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２２年度

（２０１０年度）

平成２３年９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 15
１－３－７　ＴＡの実績 16
１－３－８　大学院教育の国際化 16
１－４　専攻の研究活動 17
１－４－１　研究活動の概要 17
１－４－２　研究グループ別の研究活動の概要，発表論文，講演等 20
分子構造化学講座 20
構造物理化学研究グループ 20
固体物性化学研究グループ 24
錯体化学研究グループ 28
分析化学研究グループ 31
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 76
１－５－１　量子生命科学プロジェクト研究センター 76
2. 化　学　科 80
２－１　学科の理念と目標 80
２－２　学科の組織 80
２－３　学科の学士課程教育 83
２－３－１　アドミッション・ポリシーとその目標 83
２－３－２　学士課程教育の理念と達成のための具体策 83
２－３－３　学士課程教育の成果とその検証 84
２－３－４　卒業論文発表実績 94
２－４　その他特記事項 97
２－４－１　学生の表彰 97
報告書作成ワーキンググループ 98

はじめに

平成 22 年度化学専攻長
安倍　学

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22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２２年度	化学専攻長	安倍　学
	化学副専攻長	山﨑　勝義
	化学専攻長補佐	塚原　聡

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２２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	山本　安倍
人事交流委員会	安倍
教務委員	楯
評価委員	山本　安倍
安全衛生委員	◎●山﨑
広報委員	岡本＊＊
大学院委員	山本　安倍
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	安倍
教育交流委員	高口

◎は委員長　　●全学委員
＊は　任期２年（H22 年度～）
＊＊は任期２年（H21 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	山﨑　勝義	平成 21 年 4 月 1 日～
国際センター日韓共同理工系学部留学生事業実施部会委員	小島　聡志	平成 22 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	山﨑　勝義	平成 20 年 4 月 1 日～
図書館運営戦略会議	灰野　岳晴	平成 21 年 5 月 20 日～
図書館リポジトリ・アドバイザー	山﨑　勝義	平成 20 年 5 月 1 日～
情報メディア教育研究センター高度科学計算機運用専門委員会	高橋　修	平成 19 年 4 月 1 日～
安全衛生委員会	山本　陽介	平成 16 年 4 月 1 日～
安全衛生委員会　作業環境測定専門委員会	山本　陽介	平成 16 年 4 月 1 日～
	小島　聡志	平成 16 年 4 月 1 日～
安全衛生委員会　薬品管理システム専門委員会	山本　陽介	平成 16 年 4 月 1 日～
	灰野　岳晴	平成 16 年 4 月 1 日～
安全衛生委員会　東広島地区安全衛生委員会	山﨑　勝義	平成 22 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～
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 23 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	西原	禎文
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	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	岩倉	いずみ
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	宮本	江鈴子
契約一般職員	横山	悦子

平成２２年度の非常勤講師

関谷　博　　（九州大学大学院理学研究科化学部門/教授）
授業科目名：分子構造特論
担当：構造物理化学グループ
田所　誠　　（東京理科大学理学部/教授）
授業科目名：錯体物性化学
担当：固体化学グループ
石谷　治　　（東京工業大学大学院理工学研究科／教授）
授業科目名：光反応化学
担当：錯体化学グループ
梅本　宏信　　（静岡大学工学部／教授）
授業科目名：反応物理化学特論
担当：反物物理化学グループ
榊　茂好　　（京都大学大学院工学研究科/教授）
授業科目名：有機金属計算化学特論
担当：有機典型化学グループ

１－２－２　教職員の異動

平成２３年
3 月 31 日　塚原　聡　　（分子構造化学講座准教授）
大阪大学大学院理学研究科（教授）へ転出
3 月 31 日　秋田　素子　　（分子構造化学講座助教）
大阪電気通信大学工学部（准教授）へ転出

１－３　専攻の大学院教育

１－３－１　大学院教育の目標とアドミッション・ポリシー

【１】教育目標

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

（１）　化学の専門的知識を体系化して教えるとともに，他分野の基盤をもつ人材にも配慮した幅広い教育を行う。

（２）　化学分野の学際的な研究領域の拡大に応じ，他分野の研究者と交流し最先端の研究にふれることのできる教育を行う。

（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２２年度化学専攻在籍学生数

（平成 22 年 5 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 22 年度	37　(7)	3
平成 21 年度	39　(7)　{3}	3
平成 20 年度	3　(1)　[1]	8　(1)　[2]　{1}
平成 19 年度	1	2
平成 18 年度		1
平成 17 年度		1
平成 16 年度以前		1
合計	80　(15)　[1]　{3}	19　(1)　[2]　{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 22 年度生	山本・塚原	相田
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２２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							相田，江幡
	無機化学概論	2	2							水田，塚原
	有機化学概論	2	2							山本
	化学特別研究	2	6	2	6	2	6	2	6	各教員
選択	現代英語			2	2					小島
	構造物理化学	2	2							開講しない
	構造物理化学			2	2					江幡
	固体物性化学	2	2							井上・西原
	固体物性化学			2	2					井上・西原
	錯体化学	2	2							開講しない
	錯体化学			2	2					開講しない
	分析化学	2	2							開講しない
	分析化学			2	2					開講しない
	構造有機化学	2	2							灰野
	構造有機化学			2	2					灰野
	光機能化学			2	2					齋藤（自　科学研究支援開発センター）
	放射線反応化学	2	2							開講しない
	量子化学			2	2					開講しない
	集積化学	2	2							岡田
	反応物理化学	2	2							開講しない
	反応物理化学			2	2					開講しない
	反応有機化学	2	2							開講しない
	反応有機化学			2	2					開講しない
	有機典型元素化学	2	2							河内
	有機典型元素化学			2	2					山本
	計算情報化学	2	2							開講しない
	計算化学演習			2						開講しない
	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 池田
	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，平賀，高木，岩倉
	有機典型元素化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	山本，河内，小島
	集積化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	岡田，勝本
	光機能化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	齋藤(自　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　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			河内
	特別講義	反応物理化学特論（1　位，前期集中）								梅本宏信(静岡大学)
		光反応化学（1　位，後期集中）								石谷　治(東京工業大学)
		有機金属計算化学特論（1　位，後期集中）								榊　茂好(京都大学)

・平成２２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，　アリング，リス　ング，　語
構造物理化学	江幡	原子，分子の構造，電子状　，振動状　，　と発光，
固体物性化学	井上，西原	固体物性，　合物性，分子　性，分子伝　性，X 線，　現
固体物性化学	井上，西原	固体　合物性，　性，伝　性，　電性，光学物性
構造有機化学	灰野	分子化学，分子　識，機能材料化学
構造有機化学	灰野	構造有機化学，有機計算化学
光機能化学	齋藤	
集積化学	岡田	光と分子，エ　ル　ー伝達，分子間相互作用，相図
有機典型元素化学	河内	NMR による構造および速度　析，典型元素の化学
有機典型元素化学	山本	
物理化学概論	相田，江幡	分子　道法，分子動力学法，　論
無機化学概論	水田，塚原	典型元素化合物，　期性，電気化学，参加　元，電気　動
有機化学概論	山本	

・各研究グループの在籍学生数

（平成 22 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	4	0	1	0	0	0
固体物性化学研究グループ	2	6	0	0	0	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	4	0	0	3	0	0
構造有機化学研究グループ	3	2	0	0	0	0	0
光機能化学研究グループ	2	1	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	2	3	0	0	0	0	0
有機典型元素化学研究グループ	6	5	0	1	1	0	0
反応有機化学研究グループ	4	5	0	1	0	0	0
集積化学研究グループ	4	3	0	0	2	0	0
量子化学研究グループ	5	2	3	1	2	2	1
放射線反応化学研究グループ	0	1	0	0	0	0	0
計	40	39	43	5	8	2	1

・博士課程修了者の進路

（平成 22 年 5 月現在）

	修了者総数	職者							進学	研究生・補助員	ポスドク・研究員	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	38(7)	24(3)	3(0)	1(0)	28(3)	0	0	0	9(3)	0	－	1(1)
後期修 ＊	6(1)	0	0	0	0	0	2(0)	2(0)	－	0	3(0)	1(1)

（　）内は女子で内数

＊　位取得　学者を　む。

１－３－３　大学院生の国内学会発表実績

	国内学会　　数
博士課程前期(1)	８５
博士課程後期(2)	２０
博士課程前期・後期共(3)	３

(2010(H22)年度の発表について記　：2010(H22)年４月から 2011(H23)年３月まで)
(1)博士課程前期の学生が共同研究者の発表　数
(2)博士課程後期の学生が共同研究者の発表　数
(3)博士課程前期・後期の学生が共に共同研究者の発表　数

１－３－４　大学院生の国際学会発表実績

	国際学会　　数
博士課程前期(1)	３２
博士課程後期(2)	１４
博士課程前期・後期共(3)	３

(2010(H22)年度の発表について記　：2010(H22)年４月から 2011(H23)年３月まで)
(1)博士課程前期の学生が共同研究者の発表　数
(2)博士課程後期の学生が共同研究者の発表　数
(3)博士課程前期・後期の学生が共に共同研究者の発表　数

１－３－５　修士論文発表実績

有　　也	atern -B chi 二量化反応によるマクロラクトン　格の生成	反応有機化学
石部	ス　　ウムイリドを分子内　素配位子とする５配位　イ素化合物の合成研究	有機典型元素化学
	2 光子　　ーザ　　光法を用いる水素原子検出および速度論的研究への応用	反応物理化学
岡本　拓也	アス　スト表面への分子　　性についての理論化学的研究	量子化学
健一	(1)　　反応による高振動　　(3 -)の生成と振動　和の速度論的研究	反応物理化学
上	層構造を有する新　　バルト化合物の水　合成 構造　び　気的性質	固体物性化学
中　　拡	金属　びリン上に　々な置　基を有する　ー　スフィノ　ラン錯体の合成と　B 二重結合性	錯体化学
原　　子	界面における金　ロイドの動的挙動の *in situ*　　測定と　析	分析化学
河	シアノ　橋型金属錯体を用いたナノ　性体の　気的性質	固体物性化学
吉　　一	発性分子のための　ーザー　　／　ーザー分光	構造物理化学
崎　章	ル　　ル　素を配位原子とする新　三座配位子を用いた　原子価５配位　素ラジ　ル　チオン種の合成	有機典型元素化学
河野	H　　系の化学反応および振動　和速度の　H 振動　位　存性	反応物理化学
高　　向	r－ d二　錯体を　　とした高　　ドロ　スフィ　　ーション反応における　r と　d の協　的基質活性化機構	錯体化学
分　聡	速ジェット・　ーザー分光を用いたジ　ン　クラウンエーテルの　スト分子　　における分子　識の研究	構造物理化学
小　　有	環状共役エノンとフランの光［2 2］環化付加反応における立体　び位置選択性	反応有機化学
小西　　大	シリ　　基　上の化学　　有機　分子　ー水　　界面の振動和　　発生分光	量子化学
達也	キラル　スト　　による　リックス［４］ア　ーン三重ら型金属錯体の	構造有機化学
佐藤	安定有機ラジ　ル　びその　　金属錯体の合成 構造と　気的性質	固体物性化学
下田	oly(*N*-ethylacrylamide)の　水性に対する立体　　性の　を　分子　デル化合物を用いて　明する　み	集積化学
野	ロジウム錯体に対する　ル　ジ　ス　ランの　　pincer 型配位と　それに　く　　pincer 型への　格　　反応	錯体化学
光	ーフルオロシクロ　タンの内　　と　　イナミクスの研究	集積化学
光　　典	金ナノ構造体による三原色発光する　i ナノ　子の発光　強	光機能化学
田　　大志	状　ア　化合物の反応性に　　す置　基　果：　－　素-素結合開　反応	反応有機化学

田	イオン同　計測運動量画　法による内　　３３３ー トリフルオロプロ　ンの　　イナミクスの研究	集積化学
土手	集積型　(　)錯体の　晶化によるス　ン状　制	放射線反応化学
中　　孝	オキ　アルキル　をもつ化合物の特異な　物性と分子構造との相関　びその応用	構造物理化学
韓　晶	安定ポリ　化水素ラジ　ルの物性と構造に関する研究	固体物性化学
福　　一	ttempted　ynthesis o　ta le Triplet　ar enes（安定な三重項　ル　ンの合成検討）	有機典型元素化学
宏和	有機アミンと　　金属イオンからなる２次元　ロ　ス　イト型化合物のス　ン次元性に関する研究	固体物性化学
前田	スマトリクス中における開　系分子の発生とその反応挙動	反応有機化学
島　　子	外光　　分光法による N_2 クラスターイオンの構造研究	構造物理化学
﨑　　宏	ドロシリル基と　リル基をオルトフェ　　ン　格で連結した分子の合成と反応	有機典型元素化学
次	界面に　成したテトラフェ　ルポルフィナトマン　ン(　)の会合体の i*n situ*　　分光測定と　析	分析化学
保田　　孝	２つの van　oten 型配位子を有する　原子価５配位　び６配位化合物の合成と展開	有機典型元素化学
山本　　介	への加　気化　入法の特長を活用した固体　料中の　　物元素の　　定量	分析化学
吉崎　北	タングステン（　）を用いたシアノ　橋型金属錯体の構　と物性	固体物性化学
	界面に　成さ　たリン　質　分子　　における　状タン　ク質分子の　　挙動の全内部反射　　光測定	分析化学
	フリルアル　ール　　体の iels- lder 反応の選択性に関する研究	反応有機化学

１－３－６　博士学位

授　年月日を〔　〕内に記す。

山田　　範　　〔平成 22 年 9 月 27 日〕（　）
Quasi-classical direct ab initio molecular dynamics to calculate molecular mean structures and fundamental frequencies
（ uasi-classical direct a initio molecular dynamics による平　分子構造と基本　の計算）
査：相田　美砂子　教授
副査：江幡　孝之　教授，山﨑　勝義　教授

前田　俊　　〔平成 23 年 3 月 4 日〕（　）
Development of a Vibrationally-Electronically Doubly Resonant Sum-Frequency Generation Spectrometer and its Application to Aromatic Thin Films
（振動電子二重共　SFG 分光　置の開発と　　への応用）
査：石橋　孝章　　教授
副査：相田　美砂子　教授，江幡　孝之　教授，山﨑　勝義　教授

下　　〔平成 23 年 3 月 23 日〕（　）
Study on the Hydrogen-Bonding Pattern of Water and Methanol in the Liquid Phase by Infrared Spectroscopy Combined with Quantum Chemical Calculations
（　外分光法と量子化学計算による　相中における水およびメタノールの水素結合　ターン　析）
査：相田　美砂子　教授
副査：江幡　孝之　教授，山﨑　勝義　教授

Triana Widianti　　〔平成 23 年 3 月 23 日〕（　）
Synthesis of Novel Proline-based Organocatalysts and Their Application on Asymmetric Organic Reactions
（新　プロリン　　体の合成と　　有機　　としての　用）
査：安倍　学　教授
副査：山本　陽介　教授，灰野　岳晴　教授

Tamer Hamdy Adb ElSamie Hasanin〔平成 23 年 3 月 23 日〕（　）
Studies on Spectroscopic Behaviors of Fluorescent Dyes in a Reversed Micellar Medium and Their Analytical Applications
（　ミセル　　中における　光性色素の分光学的挙動とその分析的応用に関する研究）
査：藤原　照文　教授
副査：井上　克也　教授，中島　覚　教授，　　健　教授（広島大学工学研究科）

平野　　一　　〔平成 23 年 3 月 23 日〕（　）
Development of Novel Tridentate Ligands Bearing Pyridine or Pyrimidine Rings and Application to the Synthesis of Hypervalent Boron Compounds and Palladium Complexes
(　リジンまたは　リミジン環を有した新　三座配位の開発と　原子価　ウ素化合物および　ラジウム錯体合成への応用)

査：山本　陽介　教授
副査：安倍　学　教授，灰野　岳晴　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　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　の教育補助業務を行わ　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　者としてのト　ー　ングの機会を　　する。

平成 22 年度のＴＡ

名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
大	化学実	量子化学	1
安藤　広	化学実	量子化学	2
大久　幸	化学実　・情報活用演習	量子化学	6
通	化学実	集積化学	3
和明	化学実　・情報活用演習	量子化学	5
下	化学実	集積化学	3
鈴　幸	化学実	有機典型元素化学	2
Triana　idianti	化学実	反応有機化学	3
土　英男	化学実	量子化学	1
平野　一	化学実	有機典型元素化学	3
福　一	化学実	有機典型元素化学	2
前田　宏	化学実	量子化学	3
三　俊	化学実	量子化学	1
宮本　範	化学実	量子化学	3

１－３－８　大学院教育の国際化

化学専攻では国際化に対応するため，　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　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，　外に期留学している。

１－４　専攻の研究活動

１－４－１　研究活動の概要

・受賞実績

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

1992 年度 （平成 4 年度）	化学　フトウェア学会学会	吉田
1993 年度 （平成 5 年度）	50　中国文化	隆幸
1994 年度 （平成 6 年度）	日本分析化学会学会	宏
1996 年度 （平成 8 年度）	フン　ルト	秋　　哉
1997 年度 （平成 9 年度）	日本化学会 日本化学会学術	秋　　哉 谷本 能文
1998 年度 （平成 10 年度）	55　中国文化	秋　　哉
1999 年度 （平成 11 年度）	日本化学会	岩田
1999 年度 （平成 11 年度）	錯体化学研究会研究	久保 和幸
2000 年度 （平成 12 年度）	章	秋　　哉
2000 年度 （平成 12 年度）	23　有機合成化学協会 中国　国支部	小島 聡志
2004 年度 （平成 16 年度）	27　有機合成化学協会 中国　国支部	灰野 岳晴
2007 年度 （平成 19 年度）	広島大学学長	江幡 孝之
2007 年度 （平成 19 年度）	２５　日本化学会学術	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　　会フローインジェクション分析学術	藤原 照文
2007 年度 （平成 19 年度）	野副記念	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）	３１　有機合成化学協会 中国　国支部	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**

日下　良二　　26　化学反応討論会（　ストポスター　）
河野　　26　化学反応討論会（　ストポスター　）
前田　　宏　　26　化学反応討論会（　ストポスター　）
　原　　4　有機π電子系シンポジウム（　　学生ポスター　）

・　ＲＡの実績

化学専攻における研究支援体制を　実・強化し，また若手研究者の養成を　進するために，リ　ーチ・アシスタント（　）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　ることによって，その研究グループにおける研究活動を　果的に　進し，研究体制を　実さ　る。さらに，その学生に対して，若手研究者としての研究　行能力の養成を図る。

平成２２年度の　Ａ

大学院生　名	宮本　　範	所属研究グループ	量子化学
学年	3	指　教員	相田　美砂子 教授
研究プロジェクト名	アミノ　の水和自　エ　ル　ーについての理論化学的研究		

大学院生　名	鈴　　幸	所属研究グループ	有機典型元素化学
学年	2	指　教員	山本　陽介 教授
研究プロジェクト名	新　スフェランドの合成と　原子価アート錯体合成への応用		

大学院生　名	安藤　広	所属研究グループ	量子化学
学年	2	指　教員	相田　美砂子 教授
研究プロジェクト名	共有結合性リ　ンドの反応性についての理論科学的研究		

大学院生　名	Triana Widianti	所属研究グループ	反応有機化学
学年	3	指　教員	安倍　学 教授
研究プロジェクト名	新　　有機　　の開発と応用に関する研究		

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　線　　ーザー分光法と　　速分子線　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　ル　ー　和の研究を行っている。対　としている系は　　化合物，生体関連分子，　　的　　な　原子分子のクラスターである。実　と併行して量子化学計算に基づいた分子クラスターや　　化合物の構造　定，振動ス　クトルの　析を行っている。また，振動分光と　分析を併用して，　　性分子を中心に　　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２２年度の研究活動は次のとおりである。

　リックスア　ンやクラウンエーテルを　ストとした種々の　スト分子との　　化合物を速分子線中に生成し，電子ス　クトルや　外ー　外二重共　法により分子種を選別した　外ス　クトルを　測し，量子化学計算による最適化構造計算との　　から　　構造を　定した。これらの研究から，　リックスア　ンが　水性，　水性の　ちらの　スト分子とも　　に内　クラスターを　成することが分かった。一方，クラウンエーテルについて種々の　スト分子との　　化合物　成の研究を行った結果，橋　け型で水素結合する特定の　スト分子に対してクラウンエーテルが　ンフ　マー　　し安定　　錯体を　成する，つまり分子　識を　すことをいだした。さらに，　　発性の大分子量機能性分子の新　質量分析法としてこれまで行ってきた　ーザー　発／　　外イオン化質量分析法に加え，　ーザー　発／　ーザー　　光法の開発を行っている。

また井口は，日本学術振興会　　若手研究者　外　　事業の　ポートにより，２０１０年３月　９月の期間スイス・ローザン　連　工科大学の　ｉ　ｏ教授の研究グループに　在し，極　２２極子イオントラップを　用した極　　イオン分光の研究を行った。実　では，クラウンエーテルがアル　リ金属イオン，アル　リ土　金属イオン，　　金属イオンを　　した錯体をエ　クトロスプ　ー法により　　中に生成さ　，さらに極　　イオントラップ中に　　することによりその　度を 10　まで　下さ　た。この錯体に　外　ーザー，　外　ーザーを照射してその　外ス　クトル，　外ス　クトルを得た。このス　クトルを量子化学計算の結果と　　することにより，その錯体構造およびクラウンエーテルの金属イオン選択性に関する情報を得た。

オキ　アルキル　による分子間　力と反発の　　相互作用を　用した，新しい分子間相互作用による　　に　　ークで　用性の高い有機材料の新　物性改良法を開発し，特　　請した。この手法の応用を目的として　数の　業との共同研究が進行中である。

発表原　論文

Naoya Hontama, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Claude Dedonder-Lardeux, Christophe Jouvet, and Sotiris S. Xantheas (2010) ◎The structure of the Calix[4]arene-(H_2O) cluster, *world's smallest cup of water*, *J. Phys. Chem. A*. **114(9)**, 2967–2972

M. Esboui, C. Jouvet, C. Dedonder and T. Ebata (2010) Excited-State Dynamics of the 2-Hydroxypyridine−Ammonia Complex, *J. Phys. Chem. A*, **114(9)**, 3060–3066

Satoshi Kokubu, Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Takeharu Haino and Takayuki Ebata (2010) ◎Laser spectroscopic study on (dibenzo-24-crown-8-ether) -water and -methanol complexes in supersonic

jets, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12(14)**, 3559-3565

Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Sotiris S. Xantheas, and Takayuki Ebata (2010) ◎Structures and Encapsulation Motifs of Functional Molecules probed by Laser Spectroscopic and Theoretical Methods, *Sensors*, **10(4)**, 3519-3548

Takayuki Ebata, Naoya Hontama, Yoshiya Inokuchi, Takeharu Haino ◎Edoardo Aprà, and Sotiris S. Xantheas (2010) Encapsulation of Ar_n complexes by Calix[4]arene: *Endo*- vs. *exo*-complexes, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**, 4569 – 4579

Ryoji Kusaka and Takayuki Ebata (2010) Remarkable Site Difference of Vibrational Energy Relaxation in Benzene Dimer: Picosecond Time-resolved IR-UV Pump-Probe Spectroscopic Study, *Angew. Chemie Interntl. Ed.*, **122**, 7143-7146

Ryoko Matsushima, Takayuki Ebata, and Yoshiya Inokuchi (2010) ◎Formation of Semi-Covalent Bond in $[(N_2O)_nH_2O]^+$ (n = 2−7) Cluster Ions Studied by IR Spectroscopy, *J. Phys. Chem. A*, ***114*** **(42)**, 11037–11042

書および総説

Takayuki Ebata, "Dynamics of the Vibrationally Excited Molecules and Clusters Studied by IR-UV and UV-IR Double Resonance Spectroscopy", *Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy - Vol. 19*, pp. 1 - 29 (2010), edited by S H Lin, A. A. Villaeys, and Y. Fujimura, World Scientific

Takayuki Ebata, "Vibrational Energy Relaxation of XH Stretching Vibrations of Aromatic Molecules in the Electronic Excited State", *Hydrogen Bonding and Transfer in the Excited State* Vol. 1, pp. 29- 38 (2010), edited by K.L. Han, and G. Z. Zhao, Wiley-VCH, ISBN-10:0-470-666-77-3

江幡 孝之「 化合物の ーザー分光 − メ ムの分子 ルでの 明を目指して−」分光研究 56 5 pp. 220−231（2010）

国際学会での講演

T. Ebata, "Revealing the structure and dynamics of functional molecules", *Molecular and Ionic Cluster Conference 2010* (Sept. 5 - 10, 2010, Niigata) (invited)

