な 16π 電子系を有するポルフィリン誘導体の合成、構造及びその性質	有機典型元素化学
鈴木　知佳子	新規ニトロキシドラジカルとその遷移金属錯体の合成、構造及び磁気的性質	固体物性化学
髙橋　寛史	O_3/OSC/266 nm 系で生成する振動励起 S_2 の準位選択的検出	反応物理化学
武田　智	プレゴン還元酵素の反応機構―基質特異性と反応特異性の改変	生物化学
谷　哲龍	氷及びアンモニアの光刺激脱離反応に関する理論的研究	反応物理化学
土井豆　亜希	溶液中における Poly(2-isopropyl-2-oxazoline)のコンホメーションと溶媒和挙動の研究	集積化学
堤　勇樹	炭素原子サイトからみたアセトアルデヒド分子クラスターの内殻励起スペクトル	集積化学
常峰　裕介	逆ミセル反応場におけるセリウム-ローダミン B 化学発光（CL）と新規 FI-CL 法の開発	分析化学
出口　拓磨	*o*-(フルオロシリル)フェニルメタル化合物の合成と構造	有機典型元素化学
寺本　裕一	1,8-ビス(フェニルホスフィド)ナフタレン架橋鉄２核錯体の合成と水素発生触媒能	錯体化学

土井　啓右	$I^-(CH_3I)m(H_2O)n$ クラスターの構造研究－求核置換反応機構の分子レベルでの解明に向けて－	構造物理化学
中居　大貴	液液界面近傍に発生させた定常流の流速分布の顕微測定と解析	分析化学
中垣　知幸	一重項2,2-ジアルコキシ-1,3-ジラジカルの寿命に及ぼすアルコキシ基の効果	反応有機化学
中島　徹	パーフルオロシクロブタンと *cis*-ヘキサフルオロシクロブタンの光イオン化と解離	集積化学
永原　徹也	イオン・分子反応生成物のための高感度イオン検出器の製作と評価	反応物理化学
西岡　徳真	トリス[*o*-(フルオロジメチルシリル)フェニル]ゲルミルアニオンとクロロシラン類との反応	有機典型元素化学
西田　祐	銅フタロシアニン薄膜の振動和周波分光	量子化学
西脇　和穂	軸不斉を導入した環状カルボジホスホランの電子構造とこれを配位子にもつ金錯体の合成	錯体化学
野田　奈緒美	振動励起 OH と NO の衝突素過程の速度論的研究	反応物理化学
乗松　祐輝	分子内配位子としてホスホニウムイリドを有する高配位ケイ素化合物の合成研究	有機典型元素化学
秦野　雅夫	水熱合成法による鉄（Ⅲ）－リン酸化合物の合成と物性	固体物性化学
服部　菜々	B 型 DNA における塩基間相互作用についての理論化学的研究	量子化学
花田　拓也	ピエゾ素子駆動型バルブを用いた振動・回転状態選別イオンビーム源の開発	反応物理化学
馬場　淳史	（学外秘）	物理環境化学
東　政行	メリチンのリン脂質との膜内ダイナミクス－リポソームの状態変化によるメリチンの相互作用変化	生物化学
久本　謙	Paterno-Buechi 反応の位置選択性に及ぼす水酸基の効果に関する研究	反応有機化学
藤村　恵子	磁気微小重力空間における DNA 薄膜の作製	物理環境化学
古田　奈穂子	βヘリックス構造の安定性についての非経験的分子軌道法による研究	量子化学
前田　美貴	アルカリ金属及びアルカリ土類金属カチオンの水和についての理論化学的研究	量子化学
槙ノ原　好	Poly(1-methoxy-2-propylacrylamide)の合成と物性評価	集積化学
増田　充志	クマリン誘導体はヒト白血病細胞のアポトーシスを誘導する	生物化学
増田　哲也	ペリレンビスイミドを導入したトリス（フェニルイソオキサゾリル）ベンゼンの合成	構造有機化学
松井　理恵子	クロマチンリモデリングタンパク質の構造機能制御機構の解明	分子生物物理学
松浦　正樹	ベルベノン還元酵素の反応機構－基質の疎水性度と反応速度との相関	生物化学
松本　耕太郎	π供与性基を有するかさ高い新規配位子の開発と低配位不安定化合物の合成の試み	有機典型元素化学
宮原　結実	酸化還元反応と結合した自律運動のモードスイッチング	物理環境化学
村上　晃一	（学外秘）	構造物理化学
村松　正規	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電場シミュレーションを用いた解析	分析化学

八木　真吾	2,3-ジアザビシクロ[2.2.1]ヘプト-2-エン（DBH）誘導体の脱窒素反応の立体選択性に関する研究:7 位の置換基効果	反応有機化学
山田　梨紗都	人工酸化 LDL 作製を目指した酸化 LDL 受容体タンパク質 Lox-1 とリポソームとの相互作用解析	分子生物物理学
吉岡　進	放射線被曝のトリアージ法確立を志向した尿プロテオミクス解析	生物化学
和田　侑士	NMR を用いたジヒドロ葉酸還元酵素（DHFR）の動的構造解析	分子生物物理学

２－４　その他特記事項

２－４－１　Chem サロン

Chem サロンは，いろいろな研究室の研究活動の紹介や化学関係教員・学生の交流の場を提供するために平成３年度より開始された。数理分子生命理学研究科（化学系）と共催で開催している。平成２１年度の世話人は塚原　聡准教授である。

平成２１年度の講師と題目を次にあげる。

第 75 回　　2009 年 6 月 29 日
『イオン－分子錯体の赤外分光と反応』
井口 佳哉　（化学専攻分子構造化学講座）

第 76 回　　2010 年 1 月 18 日
『放射線を用いた化学現象の研究』
中島 覚　（自然科学研究支援開発センター）

２－４－２　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

山本　陽介	（平成２１年度化学科自己点検・評価委員）
福原　幸一	（化学専攻分子構造化学講座）
久保　和幸	（化学専攻分子構造化学講座）
池田　俊明	（化学専攻分子構造化学講座）