T. Ebata, "Picosecond Time-Resolved Infrared-Ultraviolet Pump-Probe Spectroscopic Study on the Vibrational Energy Relaxation of Benzene Dimer" , *5-th Russian-Japanese Seminar : Molecular and Biophysical Magnetoscience* (Sept. 15 - 17, 2010, Russia) (invited)

T. Ebata, "Laser Spectroscopic and Theoretical Study on the Structure and Encapsulation Motif of Functional Molecules", *8th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering* (ICCMSE 2010) (Oct. 3 - 8, 2010, Greece) (Invited, keynote lecture)

T. Ebata, "Frequency and Time domain Laser Spectroscopic Study on the Molecular Complexes and Functional Molecules in the Gas Phase", *2010 International Chemical congress of Pacific Basin Societies*, Session Title: Spectroscopic Probes of Intramolecular and Intermolecular Interactions in Molecules and Molecular clusters (Dec. 15- 20, 2010, Honolulu) (Invited)

T. Ebata "Laser Spectroscopic Study on Encapsulation Structure of Functional Molecules in Supersonic jets" , 65th OSU International Symposium on Molecular Spectroscopy (June 21-25, Columbus) (Oral)

T. Ebata, "Picosecond Time-Resolved Infrared-Ultraviolet Pump-Probe Spectroscopic Study on Vibrational Energy Relaxation of Benzene Clusters", *2010 International Chemical congress of*

Pacific Basin Societies, Session Title: Frontiers of State-to State Dynamics (Dec. 15- 20, 2010, Honolulu) (Oral)

Y. Inokuchi, "Formation of Intermolecular Covalent Bonds Observed with IR Photodissociation Spectroscopy" *2010 International Chemical congress of Pacific Basin Societies*, Session Title: Spectroscopic Probes of Intramolecular and Intermolecular Interactions in Molecules and Molecular clusters. (Dec. 15- 20, 2010, Honolulu) (Poster)

国内学会（特別講演・　・　・一般講演・ポスター，　記の順に記　）

江幡孝之,「　外　外二重共　法による　イト選別した　ン　ンクラスターの振動　和の研究」（　講演），特定領域研究「分子高次系機能　明のための分子科学」　４　開シンポジウム（2010 年 11 月，　台）

井口佳哉,「極　イオントラップを用いた，　ストー　スト錯体の気相分光」（　講演），特定領域研究「分子高次系機能　明のための分子科学」若手の会シンポジウム（2010 年 11 月，　台）

学生の学会発表

「　間分　IR-UV ポンプー プロー　法による　ン　ン　イマーの振動　和の研究：　イト特異的な振動　和の発　」　４　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）　日下良二，井口佳哉，江幡孝之（口　）

「　リックス[4]ア　ンの種々の　スト分子　構造に関する研究」　４　分子科学討論会（2009 年 9 月，名古　）　金子　平，本　哉，井口佳哉，江幡孝之，Sotiris S. Xantheas（口　）

「　速ジェット　ーザー分光による　ン　１８ クラウン ６ エーテルの　スト分子　識機構の　明」　４　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）　国分　聡，日下良二，井口佳哉，江幡孝之（口　）

「I^- + CH_3I　SN_2 反応系における　的　果の研究」　４　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）　土井啓　，井口佳哉，中西隆造，　田　，江幡孝之（口　）

「　発性分子の　ーザー　発／　ーザー分光の　置開発」　４　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）　吉　一，　志，江幡孝之，井口佳哉，三　之（口　）

「$I^-(CH_3I)_m(H_2O)_n$ の　外光　ス　クトルによよ　す Ar の　果」（ポスター）　４　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）　野英二　，土井啓　，井口佳哉，江幡孝之

「　外光　分光法による N_2O を　むクラスター　チオンの　構造の研究」　３　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）　島　子，井口佳哉，江幡孝之（ポスター）

「オキ　アル　ノールアル　ン二　ジエステルの　物性」　46　測定討論会（2010 年 9 月，　）　上　一・中　孝・　谷　・中山　・福原幸一・江幡孝之（ポスター）

"Vibrational Energy relaxation of Benzene Dimer Studied by Picosecond Time-resolved Infrared-Ultraviolet Pump-Probe Spectroscopy", *65th OSU International Symposium on Molecular Spectroscopy*, Ryoji Kusaka and Takayuki Ebata (June 21-25, Columbus) (Oral)

"Development of Laser Desorption/Laser Spectroscopic System for Nonvolatile Molecules", *The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium* Ryuichi Kikkawa, Yuji Katagiri, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Hiroyuki Saigusa (Dec. 12-13, 2009, Hiroshima) (Oral)

"Laser Spectroscopic and Theoretical Study of the Structure of the Calix[4]arene Complexes, *The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium* Shouhei Kaneko, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Sotiris S. Xantheas (Dec. 4-5, 2010, Hiroshima) (Oral)

“Structures of $[(N_2O)_n(H_2O)_n]^+$ (n = 2-7) Cluster Ions Studied by Photodissociation Spectroscopy, *The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium*　Ryouko Matsushima, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata (Dec. 12-13, 2009, Hiroshima) (Oral)

“Vibrational Energy Relaxation of Benzene Dimer Studied by Picosecond Time-Resolved Infrared-Ultraviolet Pump-Probe Spectroscopic”, *2010 International Chemical congress of Pacific Basin Societies*,　Ryoji Kusaka and Takayuki Ebata (Dec. 15- 20, 2010, Honolulu) (Poster)

“Structure of Microsolvated Clusters in an S_N2 Reaction Studied by IR Photodissociation Spectroscopy : $I^-(CH_3I)_m(H_2O)_n$ (n=2-7) ”, *2010 International Chemical congress of Pacific Basin Societies*, Keisuke Doi, Takayuki Ebata, Yoshiya Inokuchi (Dec. 15- 20, 2010, Honolulu) (Poster)

学生の学会発表実績

	国際学会　　数	国内学会　　数
学部 4 年生(1)	0	1
博士課程前期(2)	4	6
博士課程後期(3)	2	1
博士課程前期・後期共(4)	0	0

セミナー・講演会開　実績

講演会開

江幡孝之：Sotiris S. Xantheas　博士（　シフィックノースウエスト国立研究所）

“The Performance of Density Functional Theory for Hydrogen Bonded Systems : Shortcomings and Solutions” 2011 年 3 月 7 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　査会専門委員　び国際事業委員会書面　査員

井口佳哉，日本分光学会学会　　集委員(2007)

福原幸一，日本　測定学会委員(2005)

学　連携実績

福原幸一，共同研究「　　度・　融点新　化合物を応用した　滑　　の開発」(2009-)

特　出願：分　オキ　アルキル　を有している化合物およびその応用・特願 2010-256887・福原幸一　他・国立大学法人広島大学　他・出願日 2010/11/17

国際共同研究・国際会議開　実績

国際会議開

江幡孝之　5th Russian - Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 15-17, 2010, Orenburg state university, Russia)

座長を行った学会・討論会の名

江幡孝之，5th Russian - Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 15-17, 2010, Orenburg state university, Russia)

井口佳哉，”The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium”　(Dec. 4-5, 2010, Hiroshima)

研究助成の受け入れ状況

江幡孝之 科学研究補助金 特定領域研究「分子高次系機能　明のための分子科学」領域「４７７」「　　外―　外二重共　法による　イト選別した　ン　ンクラスターの振動　和の研究」(20010-2011 年)（　　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　　和　化水素の求　付加・置　反応メ　　ムの　明」(代表)

福原幸一，共同研究（2009 年)「　　度・　融点新　化合物を応用した　滑　　の開発」(代表)

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-)

江幡孝之，日本学術振興会外国人研究者　期　　，Dr. Sotiris S Xantheas, Pacific Northwest National laboratory, Feb. 27- March 26, 2011, 3

井口佳哉，ローザン　連　工科大学（スイス）研究員，日本学術振興会　　若手研究者　外　事業（2010.3–2010.9）

福原幸一，　イエンス　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)，西原禎文（准教授)，秋田　素子（助教）

研究活動の概要

当研究室では新しい機能をもつ固体の　　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　を　明してきた。

協　的　重機能を有する分子　性体の構　と物性研究：キラル構造を有する　性体（キラル性体）は　　間反転対　性と　間反転対　性が同　に　れた新しい　テ　リーに属する固体とえられる。キラル　性体では２つの　リティが同　に　れていることから 特異な　気光学　果　気構造　電気　　気　果（－　　果）を　すと　えられる。　　な無機化合物でキラル構造を達成するのは　しいため 我々は分子性の設計性の　　さを　用してキラル　性体の構　とその物性研究を進めている。また　　化合物　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。

動的イオン　を　用した新　機能性分子材料の開発：　結晶内部に動的イオン　間を人　的に構　することにより　新　機能性材料の構　を目指す。　え　　イオンが　　能な大環状分子を一次元に配　さ　ることによってイオン伝　　能な　結晶材料の合成が　能となる。この　に作成した材料を用いて　その電気的　　気的評価や　的　果を評価する。次いで　得られた物性　を基に固体電池な　のデバイスへの応用を計り 新たな分子エ　クトロ　クスデバイスの構を目指した。

新　ス　ン　　ップ系の構　と化学ドー　ング：現在　　次元ス　ン　　ップ化合物の物理的・化学的研究が　　に行われている。中でも　ス　ン　　ップ化合物の一種であるス　ンラ　ー物質は一次元と二次元の中間に位置する材料であり その基　状　に興味がもたれている。加えてこの系は高　　伝　体の　体と　　した基　状　を有することから キ　リアドー　ングによる　伝　相の出現が理論的に指　されている。そこで　本研究室では分子　性体を基盤とした　次

元ス　ンラ　ー物質の作成と本系へのキ　リアドープを実現し 新種の分子性ス　ンラ　ー　伝　体の構　を目指した。

発表原　論文

Y. Kojima, K. Kato, Y. Yamamoto, K. Inoue, S. Hayami (2010) Bis(1H-imidazole-kappa N(3)){2,2 '-[propane-1,2-diylbis(nitrilomethylidyne)] diphenolato-kappa (4) O,N,N ',O '} iron(III) perchlorate (2010). *Acta Crystallographica Section E-Structure Reports Online*, **66**, M302-U3574.

Y. Kojima, K. Kato, Y. Yamamoto, K. Inoue, S. Hayami, (2010) Bis[2-(8-quinolyliminomethyl)phenolato-kappa(3)N,N ',O]iron(III) azide. *Acta Crystallographica Section E-Structure Reports Online*, **66**, M204-U1104.

IG. Bostrem, VE. Sinitsyn, AS. Ovchinnikov, Y. Hosokoshi, K. Inoue (2010) Bose-Einstein condensation of semi-hard bosons in the S=1 dimerized organic compound F(2)PNNNO. *J. Phys.-Cond. Mat.*, **22**, 036001.

S. Fukuoka, S. Yamashita, T. Yamamoto, Y. Nakazawa, H. Higashikawa, K. Inoue (2010) Heat capacity measurements of chiral and racemic molecular magnets. *Phys. B-Cond. Mat.*, **405**, S19-S22.

AA., Ovchinnikov, AS., Baranov, NV., Inoue, K., Magnetic hysteresis and domain wall dynamics in single chain magnets with antiferromagnetic interchain coupling, Bukharov (2010), *J. Phys.-Cond. Mat.*, **22**, 436003.

S. Hayami, D. Urakami, Y. Yamamoto, K. Kato, Y. Kojima, S. Nakashima, K. Inoue (2010) Spin-crossover Change from Gradual to Abrupt Types for an Iron(III) Complex. *Chem. Lett.*, **39**, 328-329.

S. Hayami, D. Urakami, Y. Kojima, H. Yoshizaki, Y. Yamamoto, K. Kato, A. Fuyuhiro, S. Kawata, K. Inoue (2010) Stabilization of Long-Lived Metastable State in Long Alkylated Spin-Crossover Cobalt(II) Compound. *Inorg. Chem.*, **49**, 1428-1432

G. X. Liu, H. Yang, W. Guo, Y. Liu, R. Y. Huang, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) Three new nickel(III) compounds based on 2-thioxo-1,3-dithiole-4,5-dithiolate: Syntheses, structures, magnetic properties and theoretical analyses. *Polyhedron*, **29**(15), 2916-2923.

G. X. Liu, Y. Y. Xu, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) New Photoluminescent Coordination Polymers Constructed from Dicarboxylate and 1,2-Bis(imidazol-1-ylmethyl)benzene. *Russ. J. Coord. Chem.*, **36**(10), 739-745.

G. X. Liu, Y. Y. Xu, X. M. Ren, S. Nishihara, R. Y. Huang (2010) Self-assembly of 3-D 4d-4f coordination frameworks based on pyridine-3,5-dicarboxylic acid: Syntheses, crystal structures and luminescence. *Inorg. Chem. Acta*, **363**(14), 3727-3732.

G. X. Liu, Y. Y. Xu, Y. Wang, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) Three zinc(II) complexes constructed from aromatic dicarboxylate and 1,4-bis((2-(pyridin-2-yl)-1H-imidazol-1-yl)methyl)benzene: Syntheses, crystal structures and luminescent properties. *Inorg. Chem. Acta*, **363**(14), 3932-3938.

T. Kanzawa, S. Nishihara, H. Nojiri, Y. Hosokoshi (2010) Stationary Behavior in Effective Magnetic Moment and Magnetization of 2,3,6-Trifluorophenyl Nitronyl Nitroxide Radical Crystals. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **83**(12), 1447-1454.

G. X. Liu, Y. Lui, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Property of a New Nickel(III) Complex Constructed from 1,2-Benezedithiolate. *Synth. React. Inprg. Met. –Org. Chem.*, **40**(6), 416-420.

G. X. Liu, H. Yang, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) A Trinuclear Cu(II) Complex from the Use of Phenyl 2-Pyridyl Ketoxime: Structure and Magnetic Behavior. *Synth. React. Inprg. Met. –Org. Chem.*, **40**(6),

421-424.

G. X. Liu, H. Xu, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) Hydrothermal Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Properties of Lithium Manganese Complex of Benzene-Hexacarboxylic Acid (Mellitic Acid). *J. Inorg. Organomet. Polymer Mat.*, **20**(3), 564-569.

G. X. Liu, Y. Liu, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) Synthesis, characterization, and crystal structures of two novel ion-pair complexes based on benzene-1,2-dithiolate ligand. *Russ. J. Coord. Chem.*, **36**(3), 226-231.

S. Nishihara, W. Doi, H. Ishibashi, Y. Hosokoshi, X. M. Ren, S. Mori (2010) Appearance of Magnetization Jumps in Magnetic Hysteresis Curves in Spinel Oxide FeV_2O_4. *J. Appl. Phy.*, **107**, 09A504-1-3.

G. X. Liu, K. Zhu, H. M. Xu, S. Nishihara, R. Y. Huang, X. M. Ren (2010) Five 3D metal-organic frameworks constructed from V-shaped polycarboxylate acids and flexible imidazole-based ligands. *CrystEngComm*, **12**(4), 1175-1185.

H. Y. Xia, G. X. Liu, S. Nishihara, Y. Wang (2010) Syntheses and Characterizations of Three Cu(II) Complexes with 2,2 '-Bipyridine-3,3'-dicarboxylate and *N*-Donor Ancillary Ligands. *J. Inorg. Organometa. Polym. Mater.*, **20**(1), 110-117.

Y. Liu, Y. Y. Xu, G. X. Liu, S. Nishihara, X. M. Ren (2010) Synthesis, Structure and Magnetic Properties of a Novel Anion-Radical Salt Based on TCNQ. *J. Inorg. Organometa. Polym. Mater.*, **20**(1), 177-181.

国際会議

Sadafumi Nishihara, Kazuhisa Kunishio, Xiao-Ming Ren, Tomoyuki Akutagawa, Takayoshi Nakamura, Motoko Akita, and Katsuya Inoue, EFFECTS OF CARRIER DOPING INTO A MOLECULAR SPIN LADDER. The 12th Intenational Comference on Moledular-Based Magnets, (October, 2010, Beijing, China)(ポスター発表)

Motoko Akita, Shoya Sato, Hiroki Kitao, Chikako Suzuki, Sadafumi Nishihara, and Katsuya Inoue, SYNTHESYS, CRYSTAL STRUVTURE AND MAGNETIC PEOPERTIES OF TRANSITION METAL COMPLEXES WITH METOXY-SUBSTITUTED PHENYLNITRONYL NITOROXISW RADICALS. The 12th Intenational Comference on Moledular-Based Magnets, (October, 2010, Beijing, China)(ポスター発表)

国内学会

西原禎文　次元分子　性体への化学ドー　ングと物性評価　日本化学会中国　国支部山口地区化学講演会「　次元無機－有機　合系と光化学」，山口，201.1.21. (　講演)

西原禎文　動的分子・イオン　構　による新　機能開拓　山学院大学物理学科　ロキウム，相　原，2010.12.10 (　講演)

西原禎文　動的分子　間構　による新　電・　性材料の開発　フューチ　ー・フェロエ　クトリック～　2　・　電体若手　の学　～，　井　，2010.8.7-8. (　講演)

和久　西原禎文　行　中　義　秋田素子　井上克也　ス　ンラ　ー構造を有する [Ph(NH3)]([18]crown-6)[Ni(dmit)2]　へのキ　リアドー　ングと電気物性評価　日本化学会　91　年会　2011.3.26-29 (一般講演)

能美　秋田素子　西原禎文　井上克也　水　法による　バルト　アミノ　錯体の合成　構造と物性　日本化学会　91　年会　2011.3.26-29 (一般講演)

北　大　秋田素子　西原禎文　井上克也　メトキシ置　フェ　ル　トロ　ル　トロキシド

金属錯体の合成 構造　び　気的性質 日本化学会　91　　年会　　2011.3.26-29 (一般講演)

今野大　　西原禎文　秋田素子　井上克也　　行　中　　義　イオンチ　　ル構造を有する $Li_2([18]crown\text{-}6)_3[Ni(dmit)_2]_2(H_2O)_4$ の構造と物性　日本化学会　91　　年会　2011.3.26-29 (一般講演)

中野　　西原禎文　秋田素子　井上克也　水素結合性分子　性体(T　)(N T B H)の作　と　気物性　日本化学会　91　　年会　　2 011.3.26-29 (ポスター発表)

学生の学会発表実績

	国際学会　　数	国内学会　　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

特　　報

特　出願：西原禎文　井上克也　今野大　　イオン伝　性結晶およびそれを用いた固体電　質，電池用セ　　ータ，電池　出願　　:2011-045176　出願日：2011.3.2.

国際共同研究・国際会議開　実績

井上克也　4rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, 組織委員長,　　, 2009.11.15-17

井上克也　キラル　性体の　気構造　明国際共同研究：ス　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　　研究　2002-

井上克也　キラル　性体の　気　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　デミー・チェルノ　フ　・固体物性研究所　　ルス　　による高速　化　程研究　2000-

井上克也　キラル　性体の　気共　国際共同研究：ロシア科学ア　デミー・チェルノ　フ　・固体物性研究所　電子ス　ン共　(ESR)研究　2002-

井上克也　　次元　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）

西原禎文：物質・デバイス領域共同研究「ス　　ル　化物　e $_{24}$ の極　　相における　気構造の　明」(2010-)

井上克也 キラル　性体の　気構造共同研究:高　度放射光施設(pring-8)　　学 東北大 2008-

井上克也　キラル　性体の物性理論：九工大　　気構造研究　2002-

井上克也　キラル　性体の　線　　化　：九工大工　自　科学研究機構ナノ支援共同研究　線　　化　研究　2005-

他研究機関での講義・　員

西原禎文，大阪　立大学大学院理学系研究科物理科学専攻，　　員准教授，2010.4.1-

研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金 基盤研究(C)　プログラム分子を用いたス　ン　間制　　西原禎文（代表）
　学連携若手研究支援プログラム　イオンチ　　ル構造を有する新　固体電　質の開発　西原禎文（代表）
物質・デバイス領域共同研究課　研究費　ス　　ル　化物 FeV2O4 の極　　相における　気構造の　明　西原禎文（代表）
材料科学研究助成金　　分子化学的手法による分子性ス　ンラ　ー構造へのキ　リアドー　ング　西原禎文（代表）
藤井研究助成基金　新　分子性ス　ンラ　ー　伝　体の　査　西原禎文（代表）

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）

研究活動の概要

金属には，d-　ロック　　金属だけでも 30 種以上の元素があり，それ　れの元素は　々に異なる電子環境を有している。したがって，　数の金属を組み合わ　るとさらに　　な性質が生まれ,広大な　開拓の組み合わ　には新しい素反応を　出　る　能性があると　えられている。しかしながら，　数の金属からなる錯体が期　する反応性を発　するためには，二つの金属の相互配置と電子環境が　い通りに整うことが重要なポイントとなる。目的とする　　錯体を合成するためには，　橋配位子が必要であり，リン配位子は，特に middle から late の　　金属に対して強く配位することが出　るため，　橋配位子に適している。　　1 のテーマではリンを　橋配位子とした反応性　　金属錯体の　出を目的としている。

2 つの金属を内　できるような大環状配位子を用いると，2 つの金属の協同　果により環内の　間に有用な反応　を構　することができる。基質に対して　数の水素分子を付加する反応を実現するため，　数の水素を　ドリドして配位さ　ることのできる金属錯体の合成を行った。大環状 4 座リン配位子に０価の　金を　入した錯体では，それ　れの　金中心に水素分子が 1 分子づつ付加し，環内に 4 つの　ドリドが　成される反応を　出した。通　の 2 座リン配位子をもつ　金のジ　ドリド錯体では，分子間で金属－金属結合　成反応が　こるため，ジ　ドリド錯体は安定に存在できないが，この反応に用いた大環状配位子は金属間が　分　れた状　で保　されるため，金属－金属結合は　成されず，　ス(ジ　ドリド)錯体を安定に　測することが出　た。

ナフタ　ンの１８位を h － h に連結さ　たジ　スフィンには，各リン上の h 基の配向により，ナフタ　ン平面に対して 2 つの h 基が同じ　に位置した *cis* 体と反対　に位置した *trans* 体が生成する。　的には h 基間に立体反発の無い *trans* 体が安定であるが，　光を照射することにより *cis* 体へ異性化さ　ることが出　ることを　出した。　重結合の光による異性化は数　くの研究　があるが，リン　リン　結合をもつ環状 5 員環での光異性化を　めて　出すことが出　た。

２のテーマでは，金属と典型元素とが協　的に基質と相互作用する反応の開発を目指した。高　期典型元素を　む　重結合性化合物は反応性に富み，　　に　量化や付加反応，メタセシス反応な　を　こす。このような活性　重結合を有する化合物を，反応性配位子として　　金属に　入することによって，金属と配位子とが協　的に作用した，新　な反応が期　できる。そこで，　B，　，　N な　の活性部位を有する種々の配位子を設計し，その　　金属錯体の合成，構造，反応生性の検討を行っている。

1. リンと　ウ素との間に二重結合性を有する　スフィノ　ラン配位子を種々合成し,その　錯

体の合成を検討した。リン上の置　基や　上の配位子が，　スフィノ　ラン配位子の構造や反応性に　　す　　を，各種ス　クトル並びに結晶構造　析や分子　道計算等を用いて　　に調べた。

2.　　ルリンイリド構造を有する　キ　フェ　ル　ル　ジ　ス　ラン（ h_3 －－ h_3　以下，　）を基本　格とする，種々の　座，二座，三座配位錯体の合成に成　した。また，　　の機能化についても種々検討し，新　な光学活性　　と，その　　金属錯体の開発に成　した。さらに，　　のリン－　素結合の開　を　った　格　　反応を　出し，有機金属錯体合成における新　な 1　　としての　　の　能性を　出した。

発表原　論文

T. Mizuta (2010) Syntheses, Structures, and Properties of Cyclic Ferrocenophosphine Mono-, Di-, and Trimer(($C_5H_4FeC_5H_4PR)_n$ n = 1-3). *Bulletin of Japan Society of Coordination Chemistry*, 56, 2-13.

書

中　　，小　田　　，上野　　，岡崎　明，河野泰　，　　之，水田　勉　共　：錯体化学選書６　有機金属化学，三共出　，pp. 210-222, 2010

国際学会

T. Mizuta: 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-Octine. 24th International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2010) Pre-Symposium on Organometallic Chemistry (July, 2010, Taipei, Rep. of China)（　　講演）

Y. Koro, T. Mizuta: Syntheses of Zr-Pd heterobinuclear complexes having two or three $OPPh_2$ bridges,　difference in reactivity toward diphenylvinylphosphine oxide　. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec., 2010, Higashi-Hiroshima, Japan)　(一般講演)

Y. Kouro, C. Miyaji, K. Kubo, T. Mizuta: K. Miyoshi: Hydrophosphinylation of $Ph_2P(O)CH{=}CH_2$ with $Ph_2P(O)H$ Catalyzed by Zr-Pd Heterobinuclear Complex. 24th International Conference on Organometallic Chemistry (July, 2010, Taipei, Rep. of China)（ポスター）

M. Ozawa, K. Kubo, T. Mizuta: Synthesis of Tetrahydridodiplatinum Complex Bound in Enlarged Tetraphosphamacrocycle: Two Diphosphine Platinum Units Linked in Front to Front Style. 24th International Conference on Organometallic Chemistry (July, 2010, Taipei, Rep. of China)（ポスター）

Y. Teramoto, K. Kubo, T. Mizuta: P-P Bond Cleavage of 1,2-diphosphaacenaphthene by Iron(0) Complexes. 24th International Conference on Organometallic Chemistry (July, 2010, Taipei, Rep. of China)（ポスター）

K. Nishiwaki, A. Yoshida, K. Kubo, T. Mizuta, R. G. Cavell, K. Miyoshi: Syntheses and Structures of Platinum and Gold Complexes Having a Chiral Carbodiphosphorane Ligand. 60th Anniversary Conference on Coordination Chemistry in OSAKA, JAPAN (September, 2010, Osaka, Japan)（ポスター）

国内学会

久保和幸：IV 価　, II 価　いいえ, 0 価です　　リンで安定化された 0 価　素の　　金属錯体。錯体化学研究会中国　国地区　３　研究会（2010 年 4 月，岡山）（　　講演）

野　，久保和幸，水田勉，Cavell, Ronald G.，三吉克　：ロジウム錯体における　キ　フェ　ル　ル　ジ　ス　ランのオルトメタル化とそれに　く　格　　反応の制　。　60　錯体化学

討論会（2010 年 9 月，大阪　）（一般講演）
寺本　一，久保和幸，水田勉：1,8-　ス(フェ　ル　スフィド)ナフタ　ン　橋　二　錯体の合成と水素発生　　能。　60　錯体化学討論会（2010 年 9 月，大阪　）（一般講演）
小　　，久保和幸，水田勉：BH_3 と　スフィンとの付加体　成を　用した　金　ドリド錯体の合成。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　　）（一般講演）
中　拡，　岡正　，久保和幸，水田勉，三吉克　：リン上に　錯体フラグメントを有するスフィノ　ランの構造と反応性。　60　錯体化学討論会（2010 年 9 月，大阪　）（ポスター）

学生の学会発表実績

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

セミナー・講演会開　実績
日　：平成 22 年 11 月 16 日(　)
所：理学部　E002　室
講　：石谷治教授（東京工業大学大学院・理工学研究科）
演　：金属錯体を中　とした人工光合成系の構

社会活動・学外委員
・学協会役員，委員
日本化学会　　中国　国支部　務幹事　2005 年 3 月－2006 年 2 月
日本化学会　　中国　国支部会計幹事　2006 年 3 月－2007 年 2 月
錯体化学会　　理事　　2006 年 10 月－2008 年 9 月
錯体化学会　　錯体化学討論会運営委員　2006 年 10 月～
錯体化学会　　56　錯体化学討論会広島実行委員　2006年
・高大連携事業
水田　勉　　取　立　取東高等学　　SSH 自　化学実　　（2010 年 9 月広島大学）
久保和幸　　取　立　取東高等学　　SSH 自　化学実　　（2010 年 9 月広島大学）

研究助成の受け入れ状況
科学研究費補助金 基盤研究(C) 「2 つの金属を内　したリンマクロ　イクルを　用する二　化　素の　元反応　代表　水田　勉
科学研究費補助金 基盤研究(C) 「高機能性　　金属錯体の構　を目指した新型　素系配位子の開発」　代表　久保和幸

座長を行った学会・討論会の名
水田　勉：　60　錯体化学討論会（2010 年 9 月，大阪　）

分析化学研究グループ

藤原　照文（教授），塚原　聡（准教授），岡本　泰明（助教）

研究活動の概要

年，ナノテクノロジーの　しい発展とともに，種々の異相界面を対　とする先端的な研究分野において，ナノメートル　イ　の　小域，　え　ナノ界面　における化学種の相互作用に関する情報を得る方法論が重要となっており，ナノ　小域の計測技術に関する研究，　びその特異性を活用した新　な分　・検出法の開発が　　に　し進められている。また，　小域の　　が有する特異な構造や性質の本質はあまり　明されておらず，　　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　小域における特異な反応性の本質の　明と外　による制　，分　法　び原子･分子ス　クトルによる新　な　　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 22 年度の研究成果を以下に　げる。

１．ナノ　小域における特異な反応性と外　による制　　び分　法に関する研究

(a)　ミセルメディア化学発光(CL)反応とフロー分析法 : イオン　体を用いたロジウム(III)の出法を　ミセルメディア CL 検出法と組み合わ　，フローインジェクション法を用いて水　中のロジウムを CL 定量する方法を開発する目的で，CTAC　ミセルのナノ界面　でのルミノール CL 反応におけるロジウム(III)の　　作用に対するイオン　体の　　を明らかにし，その CL 定量法の最適化を行った。また，当研究グループにて新たに　いだした CTAC　ミセル中でのロー　ミン B－セリウム(IV)系 CL について，ストップトフロー法を用いてロー　ミン B の　　ス　クトル　化を　測するとともに，　光ス　クトルおよび ESR 測定なを行い，その反応機構を明らかにした。

( ) シリ　表面への　ミセルの　　挙動に関する研究:　光色素であるフルオ　セインを CTAC　ミセル内にプロー　として分　さ　，　　光測定　置を用いて，　ミセルが石英　ラスセルの表面に　　する挙動を　測し，CTAC　度，水と CTAC の　ル　度　およびバルク　　組成な　の　　を明らかにした。また，　ミセルの　　によるシリ　表面でのナノ界面　　成の機構について　　した。

(c)　　界面に　成したリン　質　分子　に対する　一タン　ク質分子の　　挙動 : アル　ン／水界面に　成したリン　質　分子　に対する　一タン　ク質分子（リ　チーム）の挙動を，全内部反射　ーザー　　光　　法によって計測した。その結果，リ　チームは，　　的な　　を　し，　い　間（数　ミリ　）リン　質　分子　上に留まることが明らかになった。

(d)　　界面を通　する　一 DNA の in situ　　光測定 : 水性二相系の　水相／　水相の界面を，高　度 CCD　メラを備えた　立　　で　　することにより，　一 DNA の界面　動　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　　を　化さ　ていることが　り，それが　　和と深いつながりがあることを　出した。

２．電気加　気化　　結合プラ　マ原子ス　クトル分析

ーロッ　連合において施行されている RoHS 指　（電気電子機　における特定有害物質の　用制　指　）によって　用が制　されている　素系　　，環境　ル　ンと　定されているテトラ　ロ　　スフェノールＡな　，　に性能向上の目的でプラスチック中に　加されていたこのような　素系有機物に対して，　　の　光 X 線分析法より高　度かつ　　な　作の　素のスクリー　ング分析法が求められている。そこで，メタル　加　気化　入法を用いた ICP－MS によるプラスチック中の　　素の　・　速定量法を開発した。本法によれ　，わずか 2～3 mg の　料量で　分測定　能で，かつ検出　度も　　ppb　　ルの　素が検出できる。　法より数　程度は　度が向上した。

発表原　論文

S. Tsukahara, M. Yamasaki, T. Fujiwara (2010) ◎Microscopic Imaging of Fluorescence Anisotropy of Rhodamine B at the Free and Surfactant-Modified Toluene/Water Interfaces Excited under Total Internal Reflection Conditions. *Solv. Extr. Res. Develop. Jpn.*, **17**, 163-174.

Y. Okamoto, H. Komori, H. Kataoka, S. Tsukahara, T. Fujiwara (2010) ◎Direct Determination of Bromine in Plastics by Electrothermal Vaporization/Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry Using a Tungsten Boat Furnace Vaporizer and an Exchangeable Sample Cuvette System. *Rapid Commun. Mass Spectrom*, **24**(9), 1265-1270.

T. H. A. Hasanin, S. Tsukahara, T. Fujiwara (2010) ◎Acid-Base Behavior of Rhodamine B in a Reversed Micellar Medium of Cetyltrimethylammonium Chloride in 1-Hexanol–Cyclohexane/Water. *Anal. Sci.*, **26**(12), 1247-1254.

国際会議

T. Hasanin, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Spectral Properties of Fluorescein in a Reversed Micellar Medium of Cetyltrimethylammonium Chloride in 1-Hexanol−Cyclohexane and Its Analytical Application. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec., 2010, Higashi-Hiroshima, Japan) (一般講演)

T. Hasanin, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Spectroscopic study of acid-base ionization and tautomerism of fluorescent dyes in a reversed micellar solution of cetyltrimethylammonium chloride in 1-hexanol–cyclohexane, 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010), (Dec., 2010, Honolulu, Hawaii, USA) （一般講演）

Y. Tsunemine, T. Hasanin, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Chemiluminescence of Cerium(IV)–Rhodamine B system in a reversed micellar medium of cetylmethyl- ammonium chloride in 1-hexanol–cyclohexane and invention of new flow-injection analysis, 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010), (Dec., 2010, Honolulu, Hawaii, USA) （ポスター発表）

国内学会

，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　界面に生成したリン　質　分子　における リ　チーム分子の動的挙動の　光測定と　析。 71　分析化学討論会(2010 年 5 月，　江）（一般講演）

介，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　ミセル反応　におけるセリウムーロー　ミン化学発光（CL）と新　FI-CL 法の開発。 71　分析化学討論会（2010 年 5 月，　江）（一般講演）

，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：リン　質　分子　を　成さ　た　界面に対するタン　ク質の　挙動の全内部反射　光測定。日本分析化学会　59 年会(2010 年 9 月，　台）（一般講演）

中　大　，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：界面　に発生さ　た定　流の流速分　の　測定と　析。日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）（一般講演）

山本　介，藤崎　子，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：固体　料中の　加　気化　入　質量分析法によるプラスチック中の　物元素の定量。日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）（一般講演）

山和也，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：水性二相系を用いた　一　N　分子の　出挙動の in situ　光測定。日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）（一般講演）

，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　界面における　光色素分子の全内部反射ー光

色後　光　　の　　測定。日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）（一般講演）

次，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　　界面に　　したマン　ン（　）ポルフィリン錯体の会合体の in situ　　光測定と　析。日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）（一般講演）

原　　子，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　　界面における金ナノロッドの動的挙動の in situ　　測定。日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）（一般講演）

介，T. Hasanin，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：　ミセル内水相でのセリウム-ローミン　化学発光反応のストップトフロー法による　析。2010 年日本化学会西日本大会（2010 年 11 月，　本）（一般講演）

次，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　　界面に　成したテトラフェ　ルポルフィナトマン　ン（　）の会合体の in stiu　　分光測定と　析。平成 22 年度広島地区分析技術講演会（2011 年 3 月　東広島）（一般講演）

，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：メタル　加　気化　入-　　発光分析法による金合金　料の　　分析のための基礎的検討。　71　分析化学討論会（2010 年 5 月，　江）（ポスター発表）

次，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　　界面に　　したマン　ン（　）ポルフィリン錯体の会合体の in situ　　分光測定。　16　中国　国支部分析化学若手セミナー（2010 年 7 月，　　佐用　）（ポスター発表）

山和也，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：水性二相系における　一　N　分子の　　化の in situ　　光測定。　16　中国　国支部分析化学若手セミナー（2010 年 7 月，　佐用　）（ポスター発表）

介，T. Hasanin，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：新　　-　法の開発を目的としたミセル反応　におけるセリウムーロー　ミン B 化学発光（　）の最適化。　16　中国　国支部分析化学若手セミナー（2010 年 7 月，　　佐用　）（ポスター発表）

井　，　　，岡本泰明，塚原　聡，藤原照文：　ロ　ン化物生成ーメタル　加　気化入ー　　発光分析法によるス　ンジウムの定量分析。日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）（ポスター発表）

山和也，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：水性二相系における　一　N　分子の相間　動の in situ　　光測定。　29　日本　　出討論会（2010 年 11 月　東広島）（ポスター発表）

，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　　界面におけるロー　ミン　の全内部反射ー光　色後　光　　の　　測定。　29　日本　　出討論会（2010 年 11 月　東広島）（ポスター発表）

，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：リン　質　分子　を　成さ　た　　界面に対するリ　チーム分子の　　挙動の全内部反射　　光測定。　29　日本　　出討論会（2010 年 11 月　東広島）（ポスター発表）

次，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　　界面に　成したテトラフェ　ルポルフィリン（　）の会合体の in situ　　分光測定。　29　日本　　出討論会（2010 年 11 月　東広島）（ポスター発表）

原　　子，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：　　界面における金　ロイドの動的挙動の in situ　　測定。　29　日本　　出討論会（2010 年 11 月　東広島）（ポスター発表）

中　大　，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：界面　　に発生さ　た層流の速度分　の　　光測定と　析。　29　日本　　出討論会（2010 年 11 月　東広島）（ポスター発表）

山和也，塚原　聡，岡本泰明，藤原照文：水性二相系における　一　N　分子の　　化の

in situ　　光測定。　33　　化学シンポジウム（2010 年 11 月　京都）（ポスター発表）

学生の学会発表実績

	国際学会　　数	国内学会　　数
学部 4 年生(1)		1
博士課程前期(2)		21
博士課程後期(3)	2	
博士課程前期・後期共(4)	1	2

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　国支部西日本大会幹事（2003）
藤原照文，日本化学会，中国　国支部　務幹事（2004）
藤原照文，日本化学会，中国　国支部事務　長（2007）
藤原照文，日本化学会，中国　国支部地区幹事（2008）
藤原照文，日本分析化学会，中国　国支部　務幹事（1989～2005）
藤原照文，日本分析化学会，中国　国支部　任幹事（2006～）
藤原照文，日本　　協会，評議員（2005～2006）
塚原　聡，日本分析化学会　　支部幹事（1999，2002～2003）
塚原　聡，日本分析化学会　　支部　任幹事（2000～2001）
塚原　聡，日本分析化学会若手交流会　　支部委員（2001～2002）
塚原　聡，日本　　出学会理事（2004～）
塚原　聡，日本分析化学会中国　国支部　務幹事（2005～）

・高大連携事業

藤原照文，　　授業，2005 年 10 月，広島　立　日　高等学　（　日　）
塚原　聡，　　授業，2009 年 9 月 17 日，出　　（島　　立出　高等学　）

・論文　　集委員

藤原照文，日本分析化学会，「分析化学」　　集委員（2003～2004）
塚原　聡，日本　　出学会，「Solv. Extr. Res. Devel. Jpn.」　　集委員（2007～）

・討論会の組織委員

藤原照文，日本分析化学会　64　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　71　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　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　56 年会実行委員会委員（2006～2007）
塚原　聡，日本分析化学会　63　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　56 年会実行委員（2006～2007）
塚原　聡，日本分析化学会　71　分析化学討論会実行委員会委員（2009～2010）
塚原　聡，　29　日本　　出討論会実行委員長（2010）

・その他の委員

藤原照文，日本分析化学会中国　国支部　37　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　国支部　42　分析化学講習会実行委員（2005）
藤原照文，日本分析化学会中国　国支部　47　分析化学講習会実行委員（2010）
塚原　聡，日本分析化学会中国　国支部　42　分析化学講習会実行委員（2005）
塚原　聡，日本分析化学会会　「ぶ　　き」　集委員（2008～2009）
塚原　聡，日本分析化学会中国　国支部　47　分析化学講習会実行委員（2010）
岡本泰明，日本分析化学会中国　国支部　42　分析化学講習会実行委員（2005）
岡本泰明，日本分析化学会中国　国支部　47　分析化学講習会実行委員（2010）

国際共同研究・国際会議開　実績
藤原照文, The 15th International Conference of Flow Injection Analysis (ICFIA 2008) 組織委員（2008）

研究助成の受け入れ状況
理学部学術研究助成金（委任　理金）三井化学　　会社「工程管理における　量金属　び　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　プロー　を用いる　　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　　子の分　とその構成元素の　元素同　定量」　代表者　岡本泰明

受　状況（学生）
　　次(M2)，平成 22 年度日本分析化学会中国　国支部分析化学若手セミナー（ポスター発表）　　「　界面に　　したマン　ン（　）ポルフィリン錯体の会合体の in situ　　分光測定」（2010）

座長を行った学会・討論会の名
藤原照文，　71　分析化学討論会（2010 年 5 月，　江）
藤原照文，日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）
塚原　聡，　71　分析化学討論会（2010 年 5 月，　江）
塚原　聡，日本分析化学会　59 年会（2010 年 9 月，　台）
塚原　聡，　29　日本　　出討論会（2010 年 11 月，東広島）
岡本泰明，　71　分析化学討論会（2010 年 5 月，　江）

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　成される　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　す　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。

2010 年度の研究成果の概要を以下に　す。

1. トリスフェ　ルイ　オキ　　リル　ン　ンを基盤とした積層型ら　　集合体に　光色素として　リ　ン　スイミドを　入した系で，　度・　　の　化によって　　な光　調を　すことを明らかにした。また，　端に水素結合部位を　入することで　ス　リジンとの二成分　合による集積構造の　化に成　した。
2. 　リックス[5]ア　ーンとフラー　ンの　スト　　スト相互作用を　用してポリフェ　ルアセチ　ンの　橋に成　した。これにより，ポリフェ　ルアセチ　ンの配向を制　することができた。
3. ク　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　　なスト分子と　スト　　スト錯体を　成するという相互作用を　用し，電　　化　元による構造制　を行った。ポルフィリンを　化することにより，　スト　　スト錯体が　　することを　出した。

発表原　論文

T. Haino, E. Hirai, Y. Fujiwara, and K. Kashihara (2010)　Supramolecular Cross-Linking of [60]Fullerene-Tagged Polyphenyl-acetylene by the Host-Guest Interaction of Calix[5]arene and [60]Fullerene. *Angewandte Chemie International Edition,* **49**(43), 7899-7903.

H. Iwamoto, Y. Yawata, Y. Fukazawa, and T. Haino (2010) Highly Efficient Synthesis of [3]Rotaxane assisted by Preorganization of Pseudorotaxane using Bis(crown ether)s. *Supramolecular Chemistry, Special Issue,* **22**(11-12), 815-826.

T. Haino, and H. Saito (2010) Photoresponsive Organogel Based on Supermolecular Assembly of Tris(phenylisoxazolyl)benzene. *Australian Journal of Chemistry,* **63**(4), 640-645.

H. Iwamoto, Y. Yawata, Y. Fukazawa, and T. Haino (2010) Tether-assisted Synthesis of [3]Rotaxane by Olefin Metathesis. *Chemistry Letters,* **39**(1), 24-25.

S. Kokubu, R. Kusaka, Y. Inokuchi, T. Haino, and T. Ebata (2010) ◎Laser spectroscopic study on (dibenzo-24-crown-8-ether)-water and -methanol complexes in supersonic jets. *Physical Chemistry Chemical Physics,* **12**(14), 3559-3565.

T. Ebata, N. Hontama, Y. Inokuchi, T. Haino, E. Apra, and S. S. Xantheas (2010) ◎Encapsulation of Ar-n complexes by calix[4]arene: endo- vs. exo-complexes. *Physical Chemistry Chemical Physics,* **12**(18), 4569-4579.

J. H. Heo, T. Ikeda, J. M. Lim, N. Aratani, A. Osuka, and D. Kim (2010) Molecular-Shape-Dependent Photophysical Properties of *meso-β* Doubly Linked Zn(II) Porphyrin Arrays and Their Indene-Fused Analogues, *Journal of Physical Chemistry B*, **114**(45), 14528-14536.

総説

池田俊明，灰野岳晴 (2010) ◎重合構造をデザインする　分子ポリマー–　ふくらむ次　代高分子材料。化学, **65**(2), 68-69.

国際会議

T. Haino: Supramolecular Assembly Driven by Molecular Recognition. The Sixth

International Symposium on Integrated Synthesis (ISIS-6) (Oct., 2010, Hyogo, Japan)（講演）

T. Haino: Molecular-recognition-directed supramolecular polymerization. 6th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON HIGH-TECH POLYMER MATERIALS (HTPM-VI) (Nov., 2010, Fujian, China)（　講演）

T. Haino: Supramolecular Porphyrin Polymer Driven By Host-Guest Interaction. International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010 (ICSM2010) (Jul., 2010, Kyoto, Japan)（一般講演）

T. Haino: Supramolecular polymerization driven by molecular recognition. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010) (Dec., 2010, Hawaii, USA)（　講演）

T. Ikeda, T. Masuda, H. Saito, T. Haino: ◎Self-Assembly and Photochemical Properties of Tris(phenylisoxazolyl)benzene Possessing Photoactive Groups. Joint Symposium of Post 5th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (POST-ISMSC5) and The 6th Symposium on Host-Guest Chemistry (HGCS2010) (Jun., 2010, Osaka, Japan)（一般講演）

K. Kashihara, E. Hirai, K. Sakamoto, T. Ikeda, T. Haino: ◎Supramolecular Fullerene Assembly Formed by Host-Guest Interaction of Calix[5]arene and Fullerene. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Nov., 2010, Hiroshima, Japan)（一般講演）

T. Haino, E. Hirai, Y. Fujiwara, K. Kashihara: Supramolecular Cross-Linking of C60-grafted Polyacetylene. 5th International Symposium on Macrocyclic & Supramolecular Chemistry (ISMSC2010) (Jun., 2010, Nara, Japan)（ポスター）

K. Kashihara, E. Hirai, T. Ikeda, T. Haino: ◎Construction of Supramolecular Polymer via Host-Guest Interaction between Double-Calix[5]arene and [60]Fullerene. Joint Symposium of Post 5th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (POST-ISMSC5) and The 6th Symposium on Host-Guest Chemistry (HGCS2010) (Jun., 2010, Osaka, Japan)（ポスター）

T. Oshita, A. Watanabe, T. Ikeda, T. Haino: ◎Supramolecular Polymer Driven by Host-Guest Interaction of Bisporphyrin Cleft and Trinitrofluorenone. Joint Symposium of Post 5th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (POST-ISMSC5) and The 6th Symposium on Host-Guest Chemistry (HGCS2010) (Jun., 2010, Osaka, Japan)（ポスター）

T. Ikeda, T. Masuda, H. Saito, T. Haino: ◎Self-Assembly of Tris(phenylisoxazolyl)benzene Functionalized with Photoresponsive Groups. International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010 (ICSM2010) (Jul., 2010, Kyoto, Japan)（ポスター）

T. Ikeda, H. Saito, T. Masuda, T. Haino: □Self-assembly and photophysical properties of tris(phenylisoxazolyl)benzene functionalized with photoresponsive groups. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010) (Dec., 2010, Hawaii, USA)（ポスター）

T. Oshita, A. Watanabe, T. Ikeda, T. Haino: ◎Self-assembly of bisporphyrin cleft possessing trinitrofluorenone. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010) (Dec., 2010, Hawaii, USA)（ポスター）

国内学会

灰野岳晴：　リックスア　ーンを　用した機能性　　間の　　。日本化学会　4　関東支部大会（2010 年 8 月，　　）（　　講演）

灰野岳晴：　分子化学を　用した分子配　　間の設計と合成。　15　スクリプス・バイオメディ　ルフ　ーラム（2010 年 11 月，大阪）（　　講演）

灰野岳晴：1 3 5-トリス(フェ　ルイ　オキ　　イル)　ン　ン　　体のら　　集積。　5　9　高分子討論会（2010 年 9 月，北　道）（　　講演）

灰野岳晴・平井　　・藤原好　・　原孝基：分子　識を　動力とした[60]フラー　ンをもつポリアセチ　ンの　分子　橋。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，　知）（一般講演）

池田俊明・　　英・大下　子・灰野岳晴：◎　スポルフィリンク　フトと電子　　な　ストからなる　分子錯体の　ドックスによる会合制　。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，　　）（一般講演）

田　也・池田俊明・灰野岳晴：◎　リ　ン　スイミドを　入したトリス(フェ　ルイ　オキ　　リル)　ン　ンの光学活性な置　基によるら　　構造制　。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，　　）（一般講演）

達也・　　美・灰野岳晴：　リックス[4]ア　ーンを基盤とした三重ら　　型錯体のキラル　スト　　による　　。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，　　）（一般講演）

原孝基・池田俊明・灰野岳晴：◎光学活性な　リックス[5]ア　ーン　ストと　ン　ル型フラー　ンによって　成される　分子ポリマー。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，　　）（一般講演）

池田俊明・　田　也・灰野岳晴：◎　リ　ン　スイミドを　入したトリス（フェ　ルイ　オキ　　リル）　ン　ンの集積挙動と光物性。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，　知）（ポスター）

大下　子・　　英・池田俊明・灰野岳晴：◎　スポルフィリンク　フトとトリ　トロフルオ　ノン間の　スト―　スト相互作用を　動力とした　分子ポリマー。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，　知）（ポスター）

池田俊明・　田　也・灰野岳晴：◎　リ　ン　スイミドを　入したトリス（フェ　ルイ　オキ　　リル）　ン　ンの自己集積と光物性。　4　有機π電子系シンポジウム（2010 年 11 月，　　）（ポスター）

達也・　　美・灰野岳晴：　リックス[4]ア　ーン自己集合錯体のキラル　スト　　による　　。　4　有機π電子系シンポジウム（2010 年 11 月，　　）（ポスター）

学生の学会発表実績

	国際学会　　数	国内学会　　数
学部 4 年生(1)	0	0
博士課程前期(2)	8	9
博士課程後期(3)	0	0

博士課程前期・後期共(4)	0	0

セミナー・講演会開　実績

灰野岳晴：新　素材　　研究会幹事（2001－）
灰野岳晴：生体機能関連化学部会 中国　国支部若手幹事（2004－2005）
灰野岳晴：　スト・　スト化学研究会幹事（2006－）
灰野岳晴：有機合成化学協会中国　国支部幹事（2007－）
灰野岳晴：日本化学会中国　国支部　務幹事（2008）
灰野岳晴：　6　機能性　スト　スト化学研究会　マーセミナー実行委員長，2000年
灰野岳晴：　18　シクロフ　ン研究会実行委員，2003年
灰野岳晴：　17　生体機能関連化学若手の会　マースクール実行委員長，2005 年

国際共同研究・国際会議開　実績

灰野岳晴：International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010 (ICSM2010) 組織委員（2010）

研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金　基盤研究（　），特異な　　チーフを用いた　分子ら　　ポリマーの構と高度分子配　制　，灰野岳晴（代表者）
　法人　　科学技術振興　　研究助成金，ら　　ポリマーの構造制　を基盤とした RGB 型発光素子およびナノ電　石の開発，池田俊明（代表者）

座長を行った学会・討論会の名

灰野岳晴：Joint Symposium of Post 5th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (POST-ISMSC5) and The 6th Symposium on Host-Guest Chemistry (HGCS2010) (Jun., 2010, Osaka, Japan)
灰野岳晴：International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010 (ICSM2010) (Jul., 2010, Kyoto, Japan)
灰野岳晴：The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010) (Dec., 2010, Hawaii, USA)
灰野岳晴：　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，　知）
灰野岳晴：日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，　　）
池田俊明：日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，　　）

その他特記事項

灰野岳晴：日本学術振興会先端研究　点事業「新　典型元素化合物の　　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　2011 年 3 月）
灰野岳晴：広島大学薬品管理システム専門委員会委員長（2011 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　2011 年３月）

分子反応化学講座

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　　分子の反応素　程の研究

振動　　分子と他分子の　　により進行する振動　和　程と化学反応　程の速度定数の同　定を行い，速度論と動力学を融合した化学反応研究を推進している。前年度　測を行った振動　　OH(v = 1 – 4)と CO の　　による, 化学反応　程と振動　和　程の分　　定の成果を，7 月に　ル　ー(ルー　ン)で開　された 21th International Symposium on Gas Kinetics において発表した。実　に関しては，　外光　　ーザおよび　外・　　域 1 光子および 2 光子　ーザ　　光(LIF)検出システムを　用して，NH_2 + NO 反応系に対する NH_2 分子の振動　　果の検証を新たに開　した。同反応には発　　程として 3 つの　　(i) OH + H + N_2, (ii) N_2O + H_2, (iii) H_2O + N_2 があるが，各　　の活性化障　の高さが大きく異なるため，　　とに NH_2 の振動　果の現れ方が異なる　能性が高い。本研究では　　(i)について，$NH_2(v_1, v_2, v_3)$を　　2 光子分光型 LIF，OH を　外 1 光子 LIF 法，H を 2 光子　　LIF 法により検出し，反応分子と生成分子　度の　　化の全　および NO　度　存性や NH_2 の高速　和　である CF_4　加　果を　測することにより，　　素　程の速度定数および生成物　　を　定し，NH_2 振動　　が OH 生成を　進することを明らかにした。

2. 量子状　選別した　　実　による光　　反応とイオン・分子反応の反応　イナミクス研究

実　的に検出した　　的な反応物・生成物の運動　　から，化学反応機構を　明することを目的として, 量子状　を選別した光イオン化　　画　　測法による, 光　　反応実　を行った。最も基本的な　トロ化合物である　トロメタンを研究対　として，　外光　　に　って生じる C-N 結合　　と CH_3+NO+O の三体　　の生成物の状　選別　　分　測定を行った。得られた測定結果のこれまでの　析から，高エ　ル　ー状　の NO_2 が　外光　　反応の重要な生成物であることを明らかにした。本研究により，　数の　　程が競合して，　　な反応機構が明らかにされてこなかった　トロ化合物の　外光　　イナミクスを　明する重要な手　かりを得た。

イオン・分子反応の反応機構　明のために，　一量子状　をもつ分子イオン　ーム　と，それを用いた反応性　　実　　置を開発した。前　体分子の　　速分子線に，　ーザ光　　法を併用したリド　ルグ状　を　　する共　　光子イオン化法を用いて，振動・　転状　を制　した NO^+と CH_3^+イオン　ームを発生さ　，その　ーム特性を評価した。このイオン　ーム生成法は，　　な有機分子種に対して振動・　転状　を選択した分子イオンの発生に適用することができ，内部エ　ル　ーと　　エ　ル　ーを制　した反応実　に適用　能である。この状　制

イオン　ームを用いた 8 重極 RF イオン　イド反応　置を　作した。これまでに RF　イドによる反応イオンの反応領域への　　が確　され，設計　に行った電　シミュ　ーション結果が実現された。

3. 二重内　光電子分光法に対する理論的研究

　　年実用化してきた新しい光　である X 線自　電子　ーザの原子・分子への応用の 1 つとして二重内　光電子分光法があげられる。　　の一電子 X 線光電子分光法(XPS)では分子の化学的環境が異なるにもかかわらず同じ領域に　ークが　測されることがし　し　あるが，二重内　　では正　間の反発，相関　和エ　ル　ーの　いな　により，より　かな化学的情報を　できる。本年度は S 2p 端における H_2S, SO_2, CS_2 分子の二重内　正　状　の理論計算を MCSCF 法にて行った。我々の計算はス　ン　道分　を　めて実　　をよく　現することができた。

発表原　論文

S. Watanabe, S.-ya Usuda, H. Kohguchi, K. Yamasaki (2010) ◎Nascent Vibrational Energy Distributions of $O_2(X^3\Sigma_g^-, v = 6 - 13)$ Generated in the Photolysis of O_3 at 266 nm. *J. Phys. Chem. A*, 114(2), 735–740.

Y. Liu, Y. Ogi, T. Fuji, K. Nishizawa, T. Horio, T. Mizuno, H. Kohguchi, M. Nagasono, T. Togashi, K. Tono, M. Yabashi, Y. Senba, H. Ohashi, H. Kimura, T. Ishikawa, and T. Suzuki (2010) Time-resolved photoelectron imaging using a femtosecond UV laser and a VUV free-electron laser, *Phys. Rev. A* (RAPID COMMUNICATIONS), 114(2), 735–740.

T. Schiros, O. Takahashi, K. Andersson, H. Ostrom, L. G. M. Pettersson, A. Nilsson and H. Ogasawara (2010) The Role of Substrate Electrons in the Wetting of a Metal Surface, *J. Chem. Phys.*, **132**, 094701-9.

T. Tokushima, Y. Harada, Y. Horikawa, O. Takahashi, Y. Senba, H. Ohashi, Lars G. M. Pettersson, A. Nilsson, and S. Shin (2010) High resolution X-ray emission spectroscopy of water and its assignment based on two structural motifs, *J. Elec. Spectrosc. Rel. Phenom.*, **177**, 192-205.

K. Tabayashi, M. Chohda, T. Yamanaka, O. Takahashi, and H. Yoshida (2010) Inner-shell excitation and fragmentation of small acetaldehyde clusters at the oxygen K-edge, *Nuclear Instruments and Methods in Physical Research A*, **619**, 388-392.

M. Oura, O. Takahashi, T. Gejo, T. Tokushima, Y. Horikawa, Y. senba, H. Ohashi, and S. Shin (2010) Vibrationally resolved resonant x-ray emission spectra of diatomic molecules, *J. Phys. Conference Series*, **235**, 012016-11.

K. Tabayashi, M. Chohda, T. Yamanaka, Y. Tsutsumi, O. Takahashi, H. Yoshida, and M. Taniguchi (2010) Hydrogen bonding interaction of small acetaldehyde clusters studied with core-electron excitation spectroscopy in the oxygen K-edge region, *J. Phys. Conference Series* **235**, 012017-10.

O. Takahashi, I. H Suzuki, Y. Kono, A. Ikeda, T. Ouchi, K. Ueda, I. Higuchi, Y. Tamenori, and S.-ichi Nagaoka (2010) X-ray absorption spectra of SiF_4 and $Si(CH_3)_4$ in the Si K-shell excitation region, *J. Phys. Conference Series*, **235**, 012018-8.

I. H. Suzuki, Y. Kono, A. Ikeda, T. Ouchi, K. Ueda, O. Takahashi, I. Higuchi, Y. Tamenori, S. Nagaoka (2010) Projection of excited orbitals into kinetic energies of emitted electrons in resonant Si KLL

Auger decays of SiF_4, *Phys. Rev. A*, **82**, 045401-4.

書

山崎勝義 (2010)　26　化学反応討論会。化学と工業，2010 年 9 月　，日本化学会.

山崎勝義 (2010) 電　気学における　位系(　2　)。分子科学会 Web ジ　ーナル，*Mol. Sci.* 1(1), AC0003.

総説

高橋 修, (2010) 水の　　一な　　構造,　リティ, **25**(12) ,50-53.

O. Takahashi, Y. Kohno, and M. Nishio (2010) Weak Hydrogen Bonds Control the Conformation of Organic Compounds: Evidence from Recent Experimental Data and High-Level ab Initio MO Calculations, *Chem. Rev.*, **110**, 6049-6076.

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. 21th International Symposium on Gas Kinetics (Jul. 2010, Lueven, Belgium) (一般講演)

国内学会

　，河野　　，高口博志，山崎勝義，◎Detection of H atoms by 2-photon LIF technique and Its Application to Chemical Kinetics。The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2010 年 12 月，東広島) (一般講演)

河野　　，　　，高口博志，山崎勝義，◎Reaction OH + CO　　H + CO_2 Enhanced by Vibrational Excitation of OH。　26　化学反応討論会 (2010 年 6 月，東広島) (ポスター)

健一，高橋　　，高口博志，山崎勝義，◎Generation of Highly Vibrationally Excited $S_2(X^3\Sigma_g^-)$ in the O_3/OCS/266 nm System。　26　化学反応討論会 (2010 年 6 月，東広島) (ポスター)

高橋 修，山崎勝義，上田　，◎　　S 2p 端の二重内　光電子分光法に関する理論的研究。　24　日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2011 年 1 月，つく　）(ポスター)

谷　　，千田　　，高橋 修，山崎勝義，◎　の光　　反応に関する理論的研究。　24　日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2011 年 1 月，つく　）(ポスター)

学生の学会発表実績

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

セミナー・講演会開　実績

・組織委員，実行委員

山崎 勝義，2010 年度　野　クチ　ー，学術講演会　　人

社会活動・学外委員

・学協会役員

山崎 勝義，日本化学会中国　国支部　務幹事 (2006)

山崎 勝義，日本化学会中国　国支部会計幹事 (2008)

山崎 勝義，日本化学会中国　国支部事務　長 (2009)

山崎 勝義，日本化学会　8　化学イノ　ーションシンポジウム　備委員会事務　長 (2009)

山崎 勝義，日本化学会物理化学ディ　ジョン幹事 (2010)

山崎 勝義，日本分光学会代議員 (2004, 2006～)

山崎 勝義，日本分光学会支部　査 (2006～)

山崎 勝義，日本分光学会中国支部幹事 (2010)

高口 博志，日本化学会代議員 (2007)

高口 博志，日本化学会中国　国支部　務幹事 (2010)

高口 博志，原子　　研究協会行事委員 (2004～2007)

高口 博志，原子　　研究協会運営委員 (2008～)

高口 博志，原子　　研究協会幹事（行事委員長）(2009～)

・ 講習会・セミナー講

山崎 勝義，放　大学面　授業(集中型)講　「大気化学」(2001 年 2 月，放　大学新　学習センター)

山崎 勝義，広島大学理工フェア「　イエンス(　科学　理学)の　力と　しみ方」(2007 年 5 月，福山　工会議所)

高口 博志，上　大学理工学部物理学科　ロキウム「開　系原子分子の　　程と化学反応」(2007 年 5 月，上　大学)

高口 博志，　4　原子・分子・光科学(AMO)討論会ディス　ッションリー　ー (2007 年 5 月，電気通信大学)

高口 博志，分子科学若手の会　の学　講　「ラジ　ル分子の反応と分光の基礎」(2007 年 8 月，長良　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・　　状　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　画：　イ　フ　ーマンス　ン　ューティングセミナー「数　シミュ　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「　行書の　開と機関リポジトリへの期　」(2007 年 10 月，広島大学図書館)

山崎 勝義，中　国 6 大学による　1　理系大学教育に関する研究フ　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　)

山崎 勝義, 図書館における学習環境　　に関する　　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・　　状　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，　のように研究計画調書を書け　よいか」(2009 年 9 月，広島大学)

山崎 勝義，東北大学理学部化学教室 一般　　会「振動　　分子のエ　ル　ー　動と化学反応の速度論的研究」(2010 年 10 月，東北大学)

山崎 勝義，　　大学大学院理学研究科 講演会「振動　　分子のエ　ル　ー　動と化学反応の速度論的研究」(2010 年 12 月，　　大学)

山崎 勝義，　イエンス　フェ「化学反応の　に　る　」(2011 年 3 月，広島大学)

・高大連携事業(出　講義等)

　博，　田隆夫，三好隆博，　野　也，田島文子，中久　　，野々　　子，三　　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　ーションに　戦しよう ～中高生のための　ン　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　)

山崎 勝義，大学　　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　立広島　実高等学　)

山崎 勝義，大学　　講義「大学の化学と物理化学の　しみ方」(2006 年 9 月，広島　立広島中・高等学　)

山崎 勝義，大学　　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　立広島　実高等学　)

山崎 勝義，大学　　講義「　イエンス(　科学　理学)の　力と　しみ方」(2010 年 11 月，　取　立　取東高等学　)

・論文　　集委員

高口 博志，日本化学会「化学と工業」ト　ックス　集委員 (2001～2002)

高口 博志，原子　　研究協会　集委員 (2006)

・ 討論会の組織委員

山崎 勝義，　18　化学反応討論会実行委員会委員 (2001～2002)

山崎 勝義，　26　化学反応討論会実行委員会委員長 (2009～2010)

高口 博志，　15　化学反応討論会実行委員会委員 (1999)

高口 博志，　14　理論化学シンポジウム実行委員会委員 (2007)

高口 博志，　26　化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)

高口 博志，原子　　研究協会　35　年会実行委員会委員長 (2009～2010)
高口 博志，原子　　研究協会　36　年会実行委員会委員長 (2010～2011)
高口 博志，分子科学会　画委員分子科学会シンポジウム担当 (2010～2011)
高橋 修，　26　化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)
高橋 修，　16　化学反応討論会実行委員会委員 (2000)

・その他の委員
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 (2009～2010)
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～)

他研究機関での講義・　員
山崎 勝義，集中講義「物理化学特選 I，物理化学特別講義 B」(2010 年 10 月，東北大学)
山崎 勝義，集中講義「物理化学特論 A」(2010 年 12 月，　大学)

研究助成の受け入れ
科学研究費補助金 特定領域研究, 有機イオン　ーム法を用いた反応実　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)，　的有機反応系としてのイオン・分子反応　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，　ーザー光イオン化法を用いた　トロ有機化合物の新　検出法の開発，研究分担者 高口博志
信　分子科学研究　野基金 外国人研究者　費，Dr. C. A. Taatjes (Sandia National Laboratory，USA)　，代表者 山崎勝義
信　分子科学研究　野基金　外　助成，21th International Symposium on Gas Kinetics (Jul. 2010, Lueven, Belgium) 一般講演，代表者 山崎勝義
広島大学大学院理学研究科 大学院生　外　支援　費，21th International Symposium on Gas Kinetics (Jul. 2010, Lueven, Belgium)　者 河野　，代表者 山崎勝義

受　状況（学生）
河野　，　ストポスター　，　26　化学反応討論会 (2010 年 6 月，東広島)
，Student Award，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2010 年 12 月，東広島)

座長を行った学会・討論会の名
山崎 勝義，　26　化学反応討論会，東広島，2010 年 6 月

その他の特記事項

山崎 勝義，広島大学学術情報リポジトリ　目　ンテン　に　　されている物理化学　説書「Monograph シリー　」へのアクセス数が 10　　，フ　イル　ウンロード数が 7　　を　えた。

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），小島　聡志（准教授）

研究活動の概要

2010 年度　に，博士（理学）の学位を 1 名が取得した。研究面では，　リミジンの　転エ　ル　ー評価を　原子価結合のエ　ル　ー評価に結びつける研究や　ポルフィリンの　化体の合成と金属錯体化の研究な　で成果を挙げることが出　た。

発表原　論文

S. Kojima, J. Arimura, and K. Kajiyama (2010) Z-Selective Horner-Wadsworth-Emmons-type Reaction Using a 10-P-5 Phosphorane Bearing Bidentates Derived from 1-Naphthol, *Chemistry Letters*, **39**(11),1138-1139.

S. Matsumura, R. Takagi, S. Kojima, K. Ohkata, and M. Abe (2010) ◎Computational Study on the Cyclopropanation Reaction of Ylides Generated from α-Pyridiniumacetates, *Heterocycles*, **81**, 2479-2495.

T. Yamaguchi, S. Fuku-en, S. Sugawara, S. Kojima, and Y. Yamamoto (2010) ◎ Demethylation of an Allene Bearing Two Dimethoxythioxanthene Groups by Oxidation via a Vinyl Cation Intermediate, *Australian Journal of Chemistry*, **63**(12), 1638-1644.

Y. Yamamoto, Y. Hirata, M. Kodama, T. Yamaguchi, S. Matsukawa, K.-y. Akiba, D. Hashizume, F. Iwasaki, A. Muranaka, M. Uchiyama, P. Chen, K. M. Kadish, and N. Kobayashi (2010) Synthesis, Reactions, and Electronic Properties of 16 π-electron Octaisobutyltetraphenylporphyrin (OiBTPP), *Journal of the American Chemical Society,* **132**(36), 12627-12638.

X. Jiang, S. Matsukawa, K. Kakuda, Y. Fukuzaki, W. Zhao, L. Li, H. Shen, S. Kojima, and Y. Yamamoto (2010) ◎ Efficient Synthesis of Tetradecafluoro-4-phenylheptan-4-ol by a Cannizzaro-type Reaction and Application of the Alcohol as a Bulky Martin Ligand Variant for a New Anti-apicophilic Phosphorane, *Dalton Transactions*, **39**(41), 9823-9829.

A. Kawachi, H. Morisaki, M. Zaima, T. Teranishi, and Y. Yamamoto (2010) ◎Synthesis and Structures of *σ*(Dihydrosilyl)(dimesitylboryl)benzenes, *Journal of Organometallic Chemistry*, **695**(19-20), 2167-2171.

X. Jiang, S. Matsukawa, Y. Fukuzaki, and Y. Yamamoto (2010) Formation of Epoxides from Pentacoordinated Organoarsenic Compounds with a ß-Hydroxyethyl Group, *New Journal of Chemistry*, **34**, 1623-1629.

H. Yamamichi, S. Matsukawa, and Y. Yamamoto (2010) Synthesis and Characterization of Monohaloalkoxyarsoranes Bearing a Novel Tridentate Ligand Occupying One Apical and Two Equatorial Sites, *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, **185**, (dedicated to Professor N. Furukawa), 974-982.

J. Nakatsuji, and Y. Yamamoto (2010) Synthesis and Structure of Boron Compounds Bearing Tridentate Ligands with 1,3-Bicarbonylbenzene Skeleton, *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, **83**, 767-776.

A. Kawachi, K. Machida, and Y. Yamamoto (2010) ◎Synthesis, Structure and Reactions of Triarylgermyl Anion with α,δ-ambiphilic Character, *Chemical Communications,* **46**(11), 1890-1892.

X. Jiang, and Y. Yamamoto (2010) Synthesis, Structure, and Reaction of Tricoordinate Stibine and Tetracoordinate Stiboranide*, Journal of Organometallic Chemistry*, **695**(5), 740-746.

R. Takagi, N. Igata, K. Yamamoto, and S. Kojima (2010) ◎Alkylalumination of Arylacetylene Catalyzed by Zirconocene Catalysts Supported on Solid Materials, *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, **321**(1-2), 71-76.

T. Widianti, Y. Hiraga, S. Kojima, and M. Abe (2010) ◎Novel Cyclic β–Aminophosphonate Derivatives as Efficient Organocatalysts for the Asymmetric Michael Addition Reactions of Ketones to Nitrostyrenes, *Tetrahedron: Asymmetry* **21**(15), 1861-1868

国際会議

S. Sugawara, Y. Hirata, S. Matsukawa, D. Hashizume, S. Kojima, Y. Yamamoto: ◎ Structures and Properties of 16π Metalloporphyrins. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec., 2010, Higashi-Hiroshima) (一般講演)

A. Kawachi, S. Nagae, Y. Onoue, Y. Yamamoto: ◎ Ortho Magnesiation of Boron-substituted Benzenes Using $(TMP)_2Mg$. 9th International Symposium on Carbanion Chemistry (ISCC-9) (Jul., 2010, Florence, Italy) (一般講演)

S. Fuku-en, T. Yano, T. Yamaguchi, Y. Yamamoto: Attempts to Synthesize Triplet Carbenes with Two Thioxanthylium or Acridinium Ligands. Reactive Intermediates and Unusual Molecules: Synthesis and Mechanism (5th Heron Island Conference) (Jul., 2010, Heron Island, Australia) (一般講演)

S. Kojima, A. Iwamoto, Y. Sashihara: Mild Synthesis of Furans from 1,3-Ketoesters and cis-4-Oxo-2-enals. Organic Chemistry, Symposium 139. Achieving Efficiency in Organic Reactions via Greener Processes and Practices, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010) (Dec., 2010, Honolulu, Hawaii) (一般講演)

Y. Hirano, Y. Yamamoto: Synthesis of a Hypervalent Pentacoordinate Boron Compound with Nitrogen Donors. Inorganic Chemistry, Symposium 156. Functional Molecules of the Heavier Main Group and Transition Metal Elements, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010) (Dec., 2010, Honolulu, Hawaii) (ポスター)

S. Fuku-en, T. Yano, T. Yamaguchi, Y. Yamamoto: Two-electron Oxidation of Allene Compounds Bearing Acridene Skeletons. Organic Chemistry, Symposium 1. Reactive

Intermediates and Unusual Molecules - A Celebration of Bob Moss's 70 years, The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2010) (Dec., 2010, Honolulu, Hawaii) （ポスター）

Y. Yamamoto, T. Suguri: Synthesis of Iridium Complexes with a Novel Pincer Type Tridentate Ligand and Application to Catalysts for Dehydrogenation of Alkanes. 24th International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC-24) (Jul. 2010, Taiwan) （ポスター）

S. Fuku-en, T. Yano, T. Yamaguchi, Y. Yamamoto: Formation of a Possible Open-shell Singlet Diradical by Two-electron Oxidation of an Allene Compound. Reactive Intermediates and Unusual Molecules: Synthesis and Mechanism (5th Heron Island Conference) (Jul., 2010, Heron Island, Australia) (ポスター)

S. Sugawara, A. Muranaka, D. Hashizume, N. Kobayashi, Y. Yamamoto, Y. Hirata: Synthesis and Properties of 16π Benzofused Porphyrin. 6th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines(ICPP-6) (Jul. 2010, New Mexico) （ポスター）

国内学会

山本陽介： 原子価５配位 び６配位 素・ ウ素化合物の合成とその後の展開。 59 セミナー(2010 年 10 月，) （ 講演）

河内 敦 : *o*-(フルオロシリル)フェ ルメタル化合物の合成・構造・反応。 14 イ素化学協会シンポジウム(2010 年 11 月， 河原)（ト ックス講演）

﨑宏・河内敦・山本陽介：◎*o*- ドロシリル(リル) ン ンの分子内環化によるジ ン シラ リンの合成。日本化学会 91 年会(2011 年 3 月，横 ）(一般講演)

野 拓人・小島聡志・山本陽介 : ◎N-アリールシクロ キ ンジアミンを用いた 反応。日本化学会 91 年会(2011 年 3 月，横 ）(一般講演)

原 ・平田 介・小島聡志・ ・橋 大 ・Mack John・小 長夫・山本陽介：◎ ン 環した 格を有する 16 ポルフィリン 錯体の構造 び反 性評価。日本化学会 91 年会(2011 年 3 月，横 ）(一般講演)

河内敦・長江 織・原田理・山本陽介 : ◎ ウ素原子置 ン ンのオルトマグ シオ化反応：オルトマグ シオ体の 線結晶構造 析。日本化学会 91 年会(2011 年 3 月，横 ）(一般講演)

今田 ・山道 ・ ・山本陽介・安藤 織： 原子価 5 配位アンチ ン化合物の Turnstile Rotation による異性化機構の研究日本化学会 91 年会(2011 年 3 月，横 ）(一般講演)

也・ 新東・小島聡志・山本陽介 : ◎アンチア フィリック ス ランおよびその 6 配位 体の立体異性化。日本化学会 91 年会(2011 年 3 月，横 ）(一般講演)

保田 孝・山本陽介・山口 ・木下大 ・秋 哉：２つの van Koten 型配位子を有する 原子価５配位 び６配位化合物の合成検討。 37 有機典型元素化学討論会(2010 年 11 月，室) (一般講演)

山本陽介・福 一：安定な三重項 ル ンの合成の み。 45 テロ原子化学セミナー(2010 年 9 月 つく ）(一般講演)

﨑章 ・中 也・山本陽介： ル ル 素を配位原子とする新 三座配位子を用いた 原子価 5 配位 素ラ ジ ル チオン種の合成。 37 有機典型元素化学討論会(2010 年 11 月，室) (ポスター)

石部 ・河内 敦・山本陽介 : ◎二つの ス ウムメチリドを分子内 素配位子とする

5 配位　イ素化合物の合成研究。　37　有機典型元素化学討論会(2010 年 11 月，室　)　(ポスター)

石　・　拓　・山本陽介：　員環を二つ有する三座配位子を用いた　金属錯体の合成と　反応への応用。　37　有機典型元素化学討論会(2010 年 11 月, 室　)　(ポスター)

原　・平田　介・小島聡志・小　長夫・John Mack・橋　大　・山本陽介：◎16π 電子系を有するポルフィリン金属錯体の合成と性質。　4　有機　電子系シンポジウム(2010 年 11 月，　)　(ポスター)

小島聡志・岩本明久・指原　彰：2 位に　4　素置　基をもつフランのジアステ　オ選択的合成。　36　反応と合成の進　シンポジウム(2010 年 11 月，名古　)　(ポスター)

崎　宏, 河内　敦, 山本陽介：◎*o*-ジ　ドロシリル（ジメシチル　リル）　ン　ンの合成と反応。　57　有機金属化学討論会(2010 年 9 月，　子)　(ポスター)

福　一，　野　之, 東　大志, 河　, 石本　也, 井上 克也,　平, 中野　, 宮　, 宮 和男, 山本 陽介：　ア　ン化合物の二電子　化による一重項　ラジルの　成。　21　基礎有機化学討論会（　60　有機反応化学討論会・　40　構造有機化学 討論会）(2010 年 9 月，名古　)　(ポスター)

今田　・山道　・　宏・　・小島聡志・山本陽介：◎新　三座配位子と二座配位子を有する　原子価 5 配位アンチ　ン化合物の合成。　26　若手研究者のための化学道　(2010 年 9 月，　取)　(ポスター)

原田理・長江　織・河内敦・山本陽介：◎TMP　基による　ウ素置　ン　ンのオルトメタル化反応の開発。　26　若手研究者のための化学道　(2010 年 9 月，　取)　(ポスター)

原　：16　ポルフィリンの合成　構造　びその性質。　42　構造有機若手の会　の学　(2010 年 8 月，京都)　(ポスター)

出口拓　：*o*-(フルオロシリル)フェ　ルメタル化合物の合成と構造。　45　有機反応若手の会(2010 年 7 月，　)　(ポスター)

本　：　性基を有する　高い新　配位子の開発と典型元素の　入の　み。　45　有機反応若手の会(2010 年 7 月，　)　(ポスター)

：分子内配位子として　ス　ウムイリドを有する高配位　イ素化合物の合成研究。　45　有機反応若手の会(2010 年 7 月，　)　(ポスター)

鈴　幸・　・　・山本陽介：新　スフェランドの合成と　原子価 5 配位ス　アート錯体の安定化。20　年記念　有福岡シンポジウム(2010 年 5 月，福岡）(ポスター)

学生の学会発表実績

	国際学会　数	国内学会　数
学部 4 年生(1)	0	5
博士課程前期(2)	5	13
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　実績

組織委員，実行委員な　記　ください。

日　：2011 年 2 月 9 日

所：理学部 B301

講　：C. H. Ottosson 准教授（Uppsala University）

演　: Design and Synthesis of σ-, σ/π- and Metal/π-Conjugated Compounds for Molecular Electronics

日　：2011 年 1 月 19 日
所：理学部 E002
講　：榊 茂好教授（京都大学工学研究科）
演　：d 電子　合系の理論的研究：構造　結合　反応の分子論的理

日　：2010 年 11 月 17 日
演　：Aromaticity Switching in Porphyrinoids
講　：L. Latos-Grazyniski
所：理学部 B301　室

日　： 2010 年 6 月 14 日
所：理学部 E209　室
講　： F. E. Hahn 教授（Münster 大学）
演　：Macrocyclic and Supramolecular Chemistry with Poly-NHC

日　：2010 年 5 月 7 日
演　：Low-Coordinate Silicon Compounds. Experiment and Theory in Synergy
所：理学部 E002 室
講　：Apeloig 教授（Israel Institute of Technology）

社会活動 学外委員

・学協会役員，委員
小島聡志，有機合成化学協会中国　国支部事務　(2003　)
河内　敦，　イ素化学協会理事，(2008　)
・外部評価委員な
山本陽介，IUPAC Commission II-2, National Representative(2002　)
・講習会・セミナー講
山本陽介，平成 21 年度岡山大学次　代研究者・異分野研究連携育成支援事業による講演会「　原子価５配位および６配位　素　ウ素化合物の合成とその後の展開」(2010 年 10 月，岡山大学環境理工学部)
山本陽介，岡山　高等学　教育研究会理化部会化学分科会化学教育研究会「大学での有機化合物の合成研究について～高　化学の授業に役立つ　～」(2010 年 11 月，岡山　立倉工業高　)
・高大連携事業
山本　陽介，2010 年 9 月，　立広島高等学　，　授業
山本　陽介，2010 年 7 月，広島大学附属高等学　SSH 事業
小島　聡志，2010 年 6 月，島　立　田高等学　，　授業
・論文　集委員
山本　陽介，Journal of Physical Organic Chemistry, Editorial Board (2005-)

・討論会の組織委員

・その他の委員
山本　陽介，化学系研究設備有　活用　ットワーク中国地域委員長（2005-2010）
山本　陽介，中国　国・化学と工業　　会　任運営委員

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　ー：　　(工学研究科・教授))研究メンバー (2005-)

他研究機関での講義・　員
山本　陽介，名古　大学大学院理学研究科，　　講　，2010 年 5 月 10 日-11 日
山本　陽介，京都大学大学院工学研究科，　　講　，2011 年 1 月 26 日-27 日

研究助成の受け入れ状況
助成金名　，課　名，代表者（分担者）　名
科学研究費補助金基盤研究(B)，スフェランドの新　　体合成を基盤とする新　　原子価アート錯体合成への応用，代表者　山本　陽介

科学研究費補助金基盤研究(C)，14　元素を　む新　アントラセン型分子の合成と特異な電子系の発現，代表者　河内敦

日本学術振興会　組織的な若手研究者　外　　プログラム　広島大学理工　系：　ステナル社会の実現に　　する自　科学系国際的若手研究者の育成プログラムによる助成を受けたもの
平野　一（ 3)
ルリン自　大学（ドイ　）への共同研究のための　　（平成 22 年 9 月 15 日～10 月 20 日）　30　円
Pacifichem　　2010 への　　（　ワイ）（平成 22 年 12 月 15 日～12 月 21 日）　16　円
福　　一（ 2)
オーストラリアへの学会　　（平成 22 年 7 月 9 日～7 月 14 日）16　円
ルリン自　大学（ドイ　）への共同研究のための　　（平成 22 年 9 月 15 日～11 月 15 日）　50　円
Pacifichem　　2010 への　　（　ワイ）（平成 22 年 12 月 15 日～12 月 22 日）　20　円
原　　（ 1)
アメリ　への学会　　（平成 22 年 7 月 4 日～7 月 11 日）16　円

受　状況（学生）
平野　　一(D3)，日本化学会中国　国支部長　（2011）
原田　理（B4)，理学部長　受　　（2011）
今田　　（B4)，理学部長　受　　（2011）
原　　(M1) The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium，The Best Student Presentation Award 受　“Structures and Properties of 16π Metalloporphyrins” (2010)
原　　(M1)，　4　有機　電子系シンポジウムポスター　「16　電子系を有するポルフ

ィリン金属錯体の合成と性質」(2010)
原　(M1),　42　構造有機若手の会ポスター　(　)「16　ポルフィリンの合成　構造　びその性質」(2010)

座長を行った学会・討論会の名
山本陽介,　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）
河内　敦，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, Hiroshima)
小島聡志，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, Hiroshima)

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（2006.4-2011.3）
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-)
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（2006-2011.3）
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　外　プログラム　担当研究者（理工　系：　ステナル社会の実現に　する自　科学系国際的若手研究者の育成プログラム）（2010.2-）
小島　聡志，広島大学作業環境測定専門委員会委員（2006-）
小島　聡志，広島大学日韓共同理工系学部留学生事業実施部会委員（2006-）
小島　聡志，理学部入学選抜方法検討委員（2009.4-2011.3）

反応有機化学研究グループ

スタッフ　安倍　学（教授），平賀　良知（助教），高木　隆吉（助教），岩倉　いずみ（助教）

研究活動の概要
研究内　としては，反応性中間体の反応挙動　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　査に関しては，ア　化合物の　素反応の機構に関する研究を実施して，　的には段　的に　素反応が進行することを　出した。また，一重項 1,3-　ラジ　ルの反応性に　す　な２位の　イ素原子　果と 2 位上のアル　キシ基の特異な　果を　出した。
1,4-　ラジ　ルの化学では，その中間体を　して生じるオキセタン環　成における立体選択性発現機構　明に関する大きな情報を得た。さらに，　ラジ　ルのス　ン　重度制　に基づくテトララジ　ルのス　ン整　にも　戦し　ラジ　ルのス　ン整　で得られた知　が応用できることを　出した。また，光　性　ージド化合物の設計と合成を行っている。
一方で，有機分子　を用いた連　的 Michael 反応による　シクロ化合物の　合成法について検討している。

発表原　論文
C. Ishihara, and M. Abe (2010) Notable substituent effects on the rate constant of thermal denitrogenation of cyclic azoalkanes: Strong evidence for a stepwise denitrogenation

mechanism. *Australian Journal of Chemistry*, **63**, 1615–1618.

T. Widianti, Y. Hiraga, S. Kojima, and M. Abe (2010) ◎Novel cyclic β-aminophosphonate derivatives as an efficient organocatalyst for the asymmetric michael addition reactions of ketones to nitrostyrenes. *Tetrahedron: Asymmetry*, **21**, 1861–1868.

R. Jahjah, A. Gassama, V. Bulach, C. Suzuki, and M. Abe, N. Hoffmann, A. Martinez, and J.-M. Nuzillard (2010) Stereoselective triplet sensitized radical reactions of furanone derivatives. *Chemistry - A European Journal*, **16**, 3341–3354.

S. Matsumura, R. Takagi, S. Kojima, K. Ohkata, and M. Abe (2010) ◎Computational study on the cyclopropanation reaction of ylides generated from α-pyridiniumacetates. *Heterocycles*, **81**, 2479–2465.

T. Nakamura, L. Gagliardi, and M. Abe (2010) Computational study of the cooperative effects of nitrogen and silicon atoms on the singlet-triplet energy spacing in 1,3-diradicals and the reactivity of their singlet states. *Journal of Physical Organic Chemistry.*, **23**, 300–307.

T. Nakamura, A. Takegami, and M. Abe (2010) Generation and intermolecular trapping of 1,2-diaza-4-silacyclopentane-3,5-diyls in the denitrogenation of 2,3,5,6-tetraaza-7-silabicyclo[2.2.1]hept-2-ene: An experimental and computational study. *The Journal of Organic Chemistry*, **75**, 1956–1960.

R. Takagi, N. Igata, K. Yamamoto, and S. Kojima (2010) ◎Alkylalumination of arylacetylene catalyzed by zirconocene catalysts supported on solid materials. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, **321**, 71–76.

書

安倍　学, (2010) 高度　能基化オキセタンの選択的合成反応。　える　有機合成反応　実　の手　き，2010, p. 392-393.

M. Abe: Formation of a 4-membered ring: Oxetanes (ed. By Albini), Wiley-VCH, New York, pp. 217-239, 2010.

総説

岩倉いずみ (2010)フェムト　　ーザー分光による　反応　程の　　測と機構　明。光化学，**41**, 153-156.

岩倉いずみ (2010)　　状　を　む反応　程の　　測。化学と工業, **63**, 979.

国際会議

M. Abe: Factors that increase the lifetime of singlet 1,3-diradials. 5th Heron Island Conference on Reactive Intermediates and Unusual Molecules: Synthesis and

Mechanism (July, 2010, Heron Island, Australia) (　　講演)

M. Abe: Generation of long-lived singlet biradicaloids: Factors that increase the lifetime. The 5th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules (Oct., 2010, Taipei, Taiwan) (　　講演)

M. Abe, T. Nakamura, K. Fukukawa, T. Kato, Y. Fujiwara:　Spin alignment in tetraradicals, based on the substituent effect on the ground state spin-multiplicity of localized 1,3-diyls. The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (December 15-20, Honolulu, Hawaii, USA) (　　講演)

I. Iwakura, A. Yabushita, S. Yagi, T. Kobayashi, M. Abe: ◎Direct observation of the molecular structural changes, including the transition state, during the denitrogenation of DBH derivatives. The 3rd European Chemistry Congress (Aug., 2010, Nurnberg, German)(ポスター)

T. Nakagaki, Y. Fujiwara, M. Abe:　Alkoxy-group effect on the lifetime of singlet 2,2-dialkoxycyclopentane-1,3-diyls. The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (December 15-20, Honolulu, Hawaii, USA)　(ポスター)

M. Abe, S. Maeda: Generation of biradicals and their reactivity in a low temperature matrix. The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (December 15-20, Honolulu, Hawaii, USA)　(ポスター)

M. Abe, S. Yagi: Substituent effect at C7 on the stereoselectivity in the denitrogenation reaction of DBH derivatives. The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (December 15-20, Honolulu, Hawaii, USA)　(ポスター)

K. Hisamoto: Regioselectivity in the Paternò-Büchi reaction of geraniol derivatives. The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (December 15-20, Honolulu, Hawaii, USA)　(ポスター)

M. Abe: Notable Concentration and Temperature Dependency of Regio- and Stereoselectivity in a Photochemical [2+2] Cycloaddition Reaction (the Paternò-Büchi Reactions): Origin of the Hydroxy-Group Diarectivity. 2010 Korean-Japan Bilateral Symposium on Frontier Photoscience (Oct., 2010, Doejon, Korea)　(　　講演)

J. Arimura, Y. Hiraga, M. Abe: ◎Formation of Macrocyclic Lactone in the Paternò-Büchi Dimerization Reaction. The 7th Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (Korea, October 23-26, 2010)　(ポスター)

A. Kosaka, Y. Hiraga, M. Abe: ◎Mechanistic Study on the Regio and Stereoselectivity in the [2+2] Photocycloaddition Reactions of Furans with Cyclic Enones. The 7th Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (Korea, October 23-26, 2010)　(ポスター)

T. Oshita, Y. Fujiwara, M. Abe:　Aryl-group effect on the reactivity of singlet 1,3-diaryl-2,2-dimethoxy-1,3-biradicals. The 7th Korea-Japan Symposium on Frontier

Photoscience (Korea, October 23-26, 2010) （ポスター）

国内学会

野　平，平賀良知，安倍　学：◎フルフリルアル　ール　　体の Paternò-Büchi 反応の選択性に　　す水　基の　果。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（一般講演）

岩倉いずみ・　木　　・小　孝　・安倍学：◎2,3-ジアザ　シクロ[2.2.1]　プテン(DBH)の　素反応　程の分子振動実　間分光。2010 年光化学討論会（2010 年 9 月,千　）　（一般講演）

I. Iwakura: Identification of the transition states by real-time vibrational spectroscopy. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Higashi-Hiroshima, December 4-5, 2010) （一般講演）

A. Kosaka, Y. Hiraga, M. Abe: ◎Mechanistic study on the regio- and stereoselectivity in [2+2] Photocycloaddition Reactions of Furans with Cyclic Enones. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Higashi-Hiroshima, December 4-5, 2010) （一般講演）

平賀良知，　西　基，Triana Widianti，安倍　学：◎光学活性な水　基を有する　　プロリン　　体を有機　　とした　　アルドール反応。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

小　有　，平賀良知，安倍　学：◎フランと環状エノンとの光[2+2]付加環化反応の位置および立体選択性における機構的研究。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

岩倉いずみ・　木　　・安倍　学・小　孝　：◎　　ーザー　ルスを用いる 2,3-ジアザ　シクロ[2.2.1]　プテン　　体の　　素反応　程の　　測。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

久本　，平賀良知，安倍　学：◎　ラ　オール　の Paternò-Büchi 反応における位置選択性。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

田　大志，安倍　学：ア　化合物のβ-　素―　素結合開　反応の機構に関する研究。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

　　，平賀良知，安倍　学：◎異　な電子配置を　つ　ラジ　ルの化学的性質。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

岡本一茂，高木隆吉，安倍　学：◎シクロ　ンタン-1,3-　ラジ　ルのス　ン制　に基づくテトララジ　ルのス　ン整　。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

下隆英，藤原好　，安倍　学：　一重項 2,2-ジアル　キシ-1,3-　ラジ　ルの　命に　　すアリール基の　果。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

三島　　，藤原好　・安倍　学：　一重項 1,2-ジアザ-4,4-ジアル　キシ-3,5-　ラジ　ルの反応挙動。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

中　知幸，藤原好　，　　，安倍　学：　一重項 1,3-　ラジ　ルの　命に　　す 2 位の

置　基　果。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（一般講演）

S. Niwayama, Z. Mei, 平賀良知：対　ジエステルの実用的　ノ加水分　のメ　　ムの物理化学的研究。2010 プロセス化学会　マーシンポジウム（2010 年 7 月，東京）（ポスター）

中　知幸，　井　子，藤原好　，高木隆吉，安倍　学：　一重項 1,3-　ラジ　ルの　命にす 2 位の置　基　果。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（ポスター）

下隆英，藤原好　，安倍　学：　一重項 2,2-ジメトキシ-1,3-　ラジ　ルの反応挙動に　　す 1,3 位のアリールの　果。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（ポスター）

久本　　，平賀良知，安倍　学：◎　ラ　オール　と　ン　フェノンとの Paternò-Büchi 反応における位置選択性に関する研究。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（ポスター）

田　大志，高木隆吉，安倍　学：◎　　状　ア　化合物の反応性に　　す置　基　果：b-　素　ー　素結合開　の機構　明。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（ポスター）

前田　　，高木隆吉，安倍　学：◎　　マトリクスにおける　ラジ　ルの光反応。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（ポスター）

有　　也，平賀良知，安倍　学：◎フルフリルアル　ール　　体を用いた分子内光環化付加反応。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（ポスター）

小　有　，平賀良知，安倍　学：◎フラン　と環状エノンとの光[2+2]付加環化反応の選択性に　　す置　基　果。　21　基礎有機化学討論会（2010 年 9 月，名古　）（ポスター）

藤　　，平賀良知，安倍　学：◎光応　性アンテナ部位を有する新　プロリン　　体の合成とその　　能。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（ポスター）

学生の学会発表実績

	国際学会　　数	国内学会　　数
学部 4 年生(1)	2	6
博士課程前期(2)	6	13
博士課程後期(3)	0	0
博士課程前期・後期共(4)	0	1

セミナー・講演会開　実績

Professor Karsten Meyer 講演会

日　：平成 22 年 9 月 22 日（水）16：00～

会　：広島大学理学部　-301 教室

演　：From Nuclear Fuel to CO2 Activation Chemistry at Uranium Coordination

Complexes

Professor Michael Harmata 講演会

日　：平成 23 年 2 月 22 日（　），16：00～17：30

会　：広島大学理学部 B-301 教室

演　：From (4+3)-Cycloadditions and Beyond

社会活動 学外委員

（在任期間が平成 11 年度（1999）以　のものを記　）

安倍学

・学協会役員，委員

分子情報　イナミクス研究会事務　(2005-2007)

分子情報　イナミクス研究会代表(2007-)

基礎有機化学会・副会長（2010-）

・論文　EDITORIAL BOARD

ARKIVOC EDITORIAL BOARD OF REFEREES (2005-)

・論文　　集委員

Bulletin of the Chemical Society of Japan (2009-)

Australian Journal of Chemistry (2010-)

・討論会の組織委員

基礎有機化学討論会組織委員(2007-)

学　連携実績

平賀良知

独立行　法人　　総合研究所,「　　の新　リ　ー　を用いた　　対　化に関する研究」

国際共同研究・国際会議開　実績

安倍　学

・国際共同研究

Norbert Hoffmann 博士（　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

・国際共同研究

Satomi Niwayama 博士（　国 Texas Tech 大学）

他研究機関での講義・　員

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

岩倉いずみ，お　の水女子大学大学院 人間文化　成科学研究科，　　講　，2010 年 7 月 1 日-2010 年 9 月 30 日

研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金，基盤研究　，開　系分子の安定化に基づく新　分子　　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　　果に基づくポリラジ　ルのス　ン整　とその機能化，安倍　学

科学研究費補助金，新学術領域研究，　素―　素 π1 重結合の　　・集積化による新　π 電子系の構　，安倍　学

科学研究費補助金，基盤研究 C，　　の　性物質および機能性小分子をプロー　とした二　　の機構，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　とした新　なキラル　　ンステッド　　の　　と応用，高木隆吉

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

信　　女性自　科学者研究助成基金　平成 22 年度研究助成，光反応の　　状　　測，岩倉いずみ

受　状況（学生）

小　有　(M2)，(The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Student Award「Mechanistic Study on the Regio and Stereoselectivity in [2+2] Photocycloaddition Reactions of Fran with Cyclic Enones」（2010）

座長を行った学会・討論会の名

安倍　学，　21　基礎有機討論会，名古　，2010 年 9 月

安倍　学，日本化学会　91　　年会，　　，2011 年 3 月

安倍　学，The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies ，Honolulu，2010 年 12 月

安倍　学，2010 Korean-Japan Bilateral Symposium on Frontier Photoscience, Doejon ，2010 年 10 月

安倍　学，The 5th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules，Taipei，2010 年 10 月

その他特記事項

おもし　ワクワク化学の　界ー'10 広島化学展ミ　　（平成 22 年 8 月 1 日，広島　こ　も文化科学館）

　年のための科学の　典　16　広島大会　（平成 22 年 10 月 30，31 日，広島　こ　も文化科学館）

集積化学研究グループ

スタッフ　岡田　和正（准教授），勝本　之晶（助教）

研究活動の概要

2010 年度における当研究グループの研究成果を以下に　挙する。

電子　　法による　リジン環の　イト特異的　　に対する置　基　果

内　電子の　在性を　用すれ　, 分子内の特定の原子を選択的に　　することが　能である。この　　によって生じる内　　状　が特定の Auger　状　と高く相関していれ　，生成する　　イオンもその　　・イオン化に特有なものとなり得る。本研究テーマでは　　として数　eV の電子線を用い，これまで 2-，3-，および 4-　　リンの　素および　素内　領域でのフラグメンテーションを調べてきた。加えて CASSCF-MP2(4,3)法によって Auger　状　の相対エル　ー　を　積もり，　　リンの特異的　　と Auger　状　との相関を明らかとした。そこで本研究では，2-フルオロ　リジンを用いて　リジン環の　　に対する置　基　果を調べた。電子　　法による　　イオン種の同定とともに，特異的　　の出現と Auger　状　との相関を分子　道計算によって調べた。その結果，この系ではフッ素原子の電子　　性による生成物の安定化と，　道　構成・電子相関として知られる　果による Auger　状　エ　ル　ーの　下で説明できることが分かった。

イオン　重同　計測運動量画　分光法による内　　分子の　　イナミクス

分子を内　　するとオージェ　程により　価イオンが生成し，クーロン　発によって同に　数の　　イオンが生成する。これら　　イオンの運動量相関を計測すれ　，　　に　う立体　イナミクスを　　することができる。その目的のために，高い位置・　間分　能を有するイオン検出　を用いた　　イオンの運動量イメージング測定を行った。3,3,3-トリフルオロプロ　ンの内　　ではフッ素転位後の　　という興味深い反応を　測した。その　　イナミクスの　　な　　を進めている。

員環フルオロ化合物の光イオン化と

室　果　スのイオン化と　　は，基礎科学的にも環境科学の　点からも興味深い。　ーフルオロ化合物は地　　化　数が高いため代　　スの　　が急務の課　である。*cis*-　キ　フルオロシクロ　タンはその代　　スの　とつとして期　されるが，光　　に関する情報は　　分である。本研究では　素およびフッ素内　領域における光　　・　　メ　　ムを　　した。

イオン対の同　計測から，$C_3H_2F_3^+/CF_2^+$は F 原子の　　後に　　していることが分かった。この　　において H 原子をすべて　　的に F 原子に置　すると，　ーフルオロシクロ　タンの $C_3F_5^+/CF_2^+$の　　と一　した。このような　析によって，　ーフルオロシクロタンと *cis*-　キ　フルオロシクロ　タンにおける　期　　程を整理することができた。

立重水素化標識法による水やアル　ールの水素結合　ターンの研究

水素結合は分子集合体で　く　力を　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　ールや水な　の　体状　において　測される　外バンドから，水素結合状　を調べる研究を行った。　立重水素化や同位体　　によって Methanol や水分子の　体状　に

おける水素結合　ターンを研究した。　　量　析を用いて，水素結合　ターンとそのエ　ルーとの相関について明らかにした。

水　性高分子の立体　　性と　　性の相関

Poly(*N*-ethylacrylamide)（PNEA）の立体特異性重合を行い，得られた高分子の　　物性，特に水　　の相境界線が立体　　性によって　のように　化するかを調べた。その結果，PNEA 水　　の相分　挙動は立体　　性に大きく　存することがわかった。また，二量体および三量体　デル化合物を合成し，水への　　度が立体異性体間で　のように　化するかを調べた。さらに，分子力学計算を行い，立体　　性と　分子　デル化合物の　　度の関　を分子論的に議論にした。

発表原　論文

M. Sakai, K. Okada, K. Ohno, K. Tabayashi (2010) ◎Specific Fragmentation of the K-Shell Excited/Ionized Pyridine Derivatives Studied by Electron Impact: 2-, 3- and 4-Methylpyridine. *J. Mass Spectrom.* **45**(3), 306–312.

K. Tabayashi, M. Chohda, T. Yamanaka, O. Takahashi, H. Yoshida (2010)　Inner-Shell Excitation and Fragmentation of Small Acetaldehyde Clusters at the Oxygen K-Edge. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* **619**(1-3), 388–392.

S. Hosoi, T. Tanaka, Y. Katsumoto, T. Maoka, T. Fujiwara, M. Yamashita, M. Node (2010) Straightforward Approach to the Discrimination of (4R)- and (4S)β-Isocryptoxanthin from a Conformationally Insensitive CD Band. *Nat. Prod. Comm.* **5**(11), 1733–1736.

H. Itagaki, T. Kurokawa, H. Furukawa, T. Nakajima, Y. Katsumoto, J. P. Gong (2010) Water-Induced Brittle-Ductile Transition of Double Network Hydrogels. *Macromolecules* **43**(22), 9495–9500.

T. Shimoaka, Y. Katsumoto (2010) Blue Shift of the Isolated CD Stretching Band of CH_2DOH in Water Induced by Changes in the Hydrogen-Bonding Pattern. *J. Phys. Chem. A* **114**(44), 11971–11976.

Y. Katsumoto, N. Kubosaki, T. Miyata (2010) Molecular Approach to Understand the Tacticity Effects on the Hydrophilicity of Poly(*N*-isopropylacrylamide): Solubility of Dimer Model Compounds in Water. *J. Phys. Chem. B* **114**(42), 13312–13318.

T. Hasegawa, S. Tatsuta, Y. Katsumoto (2010) Infrared Spectroscopic Study of Molecular Interaction of Tacticity-Controlled Poly(*N*-isopropylacrylamide) in a Cast Film Deposited on a Solid Substrate. *Anal. Bioanal. Chem.* **398**(5), 2203–2209.

Y. Katsumoto, Y. Etoh, N. Shimoda (2010) Phase Diagrams of Stereocontrolled Poly(*N*,*N*-diethyl-acrylamide) in Water, *Macromolecules* **43**(6), 3120–3121.

国際会議

Y. Katsumoto: Tacticity effects on the phase behaviors of poly(*N*-isopropylacrylamide) and poly(*N*,*N*-diethylacrylamide) in water. Pacifichem 2010 (Dec., 2010, Hawaii, USA) (Oral)

K. Okada, M. Sakai, T. Nakashima, A. Suemitsu, C. Huang, H. Yagi, H. Katayanagi, K. Mitsuke, and K. Tabayashi: Dissociative photoionization of perfluorocyclobutane and *cis*-hexafluorocyclobutane. International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (MPS2010) (Sept., 2010, Sendai, Japan) (Poster)

M. Yamamoto and Y. Katsumoto: Tacticity effect on the intra- and intermolecular interaction of poly(2-hydroxyethyl methacrylate). Pacifichem 2010 (Dec., 2010, Hawaii, USA) (Poster)

T. Shimoaka and Y. Katsumoto: Relationship between hydrogen-bonding patterns and strength for water and methanol liquids studied by quantum chemical calculation and infrared spectroscopy. Pacifichem

2010 (Dec., 2010, Hawaii, USA) (Poster)

国内学会

勝本之晶：立体制　によるアクリルアミド系高分子の　　性　化とその分子論理　。関東高分子若手会ミ　シンポジウム（2010 年 9 月，支　　）（　　講演）

勝本之晶：　　応　性高分子の分子論～立体　　性と分子内・分子間相互作用～。関西学院大学理工学部講演会（2010 月 6 月，三田）（　　講演）

勝本之晶：　外分光と量子化学計算で調べる機能性高分子の相互作用と　所構造。日本分光学会　　外分光部会・　外ラマン分光部会合同シンポジウム（2011 年 1 月，広島）（　　講演）

勝本之晶:振動分光と量子化学計算で調べる分子間･分子内相互作用。　43　OK セミナー(2011 月 2 月，大阪）（　　講演）

勝本之晶, 久保崎範行, 宮田　　：立体　　性が Poly(*N*-isopropylacrylamide)の　水性に　える　　とその分子論的理　。　59　高分子学会討論会（2010 年 9 月，　　）（口　）

勝本之晶, 久保崎範行, 宮田　　：*N*-isopropylacrylamide 二量体の立体配置が　　和に　える　　。　33　　化学シンポジウム（2010 年 11 月，京都）（口　）

勝本之晶,　ノ原 好, 田中　幸：　　にキラリティを有するアクリルアミド系高分子の　　応　　性。　59　高分子学会年次大会（2010 年 5 月，横　）（ポスター）

中野　也，小木　　生,　　理　，新　　木,　木原　，勝本之晶,　山　：イ　タクチックな立　　性を有するポリ(*N*-イ　プロ　ルアクリルアミド)水　　の　イルーグロ　ュール転　と　ル化の　析。　59　高分子学会年次大会（2010 年 5 月，横　）（ポスター）

光　，岡田和正, 寺島　美,　　，鈴木　，長岡　一 : Simulation of kinetic energy release in the fragmentation of perfluorocyclobutane at the F and C K-edges。　26　化学反応討論会（2010 年 6 月，東広島）（ポスター）

　　通，岡田和正：電子　　法による 2-フルオロ　リジンの内　　・　　。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（ポスター）

勝本之晶,　ノ原 好, 田中　幸：水　　中で　　応　性を　すキラルなアクリルアミド系高分子。　59　高分子学会討論会（2010 年 9 月，　　）（ポスター）

山本光　，勝本之晶：Poly(2-hydroxyethyl methacrylate)の立体　　性が　　間や　　ー水分子間の相互作用に　　す　　。　59　高分子学会討論会（2010 年 9 月，　　）（ポスター）

土井　　，勝本之晶：立体制　したアクリルアミド系高分子　　に対する水分子　　程の　　。　59　高分子学会討論会（2010 年 9 月，　　）（ポスター）

勝本之晶，土井　　，Winnik Françoise：水　　中における poly(2-isopropyl-2-oxazoline)の　ン　　メーションと　　和。　59　高分子学会討論会（2010 年 9 月，　　）（ポスター）

木　　，　　通，岡田和正：電子　　法によるア　リンの内　　・　　。2010 年日本化学会西日本大会（2010 年 11 月，　本）（ポスター）

下　　，勝本之晶：　　状　にある水の uncoupled OH　　振動の　数と水素結合エ　ル　ーの相関。　33　　化学シンポジウム（2010 年 11 月，京都）（ポスター）

下田　　，勝本之晶：立体　　性が Poly(*N*-ethylacrylamide)の　水性に　える　　。　33　化学シンポジウム（2010 年 11 月，京都）（ポスター）

谷　美子，中島　，岡田和正,　　，鈴木　，長岡　一：*cis*-　キ　フルオロシクロタンの　素 K 端での光　　と　　。　24　日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（2011 年 1 月，つく　）（ポスター）

勝本之晶，土井　　，Winnik Françoise：Poly(2-isopropyl-2-oxazoline)水　　の相分　と結晶化挙動における　所構造　化。　6　LSW シンポジウム（2011 年 1 月，　　）（ポスター）

勝本之晶，土井　　，Winnik Françoise：Poly(2-isopropyl-2-oxazoline)の水　　中における相分　　・結晶化挙動と　所構造　化。高分子基礎研究会 2010（2011 年 1 月，水上）（ポスター）
中島　，岡田和正，　光　，　　，鈴木　，長岡　一：フッ素内　　*cis*-　キ　フル　オロシクロ　タンの光　　イナミクスの研究。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（ポスター）
下田　，勝本之晶：立体　　性が Poly(*N*-ethylacrylamide)水　　の相分　挙動に　える　　。日本化学会　91　　年会（2011 年 3 月，横　）（ポスター）

学生の学会発表実績

	国際学会　　数	国内学会　　数
学部 4 年生	0	2
博士課程前期	1	6
博士課程後期	1	3
博士課程前期・後期共	1	0

社会活動 学外委員
・学協会役員，委員
　岡田和正，　日本化学会中国　国支部　務幹事 (2007 年度)
・外部評価委員な
・講習会・セミナー講
　勝本之晶，　JAIMA　ンフ　　ンス日本分光学会　外・ラマン分光部会講習会，(2006 年 8 月，千　)，振動ス　クトルの　析法：振動ス　クトルの　　量　析～　　メトリックス～入門
・高大連携事業
　岡田和正，　　イエンス・　ートナーシップ・プログラム(SPP)事業「研究者　へい講座」(2004 年 11 月，広島　立西　　業高等学　)
　岡田和正，　広島　高等学　教科学力養成事業，平成 22 年度　4　講演 (2011 年 2 月，広島　立　三　田高等学　)
・論文　　集委員
　岡田和正，　日本分光学会「分光研究」　集委員 (2003–2007 年度)
・討論会の組織委員
　岡田和正，　2004 分子構造総合討論会実行委員会事務　(2003–2004)
　岡田和正，　　20　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，　　26　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–)

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　　CD　　子相互作用による　　物の絶対配置　定法の確立」代表　　井信造，分担　勝本之晶
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　　性の　を分子　　ルで　明する　み」代表　勝本之晶

平成 22 年度科学研究費補助金基盤研究(C),「　　の同　計測と実　間追跡による　安定イオンの生成・　　に関する研究」代表　岡田和正

受　状況（学生）
　　通(D3)，平成 22 年度成績　　学生「広島大学エクセ　ント・スチューデント・ス　ラシップ」(2010)
下　　(D3)，平成 22 年度理学研究科長表彰 (2011)

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–）

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　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　を，量子化学における理論と実　の　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　測を，ナノ　イエンス分野においてはナノ　イ　の分子設計・反応性　測をめ　している。

quasi-classical direct ab initio MD 法による分子の平　構造：quasi-classical direct ab initio MD 法は，期運動エ　ル　ーが調和振動子の固有振動エ　ル　ーと等しくなるように　期運動量を　め，また，MD の各ステップでポテンシ　ルエ　ル　ーを ab initio MO 法により計算する手法である。この手法を OH，H_2O，C_2H_2 に適用し，それらの r_0，r_z，r_g 構造を計算した。それ　れの平　構造を実測　および量子力学的な平　　と　　することにより，正確な平　構造を，古典 MD から　き出すことができることを　した。

　　基のスタッキングエ　ル　ー：　　の二重ら　　は，水素結合エ　ル　ーとスタッキング相互作用によって保　されている。水素結合エ　ル　ーには，A=T と G≡C の二種の　いだけだが，スタッキング相互作用は，　基の配　によってそのエ　ル　ーが異なる。　基対間のスタッキング相互作用エ　ル　ーを RI-MP2/aug-cc-pVDZ の計算　　ルで求めることにより，DNA オリ　マーの安定性を　測することができることを　した。

水　　と　したシラン　ップリング　の指　領域における振動 SFG 分光：　水　　と　したシラン　ップリング分子　の振動 SFG 分光を，水による　外光の　　による　害を受けないように，基　　からプロー　光を入射さ　実行した。この配置での測定を実現するためシラン　ップリング　の基　は，この目的のために開発したシリ　　フッ化　ルシウム基　（シリ　　の　み：125 nm，50000-1100 cm^{-1} の領域で　　75%以上）を　用した。　測定として行ったフルオ　セイン色素　分子　の水　　中での振動 SFG ス　クトルでは，pH　存性を反　した　分子　の振動 SFG ス　クトルが　測された。

プラチナ担　二　化チタン　　による　バル　の光分　　程の　間分　　外分光：　プラチナ担　二　化チタン　　の光　　作用によって，　バル　　スが *t*-　チルラジ　ルを　　してイ　タンへと分　される　程を，　間分　　外分光法を用いて　測した。光　　電子の伝　　バンド内　　の　間挙動から，二　化チタン内に生成した正　が，50 ns 以内に　　バル　との反応によって　費されていることを確　した。さらに，1800~1200 cm^{-1} の領域で振動バンドの　間化を　測した。分　によって　　する　バル　のバンドとは異なる　間挙動を　す 2 種　のバン

ドが　測され，中間体である *t*-　チルラジ　ルと生成物であるイ　　タンに　属できた。

発表原　論文

T. Yamada and M. Aida (2010) Structures of Molecules in Ground and Excited Vibrational States from Quasiclassical Direct ab Initio Molecular Dynamics *Journal of Physical Chemistry A*, **114** (21), 6273.

T. Nagahara, T. Suemasu, M. Aida and T. Ishibashi (2010) ◎Self-Assembled Monolayers of Double-Chain Disulfides of Adenine on Au: An IR-UV Sum-Frequency Generation Spectroscopic Study *Langmuir*, **26**, 389.

国際会議

Misako Aida, Nana Hattori, Ryuta Masaki, Masato Tanaka, Michio Katouda, Shigeru Nagase: Sequence specificity of base-pair stacking interaction energy in B-DNA. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem2010), (December 2010, Honolulu, Hawaii, USA) （　　講演）

Misako Aida: Specificity of Amino Acid Residue: Dipole Moment and Dispersion Force. Pepcon-2011 (March 2011, Beijing, China) （　　講演）

Misako Aida, Hiroshi Ando, Nahoko Furuta, Miki Maeda: Quantum life chemistry from computational chemistry and chemical information. Pacifichem2010 (December 2010, Honolulu, Hawaii, USA)（講演）

T. Ishibashi: Doubly-resonant SFG studies of organic monolayers with widely tunable UV/VIS probe. The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem2010), Recent Advances in Studies of Molecular Processes at Liquid Interfaces, (December 2010,Honolulu USA) （　　講演）

Misako Aida: Promotion of gender equality in education and research in Hiroshima University. Pacifichem2010 (December 2010, Honolulu, Hawaii, USA) （一般講演）

Adchara Padermshoke, Masato Ara, Hirokazu Tada, Taka-aki Ishibashi: Vibrational SFG Spectra of *n*-Octadecyltrichlorosilane Monolayers Chemisorbed on SiO_2-deposited CaF_2 Substrates. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (December 2010, Higashi-Hiroshima, Japan)（一般講演）

Shunsuke Mieda, Misako Aida: Theoretical study on dipole moments of amino acid residues Pacifichem2010 (December 2010, Honolulu, Hawaii, United States) （一般講演）

Hidenori Miyamoto, Misako Aida: Dynamical motion and IR spectra of glycine in aqueous solution by means of direct ab initio QM/MM-MD. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (December 2010, Higashi-Hiroshima, Japan) （一般講演）

Hideo Doi, Misako Aida: Polynomial time algorithm for the graph isomorphism problem. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium （2010 年 12 月，東広島）（一般講演）

Takuya Okamoto, Misako Aida: DFT Calculation of Molecular Adsorption on Chrysotile Asbestos Surface. The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (December 2010, Higashi-Hiroshima, Japan) （一般講演）

Tomoki Yoshida, Misako Aida: Interaction free energy landscape between biological molecule and water using direct ab initio MO-MC. Pacifichem2010 (December 2010, Honolulu, Hawaii, USA) （ポスター）

Hidenori Miyamoto, Misako Aida: QM/MM free energy study on the tautomerization of amino acid in water cluster. Molecular and Ionic Clusters Conference 2010 (September 2010, Niigata, Japan)（ポスター）

Dai Akase, Misako Aida: H-bond patterns of water hexamer: dipole moment and hydrated electron cluster. Molecular and Ionic Clusters Conference 2010 (September 2010, Niigata, Japan)（ポスター）

Dai Akase, Misako Aida: H-bond patterns of water cluster: Structure distributions at finite temperatures. Pacifichem2010 (December 2010, Honolulu, Hawaii, United States) （ポスター）

国内学会

相田 美砂子：水分子→水クラスター→水，理論化学からのアプローチ。日本分光学会 中国　国　支部 平成 22 年度年次講演会（2011 年 1 月，東広島）（　講演）

石橋 孝章：有機　分子　／　の振動和　発生分光。日本分光学会　外分光部会・　外ラマン分光部会　合同シンポジウム「　外・　外分光法により　る　相・表面・バイオプロセス」（2011 年 1 月，広島）（　講演）

部　々，相田 美砂子：　基間相互作用における　体　果。　13　理論化学討論会（2010 年 5 月，北　道）（一般講演）

古田　子，相田 美砂子：　き平行　リックス構造の安定性についての　的分子　道法による研究。　13　理論化学討論会（2010 年 5 月，北　道）（一般講演）

山田　範，相田 美砂子：direct ab initio MD，post-VSCF，および　動論による基本　の計算。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（一般講演）

小西　大，Padermshoke Adchara，　正人，　田 博一，石橋 孝章：シリ　上の化学　有機　分子　ー水界面の振動和　発生分光。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（一般講演）

岡本 拓也，相田 美砂子：クリ　タイルアス　ストへの分子　に関する理論化学的研究。　33　情報化学討論会（2010 年 10 月，　島）（一般講演）

部　々，相田 美砂子：　基間のスタッキング相互作用と水素結合における　体　果。　33　情報化学討論会（2010 年 10 月，　島）（一般講演）

古田　子，相田 美砂子：プリオンタン　ク質異　型の構造についての　的分子　道法による研究。　33　情報化学討論会（2010 年 10 月，　島）（一般講演）

安藤 広　，吉田　，相田 美砂子：アル　ン　の水和構造に関する理論化学的研究。2010 年日本化学会西日本大会（2010 年 11 月，　本）（一般講演）

原田 光，吉田　，相田 美砂子：　ン　ン環と　チオンの協同　果についての　的分子　道法による理論化学的研究。2010 年日本化学会西日本大会（2010 年 11 月，　本）（一般講演）

三　俊　，相田 美砂子：DNA　基配　とアミノ　の　極子ー　極子相互作用に基づいた選択性　測。2011年 日本化学会　91　年会（2011年3月，横　）（一般講演）

Akihiro Maeda, Taka-aki Ishibashi : Time-resolved IR observation of photocatalytic reaction process of pivalic acid on titanium dioxide.　26　化学反応討論会　（2010 年 6 月，東広島）（ポスター）

Hideo Doi, Misako Aida,: Hydrogen Bonding Matrix analysis of Water Cluster, 2010 年　26　化学反応討論会　（2010 年 6 月，東広島）（ポスター）

前田 俊　，橋本　，古　行夫，石橋 孝章：　リ　ンテトラ　ル　キシルジイミド　体の　の振動電子二重共　SFG 分光 (2)。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（ポスター）

前田　宏，石橋 孝章：二　化チタン光　による　バル　分　反応　程の　囲気　存性ー　間　分　外分光法を用いた　測。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（ポスター）

大，相田 美砂子：水クラスターの水素結合　ターンとトポロジー　析。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（ポスター）

小西 宏明，小西　大，石橋 孝章：マ　イミド基を　用したチオール化合物のシリ　上への固定と振動 SFG 分光への応用。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（ポスター）

西田　，西　，石橋 孝章：　フタロシア　ン　の振動電子二重共　SFG 分光。　4　分子科学討論会（2010 年 9 月，大阪）（ポスター）

安藤 広　，吉田　，相田 美砂子：Theoretical study on the reaction path of covalent binding ligand

to PPARγ. CBI 学会 2010 年大会（2010 年 9 月，東京）（ポスター）

Shunsuke Mieda, Misako Aida：Ab initio MO study on weighted-average dipole moments of amino acids. CBI 学会 2010 年大会（2010 年 9 月，東京）（ポスター）

Shunsuke Mieda, Misako Aida：Theoretical study on dipole moments of amino acids with different chirality. 2010 年日本生物物理学会　48　年会（2010 年 9 月，宮　）（ポスター）

大，相田 美砂子：水クラスターの水素結合　ターンに基づく水和電子クラスターの異性体　。CMSI 研究会　一部会「新量子相・新物質の基礎科学」（2010 年 11 月，名古　）（ポスター）

土　英男，相田 美砂子：「　大　　水素結合　ットワークの　析のためのアル　リ　ム開発」CMSI 研究会　一部会「新量子相・新物質の基礎科学」（2010 年 11 月，名古　）（ポスター）

前田　宏，石橋 孝章：　間分　　外分光法を用いた二　化チタン光　　上の　バル　分　反応　程の　囲気　存性の　　。　17　光　　シンポジウム（2010 年 12 月，　　）（ポスター）

学生の学会発表実績

	国際学会　　数	国内学会　　数
学部 4 年生	0	1
博士課程前期	2	8
博士課程後期	6	14
博士課程前期・後期共	1	0

セミ　　ナー・講演会開　実績

相田 美砂子，石橋 孝章，「　134　量子生命科学セミナー」（2010 年 9 月 8 日）
相田 美砂子，「　135　量子生命科学セミナー」（2011 年 3 月 7 日）
相田 美砂子，安倍　学，「　136　量子生命科学セミナー」（2011 年 3 月 18 日）
相田 美砂子，　業人材セミナー（　7　～　11　）（2010 年 5 月～7 月）
相田 美砂子，　業人材セミナー（　12　～　16　）（2010 年 10 月～2011 年 3 月）
相田 美砂子，　2　広島大学若手研究人材養成センター成果報告会（2010 年 9 月）
相田 美砂子，　3　広島大学若手研究人材養成センター成果報告会（2011 年 3 月）
相田 美砂子，　2　広島大学若手研究人材養成シンポジウム（2011 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　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　外ラマン部会 幹事（2005－）
石橋 孝章，日本分析機　工業会 ラマン分光分析通　JIS 新　原　作成委員会委員（2008－2009）

・外部評価委員な
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,　 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
相田 美砂子，広島大学テ　 セミナー「　 人は　人いるの　～地　外文明の数を　科学的　に　える～」「　2　地　 生と生命　生の　」（2010 年 11 月放　）
相田 美砂子，「広大システム改革による女性研究者活躍　進」シンポジウム～活躍する女性研究者からのメッセージ～，　ーディ　ーター（2011 年 3 月 17 日，広島　）

・論文　 集委員
相田 美砂子，日本生物物理学会「生物物理」　集委員（2003－2004）

・討論会の組織委員
相田 美砂子，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium　実行委員長　（2010 年 12 月）

　 学　連携実績
相田 美砂子，共同研究「金属エロージョンにおける反応　程の研究」（　）日本　 所広島　作所

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（イノ　ーション　出若手研究人材養成）「地方協　による　戦する若手人材の養成計画」実施責任者（2009－2013）
相田 美砂子，科学技術振興調整費（女性研究者養成システム改革加速）「広大システム改革による女性研究者活躍　進」実施責任者（2010－2014）

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
「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）

受　状況（学生）
前田　 宏（博士課程前期 3 年）
　 26　化学反応討論会　 ストポスター　受　（2010 年 6 月，東広島）
土　 英男（博士課程前期 1 年）
Student Award, The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, Higashi-Hiroshima, Japan)

座長を行った学会・討論会の名
石橋 孝章,　The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, 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２２年度は，博士課程前期に３名，後期に３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 22 年度（2010 年度）に受けた研究費等の総数を　す。

項目	分	数
文部科学省科学研究費補助金	特定領域研究	3
	新学術領域	2
	基盤研究(A)	1
	基盤研究(B)	6
	基盤研究(C)	8
	戦　　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（　　）		8

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　査会専門委員　び国際事業委員会書面　査員
井口佳哉，日本分光学会学会　　集委員(2007)
福原幸一，日本　測定学会委員(2005)
水田　勉，日本化学会 中国　国支部　務幹事　2005年3月－2006年2月
水田　勉，日本化学会 中国　国支部会計幹事　2006年3月－2007年2月
水田　勉，錯体化学会 理事　2006年10月－2008年9月
藤原照文，日本化学会，中国　国支部西日本大会幹事（2003）
藤原照文，日本化学会，中国　国支部　務幹事（2004）
藤原照文，日本化学会，中国　国支部事務　長（2007）
藤原照文，日本化学会，中国　国支部地区幹事（2008）
藤原照文，日本分析化学会，中国　国支部　務幹事（1989～2005）
藤原照文，日本分析化学会，中国　国支部　任幹事（2006～）
藤原照文，日本　　協会，評議員（2005～2006）
塚原　聡，日本分析化学会　　支部幹事（1999，2002～2003）
塚原　聡，日本分析化学会　　支部　任幹事（2000～2001）
塚原　聡，日本分析化学会若手交流会　　支部委員（2001～2002）
塚原　聡，日本　　出学会理事（2004～）
塚原　聡，日本分析化学会中国　国支部　務幹事（2005～）
灰野岳晴，新　素材　　研究会幹事（2001－）
灰野岳晴，生体機能関連化学部会 中国　国支部若手幹事（2004－2005）
灰野岳晴，　スト・　スト化学研究会幹事（2006－）
灰野岳晴，有機合成化学協会中国　国支部幹事（2007－）
灰野岳晴，日本化学会中国　国支部　務幹事（2008）
山崎勝義，日本化学会中国　国支部　務幹事 (2006)
山崎勝義，日本化学会中国　国支部会計幹事 (2008)
山崎勝義，日本化学会中国　国支部事務　長 (2009)
山崎勝義，日本化学会　8　化学イノ　ーションシンポジウム　備委員会事務　長 (2009)
山崎勝義，日本化学会物理化学ディ　ジョン幹事 (2010)
山崎勝義，日本分光学会代議員 (2004, 2006～)
山崎勝義，日本分光学会支部　査 (2006～)
山崎勝義，日本分光学会中国支部幹事 (2010)
高口博志，日本化学会代議員 (2007)
高口博志，日本化学会中国　国支部　務幹事 (2010)
高口博志，原子　　研究協会行事委員 (2004～2007)
高口博志，原子　　研究協会運営委員 (2008～)
高口博志，原子　　研究協会幹事（行事委員長）(2009～)
小島聡志，有機合成化学協会中国　国支部事務　(2003　)

河内　敦，　イ素化学協会理事，(2008　)
安倍　学，分子情報　イナミクス研究会事務　(2005-2007)
安倍　学，分子情報　イナミクス研究会代表(2007-)
安倍　学，基礎有機化学会・副会長（2010-）
岡田和正，日本化学会中国　国支部　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　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　外ラマン部会 幹事（2005－）
石橋孝章，日本分析機　工業会 ラマン分光分析通　JIS新　原　作成委員会委員（2008－2009）

・外部評価委員な

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，　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

山崎勝義，放　大学面　授業(集中型)講　「大気化学」(2001年2月，放　大学新　学習センター)
山崎勝義，広島大学理工フェア「　イエンス(　科学　理学)の　力と　しみ方」(2007年5月，福山　工会議所)
高口博志，上　大学理工学部物理学科　ロキウム「開　系原子分子の　　程と化学反応」(2007年5月，上　大学)
高口博志，　4　原子・分子・光科学(AMO)討論会ディス　ッションリー　ー (2007年5月，電気通信大学)
高口博志，分子科学若手の会　の学　講　「ラジ　ル分子の反応と分光の基礎」(2007年8月，長良　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・　　状　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　画：　イ　フ　ーマンス　ン　ューティングセミナー「数　シミュ　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「　行書の　開と機関リポジトリへの期　」(2007年10月，広島大学図書館)
山崎勝義，中　国6大学による　1　理系大学教育に関する研究フ　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　)
山崎勝義，図書館における学習環境　　に関する　　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・　　状　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，　のように研究計画調書を書け　よいか」(2009年9月，広島大学)

山崎勝義，東北大学理学部化学教室 一般　　会「振動　　分子のエ　ル　ー　動と化学反応の速度論的研究」(2010年10月，東北大学)
山崎勝義，　　大学大学院理学研究科 講演会「振動　　分子のエ　ル　ー　動と化学反応の速度論的研究」(2010年12月，　　大学)
山崎勝義，　イエンス　フェ「化学反応の　に　る　」(2011年3月，広島大学)
山本陽介，平成21年度岡山大学次　代研究者・異分野研究連携育成支援事業による講演会「原子価５配位および６配位　素　　ウ素化合物の合成とその後の展開」（2010年10月，岡山大学環境理工学部）
山本陽介，岡山　高等学　教育研究会理化部会化学分科会化学教育研究会「大学での有機化合物の合成研究について～高　化学の授業に役立つ　～」(2010年11月, 岡山　立倉　工業高　)
勝本之晶，JAIMA　ンフ　　ンス日本分光学会　外・ラマン分光部会講習会，(2006年8月，千　　)，振動ス　クトルの　析法：振動ス　クトルの　　量　析～　　メトリックス～入門
相田美砂子，広島大学テ　　セミナー「　　人は　人いるの　～地　外文明の数を　科学的に　える～」「　2　地　　生と生命　生の　」（2010年11月放　）
相田美砂子,「広大システム改革による女性研究者活躍　進」シンポジウム～活躍する女性研究者からのメッセージ～，　ーディ　ーター（2011年3月17日，広島　）

・高大連携事業

水田　勉，　取　立　取東高等学　　SSH自　化学実　　（2010年9月広島大学）
久保和幸，　取　立　取東高等学　　SSH自　化学実　　（2010年9月広島大学）
藤原照文，　　授業，2005年10月，広島　立　日　高等学　（　日　）
塚原　聡，　　授業，2009年9月17日，出　　（島　　立出　高等学　）
　　博，　田隆夫，三好隆博，　野　也，田島文子，中久　　，野々　　子，三　　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　ーションに戦しよう ～中高生のための　ン　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　)
山崎勝義，大学　　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　立広島　実高等学　)
山崎勝義，大学　　講義「大学の化学と物理化学の　しみ方」(2006年9月，広島　立広島中・高等学　)
山崎勝義，大学　　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　立広島　実高等学　)
山崎勝義，大学　　講義「　イエンス(　科学　理学)の　力と　しみ方」(2010年11月，　取　立　取東高等学　)
山本陽介，2010年9月，　立広島高等学　，　　授業
山本陽介，2010年7月，広島大学附属高等学　SSH事業
小島聡志，2010年6月，島　　立　田高等学　，　　授業
岡田和正，　イエンス・　ートナーシップ・プログラム(SPP)事業「研究者　へい講座」(2004年11月，広島　立西　　業高等学　)
岡田和正，広島　高等学　教科学力養成事業，平成22年度　4　講演 (2011年2月，広島　立　三　田高等学　)

・論文　　集委員

藤原照文，日本分析化学会，「分析化学」　　集委員（2003～2004）
塚原　聡，日本　　出学会，「Solv. Extr. Res. Devel. Jpn.」　　集委員（2007～）
高口博志，日本化学会「化学と工業」ト　ックス　集委員 (2001～2002)
高口博志，原子　　研究協会　集委員 (2006)
山本陽介，Journal of Physical Organic Chemistry, Editorial Board (2005-)
安倍　学，ARKIVOC EDITORIAL BOARD OF REFEREES (2005-)
安倍　学，Bulletin of the Chemical Society of Japan (2009-)
安倍　学，Australian Journal of Chemistry (2010-)
岡田和正，日本分光学会「分光研究」　集委員 (2003–2007年度)
相田美砂子，日本生物物理学会「生物物理」　集委員（2003－2004）

・学会・討論会の組織委員

水田　勉，錯体化学会 錯体化学討論会運営委員　2006年10月～
水田　勉，錯体化学会　56　錯体化学討論会広島実行委員　2006年
藤原照文，日本分析化学会　64　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　71　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　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　56年会実行委員会委員（2006～2007）
塚原　聡，日本分析化学会　63　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　56年会実行委員（2006～2007）
塚原　聡，日本分析化学会　71　分析化学討論会実行委員会委員（2009～2010）
塚原　聡，　29　日本　　出討論会実行委員長（2010）
灰野岳晴，　6　機能性　スト　スト化学研究会　マーセミナー実行委員長，2000年
灰野岳晴，　18　シクロフ　ン研究会実行委員，2003年
灰野岳晴，　17　生体機能関連化学若手の会　マースクール実行委員長，2005年
山崎勝義，　18　化学反応討論会実行委員会委員 (2001～2002)
山崎勝義，　26　化学反応討論会実行委員会委員長 (2009～2010)
高口博志，　15　化学反応討論会実行委員会委員 (1999)
高口博志，　14　理論化学シンポジウム実行委員会委員 (2007)
高口博志，　26　化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)
高口博志，原子　　研究協会　35　年会実行委員会委員長 (2009～2010)
高口博志，原子　　研究協会　36　年会実行委員会委員長 (2010～2011)
高口博志，分子科学会　画委員分子科学会シンポジウム担当 (2010～2011)
高橋　修，　26　化学反応討論会実行委員会委員 (2009～2010)
高橋　修，　16　化学反応討論会実行委員会委員 (2000)
安倍　学，基礎有機化学討論会組織委員(2007-)
岡田和正，2004分子構造総合討論会実行委員会事務　(2003–2004)
岡田和正，　20　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，　26　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)

相田美砂子，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium　実行委員長　（2010年12月）

・その他の委員

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-)

藤原照文，日本分析化学会中国　国支部　37　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　国支部　42　分析化学講習会実行委員（2005）

藤原照文，日本分析化学会中国　国支部　47　分析化学講習会実行委員（2010）

塚原　聡，日本分析化学会中国　国支部　42　分析化学講習会実行委員（2005）

塚原　聡，日本分析化学会会　「ぶ　　き」　集委員（2008～2009）

塚原　聡，日本分析化学会中国　国支部　47　分析化学講習会実行委員（2010）

岡本泰明，日本分析化学会中国　国支部　42　分析化学講習会実行委員（2005）

岡本泰明，日本分析化学会中国　国支部　47　分析化学講習会実行委員（2010）

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　2011年3月）

灰野岳晴，広島大学薬品管理システム専門委員会委員長（2011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　2011年３月）

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 (2009～2010)

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～)

山本陽介，化学系研究設備有　活用　ットワーク中国地域委員長（2005-2010）

山本陽介，中国　国・化学と工業　　会　任運営委員

山本陽介，広島大学薬品管理システム専門委員会委員長（2006.4-2011.3）

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-)

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（2006-2011.3）

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　外　　プログラム　担当研究者（理工　系：　ステナ　ル社会の実現に　　する自　科学系国際的若手研究者の育成プログラム）（2010.2-）

小島聡志，広島大学作業環境測定専門委員会委員（2006-）

小島聡志，広島大学日韓共同理工系学部留学生事業実施部会委員（2006-）

小島聡志，理学部入学選抜方法検討委員（2009.4-2011.3）

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–)

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–）

・他研究機関での講義・　員

西原禎文，大阪　立大学大学院理学系研究科物理科学専攻，　員准教授，2010.4.1-

山崎勝義，集中講義「物理化学特選I，物理化学特別講義B」(2010年10月，東北大学)

山崎勝義，集中講義「物理化学特論A」(2010年12月，　　大学)

山本陽介，名古　大学大学院理学研究科，　　講　，2010年5月10日-11日

山本陽介，京都大学大学院工学研究科，　　講　，2011年1月26日-27日

平賀良知，広島　　業科学技術研究所，研究協力員，1998年4月1日～
岩倉いずみ, お　の水女子大学大学院 人間文化　成科学研究科，　　講　, 2010年7月1日-2010年9月30日

・座長を行った学会・討論会の名

江幡孝之，5th Russian - Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 15-17, 2010, Orenburg state university, Russia)
井口佳哉，”The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium”　(Dec. 4-5, 2010, Hiroshima)
水田　勉，　60　錯体化学討論会（2010年9月，大阪　）
藤原照文，　71　分析化学討論会（2010年5月，　江）
藤原照文，日本分析化学会　59年会（2010年9月，　台）
塚原　聡，　71　分析化学討論会（2010年5月，　江）
塚原　聡，日本分析化学会　59年会（2010年9月，　台）
塚原　聡，　29　日本　　出討論会（2010年11月，東広島）
岡本泰明，　71　分析化学討論会（2010年5月，　江）
灰野岳晴，Joint Symposium of Post 5th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (POST-ISMSC5) and The 6th Symposium on Host-Guest Chemistry (HGCS2010) (Jun., 2010, Osaka, Japan)
灰野岳晴，International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010 (ICSM2010) (Jul., 2010, Kyoto, Japan)
灰野岳晴，The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2010) (Dec., 2010, Hawaii, USA)
灰野岳晴，　21　基礎有機化学討論会（2010年9月，　知）
灰野岳晴，日本化学会　91　　年会（2011年3月，　　）
池田俊明，日本化学会　91　　年会（2011年3月，　　）
山崎勝義，　26　化学反応討論会，東広島，2010年6月
山本陽介，　21　基礎有機化学討論会（2010年9月，名古　）
河内　敦，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, Hiroshima)
小島聡志，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, Hiroshima)
安倍　学，　21　基礎有機討論会，名古　，2010年9月
安倍　学，日本化学会　91　　年会，　　，2011年3月
安倍　学，The 2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies ， Honolulu，2010年12月
安倍　学，2010 Korean-Japan Bilateral Symposium on Frontier Photoscience，Doejon，2010年10月
安倍　学，The 5th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules, Taipei，2010年10月
石橋孝章，The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, Higashi-Hiroshima, Japan)

・セミナー・講演会開　実績

江幡孝之, Sotiris S. Xantheas　博士(　シフィックノースウエスト国立研究所) “The Performance of Density Functional Theory for Hydrogen Bonded Systems : Shortcomings and Solutions” 2011年3月7日 (Hiroshima University)

山崎勝義，2010年度　野　クチ　ー，学術講演会　　人
相田美砂子，石橋 孝章,「　134　量子生命科学セミナー」（2010年9月8日）
相田美砂子,「　135　量子生命科学セミナー」（2011年3月7日）
相田美砂子，安倍　学,「　136　量子生命科学セミナー」（2011年3月18日）
相田美砂子，　業人材セミナー（　7　～　11　）（2010年5月～7月）
相田美砂子，　業人材セミナー（　12　～　16　）（2010年10月～2011年3月）
相田美砂子，　2　広島大学若手研究人材養成センター成果報告会（2010年9月）
相田美砂子，　3　広島大学若手研究人材養成センター成果報告会（2011年3月）
相田美砂子，　2　広島大学若手研究人材養成シンポジウム（2011年3月）

・　学　連携実績

福原幸一，共同研究「　　度・　融点新　化合物を応用した　滑　　の開発」(2009-)
福原幸一, 特　出願:分　オキ　アルキル　を有している化合物およびその応用･特願2010-256887・福原 幸一　他・国立大学法人広島大学　他・出願日2010/11/17
平賀良知，独立行　法人　　総合研究所,「　　の新　リ　ー　を用いた　　対　化に関する研究」
相田美砂子，共同研究「金属エロージョンにおける反応　程の研究」（　）日本　　所広島　作所

・国際共同研究・国際会議開　実績

江幡孝之，5th Russian - Japanese Seminar “Molecular and Biophysical Magnetoscience” (Sept. 15-17, 2010, Orenburg state university, Russia)
井上克也，4rd, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, 組織委員長,　　, 2009.11.15-17
井上克也，キラル　性体の　気構造　明国際共同研究：ス　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　　研究　2002-
井上克也，キラル　性体の　気　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　デミー・チェルノ　フ　・固体物性研究所　　ルス　　による高速　化　程研究　2000-
井上克也，キラル　性体の　気共　国際共同研究：ロシア科学ア　デミー・チェルノ　フ　・固体物性研究所　電子ス　ン共　(ESR)研究　2002-
井上克也，　次元　性体に関する国際共同研究：フランス・ULP　2008-
藤原照文，The 15th International Conference of Flow Injection Analysis (ICFIA 2008) 組織委員（2008）
灰野岳晴，International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals 2010 (ICSM2010) 組織委員（2010）
安倍　学，　国 CNRS Universite de Reims との国際共同研究
安倍　学, International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules 組織委員(2005-)
平賀良知，　国 Texas Tech 大学との国際共同研究

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　一，　俊　，　克夫
先端物質科学研究科分子生命機能科学専攻
　田中　和
　薬学総合研究科
　小　孝一　，古　一　，原田 隆範
工学研究科
　本　，大倉 和博
特任助教
　吉田
研究員
　Adchara Padermshoke，　本　之

　研究活動の概要
　量子生命科学プロジェクト研究センター（*Center for Quantum Life Sciences*　：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。　大化しつつあるライフ　イエンス分野の情報から有　な概念を　出するためには, IT 技術を　　することが必　であり，また，　　の大学に　強く　っている　成の枠にとらわれることなく，　合領域の研究者の自　な連携が必　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，　　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 15～19 年度は，科学技術振興調整費 新興分野人材養成「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」の推進　体として活動した。このプロジェクトは，専攻横　的な教育と研究の土　が広島大学に生まれるきっかけとなり，理学研究科内においては，附属理学融合教育研究センター設置に結びついた。また，平成 21 年度科学技術振興調整費「イノ　ーション　出若手研究人材養成」（文部科学省）として「地方協　による　戦する若手人材の養成計画」が採択され，量子生命科学プロジェクト研究センター（QuL*i*S）は，その推進　体として活動している。「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラム」アドバンスト　ースの　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　している。

　平成 22 年度の活動の記
　1　量子生命科学プロジェクト研究センターの　点
総合研究実　　7　の共用ス　ース（701 室）をセンターの　点として　用している。さらに，

総合研究実　　6　（　　ット No.2）を計算機室として　用している。研究員や大学院生が一
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　による　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　した。

「　業人材セミナー」の開

7	（ ）トク　マ	平成 22 年 5 月 14 日
8	バ　　ック日立（ ）	平成 22 年 5 月 28 日
9	博士の生き方	平成 22 年 6 月 11 日
10	（ ）日本　　所	平成 22 年 6 月 18 日
11	田工業（ ）	平成 22 年 7 月 16 日
12	広島大学　学・地域連携センター	平成 22 年 10 月 15 日
13	中外テクノス（ ）	平成 22 年 10 月 29 日
14	イキョー　シ　ワ（ ）	平成 22 年 11 月 12 日
15	（ ）ジェイ・エム・エス	平成 23 年 1 月 19 日
16	（ ）　タ	平成 23 年 3 月 11 日

「量子生命科学セミナー」の開

134　2010 年 9 月 8 日（水）15:00～16:30　理学部 B301 室
講演　目：　Molecular Mechanisms and Spectroscopy in OLEDs
講演者：　Prof. N. Periasamy
(Department of Chemical Sciences, Tata Institute of Fundamental Research, Mumbai, INDIA)

135　2011 年 3 月 7 日（月）15:45～17:45　理学部 B501 室
講演　目：　所射　分子　道法による分　項計算
講演者：　岩田　　先生　（　田理化学研究所　フェロー）

136　2011 年 3 月 18 日（金）10:00～11:30　理学部 E002 室
2006 ACS 会長講演会
講演　目：　Innovation and the University
講演者：　Prof. E. Ann Nalley
2006 President, American Chemical Society
Department of Physical Sciences, Cameron University, Lawton, OK 73505 USA

「量子情報科学連　セミナー」の開

講　：　　二
・統合テーマ：現代の自　科学と情報計算学との関　　（理 B101）
1　2 月 7 日（月）12：50-14：10　現代の自　科学と情報学
2　2 月 7 日（月）14：35-16：05　思　，計算，計算機
・統合テーマ：古典物理学における情報と統計の概念（理 B101）
3　2 月 9 日（水）12：50-14：10　　力学のエントロ　ーとマックスウエルのデ　ン
4　2 月 9 日（水）14：35-16：05　統計力学における　ル　マン分　とエントロ　ー
・統合テーマ：量子情報と量子計算のための量子力学　入門　（理 B101）

5　　2 月 28 日（月）12：50-14：10 量子力学の理論
6　　2 月 28 日（月）14：35-16：05 ス　ンと２状　系
・統合テーマ：　　子系の量子力学と情報学　（理 B101）
7　　3 月 2 日（水）12：50-14：10　　子系の量子力学
8　　3 月 2 日（水）14：35-16：05　シュミット分　と情報学
・統合テーマ：量子情報と量子計算　（理 B101）
9　　3 月 8 日（　）12：50-14：10　量子情報・量子計算の原理
10　　3 月 8 日（　）14：35-16：05　量子情報・量子計算の実現への努力
・統合テーマ：学際的な領域における Carrier Path（理 B101）
11　　3 月 9 日（水）9：00-10：30　自　科学と情報計算学との学際領域
12　　3 月 9 日（水）10：40-12：10　グローバルに展開する研究開発と Carrier Path の　組みづくり

The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium　の開
Date:　Dec 4(Sat) – 5 (Sun), 2010
Venue:　Reception Hall of the Faculty Club, Hiroshima University (Higashi-Hiroshima)
英語での口　発表のみの「　7　ナノ・バイオ・インフ　化学シンポジウム」を開　した。
・口　発表：22（内学生の発表数：16）
・参加者数：113 人（内学生数　86 人）
・学生　授　（参加者（学生を　く）の　　により　定）

The Best Student Presentation Award　3 名
Shohei Kaneko
“Laser Spectroscopic and Theoretical Study of the Structures of the Calix[4]arene Complexes”
Satoshi Kokubo
“Molecular Recognition in the Complexes of Dibenzo-18-Crown-6
Shun Sugawara
“Structures and Properties of 16π Metalloporphyrins”

Student Award　3 名
Mari Izumi
“Detection of H atoms by 2-photon LIF technique and Its Application to Chemical Kinetics”
Ami Kosaka
“Mechanistic Study on the Regio- and Stereoselectivity in [2+2] Phytocycloaddition Reactions of Fran with Cyclic Enones”
Hideo Doi
“Polynomial time algorithm for the graph isomorphism problem”

理学研究科の正　授業科目として「プロテオミクス実　法・同実習」を集中講義として実施した。

プロテオミクス実　法・同実習（NaB*i*T 生命科学系集中講義）
2010 年 9 月 6 日（月）～ 9 月 11 日（土）
ポスト　ノムの　代を　え，プロテオミクス研究においてますます　要な　析手法になりつつあるタン　ク質の質量分析法と　線結晶構造　析について最新機　を用いた実　法の講義と実習を行う。質量分析法，　線構造　析法をそれ　れ 3 日間ずつ計 6 日間である。

・　な内
　線結晶構造　析（担当：　　克夫）（理学部 C104　室，N-BARD RI センターL302　室）
　タン　ク質の結晶化，　線　　実　，電子　度図の表
質量分析法（担当：　俊　）（理学部 A017　室，N-BARD　伝子実　施設 201　室）
　電気　動　ルからの　料調　，質量分析　置の　用法

　　ナノテク・バイオ・IT グランドマスター　定証授
「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラムマスター　定証」を取得　みで，さらに博士の学位を取得した者に「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラムグランドマスター　定証」を授　する。2010 年度は，次の学生に「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラムグランドマスター　定証」を授　した。なお，全体で 4 人目である。
　山田　　範　（2010 年 9 月 27 日　博士課程後期化学専攻修　）

2. 化　学　科

２－１　学科の理念と目標

化学科の理念・目標は，自　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　　した総合的　　力を　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２３年３月１日現在）および平成２２年度の　　講　を次にあげる。

職	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
	俊	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
	関谷　博（　　）	九州大学大学院理学研究科
	田所　誠（　　）	東京理科大学理学部
	楯　　一	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	中島　覚	自　科学研究支援開発センター
	中田　聡	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	灰野　岳晴	化学専攻分子構造化学講座
	藤原　照文	化学専攻分子構造化学講座
	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
	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　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
	西原　禎文	化学専攻分子構造化学講座
	藤原　好	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
	田　　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
	岩倉　いずみ	化学専攻分子反応化学講座
	大前　英	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　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　定者とする。

平成２２年度　　化学科長　　井上　克也
副化学科長　　中田　聡
化学科長補佐　石橋　孝章

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２２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　委員	井口　久保　秋田　藤原（　） 勝本　平賀　大前
教務問　検討委員	井上　安倍　楯　岡田 河内　水田
情報　理委員	相田　岡本　久保　安倍 高橋　田
野外研修　画委員 および 担当研究グループ	田　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　研究グループ	反応物理化学グループ
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）　田 大前
薬品　管理者	池田
シリン　ーキ　ット室管理者	平賀
職担当	山本　H21年10月～H22年9月 安倍　H22年10月～H23年9月

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　を　げている。
1）　理を　究することの好きな人。
2）好　心の　　な人。
3）化学の好きな人。
4）新しいことに　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　　で　　な　界を，分子　びその集合体　　ルで　明するための基盤として，自　科学の中でますますその重要性をしています。化学科ではこのような　代に対応するため，化学の基盤を体系的に身につけさ　た上で，応用を　めた幅広く深い知識と問　　能力を習得さ　ることを教育目標とします。特に，基礎実　技術の習得を　めた体系化した教育を行います。また，環境問　や情報化　代に対応した化学教育の　実を図り，生命科学分野の基礎教育を　実さ　，　　な科学の発展に適応できる広い　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　　化の問　を，　性の発現の好機ととらえ　各学生の指向や　性を　慮した教育指　を行い，学生の　の　える教育というスロー　ンを　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　進し，各学生の生活指　を　めた一　教育を行う。
（2）　　要な化学分野の基礎の体系化を図る。
（3）　学生実　を重　し，幅広い分野で，最新の科学技術の発展に対応できる実　技術を習得さ　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２２年度化学科在籍学生数

平成 22 年 5 月 1 日現在

入 学 年 度	在　　学 生 数
平成 22 年度	63(16)
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	9(1)
平成 17 年度	4(2)
平成 16 年度	3(0)
平成 15 年度	2(0)
合　　計	283(78)

（　）内は女子で内数

・チューター

入 学 年 度	チューター
平成 22 年度	井上，石橋，勝本
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，　　，井口
平成 18 年度	山本，塚原，石橋
平成 17 年度	谷本，
平成 16 年度	相田，水田
平成 15 年度	河内

・ **平成２２年度化学科開講授業科目**

科目区分	開設期	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　ミ	藤原(照),井上,高口,安倍,福原,　,岡田	化学的情報の　集・整理・
基盤	1 前	他学科用	＊化学概説Ａ　理	田	原子・分子，化学結合，量子化学，　力学，反応速度と化学平
基盤	1 後	他学科用	＊化学概説　　理	井上,灰野	原子・分子，化学結合，量子化学，化学　力学，化学平　，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	ン　ュータ，インター　ット，電子メール，WWW ,ワープロ，表計算，プ　　ンテーション
基盤	3 前	必修	化学英語演習[3 理化]	,高口,水田	化学英語，英文　　，英作文，英会
基盤	3 前	必修	化学英語演習[3 理化]	中田,塚原,岡田	化学英語，英作文，英文和
専門	1 前	必修	基礎化学 A	江幡	高　物理，化学基礎
専門	1 前	必修	基礎化学 B	山本	有機化学,命名法，　能基,立体化学，有機反応
専門	1 後	必修	基礎物理化学 A	藤原(好)	化学　力学,状　方程　,自　力学　　-　三法　,化学
専門	1 後	必修	基礎物理化学 B	井口	量子化，動・　子二重性，動関数，シュ　ーディン　ー方程
専門	1 後	必修	基礎無機化学	井上	原子の基本的性質,電気　性度と電気　和力,原子とイオンの　イ　,結合力
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,求置　反応，　反応,アル　ン,アルキン
専門	2 前	必修	物理化学　A	石橋	力学,化学平　,相平　,相
専門	2 前	必修	物理化学　B	岡田	調和振動子，体　転子,オー　タル，動　分　関数,ス　ン，ウリの原理
専門	2 後	必修	物理化学　A	山﨑	分子運動論,反応速度,素反応，ル　マン分　,分配関数
専門	2 後	必修	物理化学　B	高口	電子構造,分子　道法,量子化学
専門	2 前	必修	無機化学	西原	期表・分子　道法・量子化学・バンド理論・　性
専門	2 前	必修	無機化学	塚原	化学量論,化学平　,活量，　基，化　元,錯　成，　生成
専門	2 後	必修	無機化学	水田	金属錯体，ルイス　・　基，結晶　分　と結晶　安定化
専門	2 前	必修	有機化学	河内	アル　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	ル　　ル化合物・電子の流れ図・求　攻　・求電子反応・共役付加・　ル　　ル　合反応

専門	2 後	選択	生体物質化学		質・立体化学・ 質・生理活性物質・生体 ・アミノ ・等電点・ 質・構造 層性・ 質の ・ 質の一次配 定法
専門	2 後	選択	生物構造化学		質, ,分光法, 法, 線構造析,立体構造
専門	2 後	必修	無機化学 III	水田	金属錯体, ルイス ・ 基, 結晶分 と結晶 安定化
専門	2 後	必修	無機化学演習	藤原(照),塚原 ,水田,秋田,岡本 ,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 III	安倍	・ 求電子置 反応・ 求置 反応・ 化合物・素環 化合物・ リ環状反応
専門	2 後	選択	有機分析化学	河内	構造 析,機 分析, 気共 法（NMR）, 外分光法（IR）
専門	3 前	選択	システムバイオロジー	,山本( )	DNA, 基（プリン, リミジン）, 伝,セントラルドグマ, 伝子組え,iPS , 素反応,反応速度論, 害 ,フィードバック制 ,シグナル伝達系
専門	3 前	選択	化学インターンシップ	井上	研修,職業 理
専門	3 前	必修	化学実	河内	基礎化学実 ・無機・分析化学・物理化学・有機・生物化学
専門	3 前	選択	機 分析化学	藤原(照)	分配平 , 出,イオン交 ,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	光機能化学	齋藤	物理化学,光,物性,機能
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 ずみ化合物・ 性・ 分子化学
専門	3 前	選択	反応動力学	山﨑	気体分子運動論,反応 面積,反応速度,反応速度定数, 状 理論
専門	3 前	選択	反応有機化学	安倍	転位反応, 道相互作用, Woodward-Hoffmann
専門	3 前	必修	物理化学演習	藤原(好),石橋,高口,勝本,藤原( )	力学,化学平 ,相平 ,量子力学,転・振動分光法,統計 力学
専門	3 前	選択	分子構造化学	江幡	転・振動・電子状 ,分光学,ス クトル
専門	3 前	選択	無機固体化学	井上	固体物性, 電・伝 ・ 性体,相転
専門	3 前	選択	量子化学	相田	電子状 理論,分子 道法,計算化学
専門	3 後	選択	バイオインフ マティクス	大前, 田	分子生物学,構造生物学,生命情報学
専門	3 後	選択	計算化学・同実習	相田	量子化学,計算化学,情報化学,計算機
専門	3 後	選択	集積化学	岡田	分子間相互作用,水素結合,分子集合体,クラスター

専門	3後	選択	生体高分子化学	楯	質立体構造, 質機能制 機構, 質の分子 識機構, 質を対 とした計測技術
専門	3後	選択	生物化学		代 ,同化・異化, 系,TCA イクル, 質生合成,２次代 ,メバロン と メバロン
専門	3後	選択	先端化学	井上	先端化学,卒業研究 イ ンス
専門	3後	選択	分子光化学	中田	光化学, ,光の ,分子振動
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 ,放射線計測,原子 反応
専門	3後	必修	有機化学演習	河内,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後	選択	有機金属化学	水田	典型元素および 金属の有機金属化学,１８電子 , 化付加, 元的 , 入反応,金属錯体

集中講義

化学特別講義（分子構造特論）　関谷　博（九州大学大学院理学研究員化学部門/教授）
担当：構造物理化学グループ

化学特別講義（錯体物性化学）　田所　誠（東京理科大学理学部/教授）
担当：固体化学グループ

・ **担当授業科目一覧**

平成 22 年度担当授業科目					
職	名	講義	演習	化学実	卒業研究
教授	相田 美砂子	量子化学，計算化学・同演習・同実習	化学演習		◎
	安倍　学	有機化学 III，反応有機化学,			◎
	俊	生体物質化学，生物化学,	化学英語演習		◎
	井上 克也	基礎無機化学，無機固体化学，教養　ミ，先端科学，化学インターンシップ			◎
	江幡 孝之	基礎化学 A，分子構造化学			◎
	楯　一	生体高分子化学	総合演習（化学科）		◎
	中島　覚	放射化学			◎
	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			◎
	藤原 照文	教養　ミ，機　分析化学	無機化学演習		◎
	山﨑 勝義	物理化学 IIA，反応動力学,			◎
	山本	システムバイオロジー			◎
	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,	物理化学演習		◎
	井口 佳哉	基礎物理化学 B，化学実　A		◎	◎
	岡田 和正	集積化学，物理化学 IB,	化学演習， 化学英語演習		◎
	克夫	生物構造化学			◎
	河内　敦	有機化学 I，有機分析化学	総合演習（化学科） 有機化学演習		◎
	高口 博志	教養　ミ，物理化学 IIB	化学英語演習， 物理化学演習		◎
	小島 聡志	基礎有機化学			◎
	齋藤 健一	光機能化学			◎
	塚原　聡	無機化学 II	無機化学演習， 化学英語演習		◎
	西原 禎文	無機化学			◎
	藤原 好	基礎物理化学 A	物理化学演習		◎
	水田　勉	無機化学 III，有機金属化学	無機化学演習， 化学英語演習		◎
助教	秋田 素子		無機化学演習		
	田　之	バイオインフ　マティクス			
	池田 俊明		有機化学演習		
	岩倉 いずみ		有機化学演習		
	大前 英	バイオインフ　マティクス			
	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		
	仲　一成[1]				
	平賀 良知		有機化学演習		
	福原 幸一	教養　ミ	総合演習（化学科）		
	藤原　夫		物理化学演習		

[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　果的に　修できるように，専門教育科目受講基　を定めている。科目の　修に当たっては，受講基　とともに次の事項に　分留意すること。

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

２　受講基　１により化学実　を　修することができない　合には，卒業が　れることになる。この　合でも，化学実　以外の授業科目は　修することができるが，　修得の必修科目の　修を　先さ　なけれ　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　２により卒業研究が　修できない　合がある。

４　教養教育科目「領域科目」で卒業の要　として修得すべき　位（以下，卒業要　　位）にできるのは，自　科学領域以外の科目に　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　」を　修することが　ましい。「概説」科目の修得　位は，専門科目（選択）の　位に振り　えることができないが,「科目区分を問わない」科目の　位にすることができる。
　ただし，化学概説Ａ「化学概説　」は卒業要　　位に算入することができない。

６　授業担当教員の　　が得られれ　，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　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」　は「理学部他プログラムの特別講義」から，最大２　位まで専門科目(選択)として　めることができる。

８　理学部他プログラムの専門基礎　び専門科目は，８　位まで専門科目(選択)の要修得　位にできる。
なお,「理学部他プログラムの特別講義」の　位を卒業要　　位とする　合，理学部他プログラムの　位で専門科目（選択）の卒業要　　位とできる　位数は，８　位から「理学部他プログラムの特別講義」の　位数を　いた数が上　となる。

９　「科目区分を問わない」科目として６　位必要である。この６　位は，以下の科目の　位から振り　えることができる。　　についてはチューターと相　のこと。
・自　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，　　を　く）
・理学部他プログラムの「専門基礎科目」　び「専門科目（「特別講義」を　く)」
・Open-end な学びによる Hi-　イエンティスト養成プログラムで開講される「科学リテラシー」，「科学英語セミナー」　び「自　課　研究」

１０　「教職に関する科目」は，卒業要　　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

１　化学実　(５，６セメスター)を　修するためには，各科目　において次に　す　位数以上（合計６２　位）を修得していなけれ　ならない。(　　内の数　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　位数を表す。)

教養　ミ	２　位(２)	スポー　実習科目	２　位（２）
外国語科目	９　位(10)	基盤科目	１２　位*1(16)
情報科目	２　位(２)	専門基礎科目	２７　位(33)
ッ　ージ別科目	４　位(６)	科目区分を問わない科目	２　位(6)
領域科目	２　位(２)		

*1　物理学実　，化学実　法・同実　，　び生物学実　または地学実　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　修するためには，各科目　において次に　す　位数以上（合計１０８　位）を修得していなけれ　ならない。(　　内の数　は，卒業研究を　いた卒業に必要な　位数を表す。)

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

上記受講基　１　び２について，広島大学理学部における　期卒業　定に関する　合
３　２項により適格の　定を受けた学生（　期卒業　　者）　び　入・転入生はこの　り
ではない。　　についてはチューターと相　のこと。

付記　この　修要領は，平成２２年度入学生から適用する。

平成２２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。

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。
なお，Open-endな学びによるHi-サイエンティスト養成プログラムで開講される「科学リテラシー」(2単位)，「科学英語セミナー」(1単位)及び「自由課題研究」(2単位)も，卒業要件単位(科目区分は「専門科目」)に算入される。

※　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「物理学概説A」または「物理学概説B」を含む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り，単位を修得した場合，科目区分「コミュニケーションⅠ・Ⅱ・Ⅲ」に相当する科目として要修得単位数に算入することができる。
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				
				物理化学演習	1						①			
				有機化学演習	1							①		
	専門科目	43 (注3)	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	選択必修				○				
				生体物質化学	2					○				
				有機分析化学	2					○				
				有機典型元素化学	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						○			
				反応有機化学	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							○		
				生物化学	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4）							○	○	○	○
				上記24科目のうちから8科目15単位以上										
			18	化学実験	10	必修								
				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（注5）		選択	○	○	○	○	○	○	○	
				Open-endな学びによるHi-サイエンティスト養成プログラムで開講される「科学リテラシー」，「科学英語セミナー」及び「自由課題研究」					○	○	○			
	専門教育科目　小計	78												
科目区分を　　ない		6		（注6）		制限付選択	○	○	○	○	○	○	○	○
合計		128												

（注3）　専門科目の要修得単位数43を　たすためには，必修科目計18単位及び選択必修科目計2単位に加えて，選択必修科目及び選択科目のうちから23単位以上を修得する必要がある。このうち15単位以上は，履修表に掲げる化学プログラム専門科目の選択必修科目から修得することが必要である。

（注4）「化学特別講義」は，一定期　（5セメスター以　）に集中形　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5）　の他化学プログラム担当教員会が認めた授業科目も含まれる。詳細についてはチューターと相　のこと。

（注6）　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　8単位　合計122単位)に加えて，科目区分を　　，さらに6単位以上修得することが必要である。
　た　し，6単位を　　して修得したパッケージ別科目は含まれ　，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　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　の「概説」科目（「化学概説A，B」を　）
・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　）」
・Open-endな学びによるHi-サイエンティスト養成プログラムで開講される「科学リテラシー」，「科学英語セミナー」及び「自由課題研究」

・平成２２年度化学科卒業者進路状況

（平成 23 年 5 月 1 日現在）

（　）内は女子で内数

卒業者総数	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			
74 (11)	1(0)	1(1)	1(0)	1(1)	0	1(1)	1(1)	0	6(4)	3(1)	3(1)	59 (5)	3 (1)	3 (0)

２－３－４　卒業論文発表実績

【１】平成２２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	6	江幡，井口，福原
固体物性化学研究グループ	6	井上，秋田
錯体化学研究グループ	5	水田，久保
分析化学研究グループ	6	藤原（照），塚原，岡本
構造有機化学研究グループ	6	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	7	山崎，高口，高橋
有機典型元素化学研究グループ	7	山本，河内
反応有機化学研究グループ	4	安倍，小島，平賀，高木
集積化学研究グループ	6	田　，岡田，勝本
量子化学研究グループ	3	相田，石橋
数理分子生命理学専攻		
物理環境化学研究グループ	5	中田，藤原（好），藤原（　）
生物化学研究グループ	3	，　田
分子生物物理学研究グループ	4	楯，　　，大前
自　科学研究支援センター		
光機能化学研究グループ	3	齋藤
放射線反応化学研究グループ	4	中島
計	75	

【２】平成２２年度の卒業生と研究題目

金子　　志	集積型錯体　晶　$e_{x\ 1-x}$(N　)$_2$(pa)$_2$(　o　n　　e　pa 1 2-ス (4-　リジル) エタン) の組成とス　ン状	放射線反応化学
平　　岳大	二つの　ス　リックス [5] ア　ーンをもつ　　ジト　ック　ス　ト分子と　　を修　した　ン　ル型 [60] フラー　ンの合成	構造有機化学
河合	広島大学東広島キ　ン　ス水中の金属元素とバイオマットの関	放射線反応化学
子	ン　ジチオフェン　格を有するかさ高い新　配位子の合成	有機典型元素化学
前田　一	ウ　の　割を制　する　ルフ　　ンの	生物化学
島	イ　　チル基と　　リジンをもつ　リックス [4]　　ルシンア　ーンキ　　タンドの自己集合　プセル分子の合成研究	構造有機化学
藤	光応　性アンテナ部位を有する新　プロリン　　体の合成とその　　能	反応有機化学
井上　達也	７員環を２つ　環した新　　ン　ン　　体　格を有する配位子の合成とその応用	有機典型元素化学
今田	原子価５配位アンチ　ン化合物の Turnstile　otation による異性化機構の研究	有機典型元素化学
上田　　子	トリスフェ　ルイ　オキ　　リル　ン　ン　　体を　　にもつポリフェ　ルアセチ　ンの合成研究	構造有機化学
女　　子	法を用いたリ　チームの　　による　　界面　力　化の測定	分析科学
井	テトラキスポルフィリンと　ストリ　トロフルオ　ノン　　体の会合による　分子ポリマーの合成研究	構造有機化学
大久保　泰	分子動力学法による N_2　$_2$系の振動　和速度の理論計算	反応物理化学
岡本　一茂	シクロ　ンタン-1 3-　ラジ　ルのス　ン制　に基づくテトララジ　ルのス　ン整	反応有機化学
野	フルオ　セインをプロー　として用いた　ミセルの　ラス表面への　　挙動の　　光測定	分析科学
小	ト　　ーキン　ン　関連タン　ク質シンフィリン-1 の結晶学的研究	分子生物物理学
小　　平	光伝　法による　　体の　動度測定　置の開発	光機能化学
谷　　美子	*cis*-　キ　フルオロシクロ　タンの　素内　　と光　　イナミクスの研究	集積化学
木	電子　　法によるア　リンの内　　・	集積化学
山　進	リックス [4] ア　ーンオリ　マーの自己集合により生成する三重ら　　型金属錯体の合成研究	構造有機化学
明生	強　　環境が　　管の生長に　える	物理環境化学
北　　大	トロ　ル　トロキシドラジ　ル　を　む　　金属錯体の合成構造　び　気的性質	固体物性化学
木	大環状リン配位子に内　された２つの g( )の共同　果による基質の取り　み反応	錯体化学
木元	アミノ　の　　線分光に関する理論的研究	反応物理化学
和久	分子化学的手法を用いた分子性ス　ンラ　ー構造へのキ　リアドー　ングと物性評価	固体物性化学
谷	オキ　アルキル化合物の　物性の置　基　存性	構造物理化学
高下　　典	トロ化合物の光　　イナミクス　明のためのイオン画　　測システムの開発	反応物理化学
古賀　和	東広島　の環境放射能と共存元素の関	放射線反応化学
古　　大	金属と　　アミンによるマルチフェロイック物質の合成と物性測定	固体物性化学

小	NH_3の 193 nm 光　　により生成する振動　　NH_2の検出および和　程の速度論的研究	反応物理化学
今野　大	リチウムイオンチ　　ルを有する［Ni(dmit)$_2$］　の構造と物性	固体物性化学
佐藤	u(　　)$_3^2$を　　としたB 反応系の光興　現	物理環境化学
田	ステロイド　は　ーリン　質　合　分子　における表面　の特的　化	物理環境化学
島田　大	ーザー分光による ethyl 4-Hydroxycinnamateの光　　異性化の研究	構造物理化学
水	立体制　された oly(*N*-isopropylacrylamide)を　格とする　イドロ　ル合成の　み	集積化学
原	の修　　基についての　　的分子　道法による研究	量子化学
原	N　を用いた　化　　受　体　　質　　-1の基質　識機構の　明	分子生物物理学
田	yd erg状　を　　した光イオン化法による振動・　転状　選別 H_2 の生成	反応物理化学
田中　　也	*σ*-(フルオロシリル)フェ　ルリチウムと 14　2価化学種との反応	有機典型元素化学
井	メタル　加　気化　入ー　　発光分析による高分子中に　存する　　と　の定量	分析科学
野　英二	$^-$(H_3)(H_2)の　外光　　ス　クトルに　　す r の　　果	構造物理化学
也	アンチア　　フィリック　ス　ランの　　体の研究	有機典型元素化学
也	erosol　T　ミセルによる　ュートラル　ッドの　出平　の測定と　析	分析科学
中野	水素結合を　用した有機ラジ　ル分子の配　制　と物性	固体物性化学
中山	対　二置　オキ　アル　ンの　物性に　　す置　基　果	構造物理化学
西　　一志	ルス　ーザーア　　ーション法による発光性　i 量子ドットの生成	光機能化学
西野	安定イオンの検出と　命測定に向けた質量分析システムの開発	集積化学
能美	水　法による　バルトーアミノ　錯体の合成 構造と物性	固体物性化学
野　　拓人	シクロ　キ　ンジアミン　　体を　　として用いた　　反応の検討	有機典型元素化学
一	リン上に　素ドナー置　基を有する新　な　ン　ー型　ル　ジス　ラン配位子の合成	錯体化学
橋本　　介	界面での　元反応による金　ロイドの生成挙動の *in situ* 測定	分析科学
美　子	二つのナフタ　ンで強固に固定された　ー　結合をもつジ　スフィン配位子	錯体化学
本　　大	部位特異的　異　入によるプ　　ン　水素　素の反応性の改	生物化学
原田　理	ウ素原子置　　ン　ンのオルトマグ　シオ化反応の開発	有機典型元素化学
原田　光	ン　ン環と　チオンの協同　果についての理論化学的研究	量子化学
日　山　聡	タン　ク質の構造安定性に対する水和とキ　　ティーの　　の検討	分子生物物理学
平井　　子	トリスフェ　ルイ　オキ　　リル　ン　ン　　体と　ス　リジルエチル　ン　ルの二成分　合による分子集積化	構造有機化学
田　　也	ミセル反応　におけるルミノール/ h化学発光へのイオン　体の	分析科学
田	ン　キノン系の自　運動　ードスイッチング	物理環境化学

和	質量分析を用いたリ　ー　の　性状　からのリフ　ールディング　程の　測	生物化学
三島	一重項 1 2-ジアザ-4 4-ジアル　キシ-3 5-　ラジ　ルの発生とその反応挙動	反応有機化学
宮崎　聡	ミリングによる　i ナノ　子の　　と　陽電池への応用	光機能化学
三好　和哉	晶　　位相　　を用いたポルフィリン　　のキラル振動和発生分光	量子化学
	異　な電子配置を　つ2-シリル-1 3-　ラジ　ルの発生とその化学的性質	反応有機化学
島	速ジェット中での　ーザー分光による　－estradiol とその水和クラスターの構造　定	構造物理化学
誠	気　上状　におけるシクロ　キ　ンの　発　程の　化	物理環境化学
保田	二つの金属を内　する大環状テトライミン配位子の合成	錯体化学
安原　大	新　二　ルテ　ウム-フルバ　ン錯体の合成	放射線反応化学
山下	振動　　H の He による振動　和速度の　定	反応物理化学
隆	ー　ス　スフィンイミド錯体とジクロロ　スフィンとの反応によるメタラシクロ　スフ　ザンの合成と反応性	錯体化学
吉岡	新　N　法による　タン　ク質の構造　析	分子生物物理学
吉水	ン　ンの H　　振動の振動　和におよ　す置　基　果の研究	構造物理化学
若　　光子	にキラリティーを　つアクリルアミド系高分子の　　応　性	集積化学

２－４　その他特記事項

２－４－２　学生の表彰

理学部長　表彰者２名

日本化学会中国　国支部長　受　者１名

報告書作成ワーキンググループ

安倍　学	（平成２２年度化学科自己点検・評価委員）
岡本　泰明	（化学専攻分子構造化学講座）
高橋　修	（化学専攻分子反応化学講座）
岩倉　いずみ	（化学専攻分子反応化学講座）