

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23年度
(2011年度)

平成24年10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	25
錯体化学研究グループ	29
分析化学研究グループ	32
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	47
反応有機化学研究グループ	52
量子化学研究グループ	56
1-4-3 各種研究員と外国人留学生の受け入れ状況	61
1-4-4 研究助成金の受け入れ状況	61

1-4-5	学会ならびに社会での活動	62
1-5	その他特記事項	69
1-5-1	量子生命科学プロジェクト研究センター	69
2.	化 学 科	72
2-1	学科の理念と目標	72
2-2	学科の組織	72
2-3	学科の学士課程教育	74
2-3-1	アドミッション・ポリシーとその目標	74
2-3-2	学士課程教育の理念と達成のための具体策	74
2-3-3	学士課程教育の成果とその検証	75
2-3-4	卒業論文発表実績	83
2-4	その他特記事項	86
2-4-1	Chem サロン	86
2-4-2	学生の表彰	86
	報告書作成ワーキンググループ	87

はじめに

平成 23 年度化学専攻長
山崎 勝義

時代の変化はめまぐるしく、変化の速度は加速する一方である。爆発的なネットワークの拡がりにともなって華々しく成長した IT 産業に代わり、次の時代の発展を担うのは化学産業であるといわれている。産業は文字通り産み出す業でありその発展は文明の進歩を象徴する楼閣であるが、砂上の楼閣ではそびえ続けることができない。楼閣を構築するためには強固な基礎と支柱が必須であるように、化学がかかわる産業の発展には基礎化学が広く深くブレることなく発展する必要がある。化学専攻は分子構造化学大講座と分子反応化学大講座からなり、基礎化学の全分野を網羅する研究グループが相互に連携を保ちつつ研究を推進している。物理学・物性学と密接に関連する基礎的分野から、生物学や地学などの応用的分野まで、多岐にわたる化学研究を推進すると同時に、高度な知識と技能を有する研究者・技術者を養成し、社会の要請に応えることに努めている。教育・人材育成の面では、大学院教育において平成 15 年度から実施してきた、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」が順調に成果を挙げ、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同時に、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」に採択された取組「協調演習による理学的知力の育成支援」が理学融合教育研究センターによって引き継がれている。

化学専攻・化学科では、教育研究活動の状況・成果を整理・公表し評価を受け、その結果に基づいて一層の改善・推進を行うというサイクルによる活性化と改革を図る目的で平成 7 年度から教育研究活動報告書を作成してきた。本報告書は平成 23 年度の活動成果をまとめたものである。本報告書が化学専攻・化学科の 1 年度間の活動を 100% 完全に網羅しているわけではないが、教育研究活動を日夜推進している組織として社会的な説明責任を果たす一助となれば幸いである。

化学専攻・化学科関連 URL

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://qulis.hiroshima-u.ac.jp/qulis/NaBiT/index.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を推進することによって現代科学のフロンティアを切り拓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、量子化学および放射線反応化学の5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14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23年度	化学専攻長	山崎 勝義
	化学副専攻長	灰野 岳晴
	化学専攻長補佐	西原 禎文

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23年度の各種委員会の委員一覧を次にあげる。

・化学専攻内の各種委員会

エックス線	◎ 水田	河内	岡田
障害防止委員	平賀	西原	池田

・ 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	安倍 山崎
人事交流委員会	山崎
教務委員	楯 岡田
評価委員	安倍 山崎
安全衛生委員	◎●灰野
広報委員	池田
大学院委員	安倍 山崎
入学者選抜方法検討委員会	水田
情報セキュリティ委員会	高橋
エックス線障害防止委員	水田
地区防災対策委員	山崎
教育交流委員	小島

◎は委員長 ●全学委員

化学専攻教員の理学研究科および全学での活動

副研究科長	安 倍 学	平成23年 4 月 1 日～
評価組織連絡協議会	江 幡 孝 之	平成19年 4 月 1 日～
大学院課程会議	安 倍 学	平成23年 4 月 1 日～
広報委員会	安 倍 学	平成23年 4 月 1 日～
入学者成績追跡調査委員会	水 田 勉	平成23年 4 月 1 日～
学生生活会議	灰 野 岳 晴	平成23年 4 月 1 日～
学術戦略会議	江 幡 孝 之	平成20年 4 月 1 日～
研究設備サポート推進会議専門部会	山 本 陽 介	平成22年 4 月 1 日～
学術室センター等推進部門会議	江 幡 孝 之	平成20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～
	河 内 敦	平成21年 4 月 1 日～
北京研究センター運営委員会	山 崎 勝 義	平成20年 4 月 1 日～
図書館資料選定会議 専門部会	灰 野 岳 晴	平成21年 7 月 1 日～
図書館リポジトリ・アドバイザー	山 崎 勝 義	平成19年 4 月 1 日～
情報セキュリティ委員会	安 倍 学	平成23年 4 月 1 日～

情報メディア教育研究センター高度科学計算機 運用専門委員会	高 橋 修	平成19年4月1日～
安全衛生委員会	灰 野 岳 晴	平成23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	灰 野 岳 晴	平成23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～
ハラスメント対策委員会	江 幡 孝 之	平成23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～
テニユアトラック審査委員会委員	江 幡 孝 之	平成22年6月15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～
自然科学研究支援開発センター 低温・機器分析研究開発部主任	井 上 克 也	平成22年4月1日～
先端機能物質研究センター副センター長	井 上 克 也	平成23年4月1日～

1-2-1 教職員

平成24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	齋藤	健一（併任）
教授	灰野	岳晴
教授	藤原	照文
教授	水田	勉
准教授	石坂	昌司
准教授	井口	佳哉
准教授	岡田	和正
准教授	西原	禎文
助教	池田	俊明
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	河内	敦
准教授	高口	博志
准教授	小島	聡志
准教授	平賀	良知
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

化学専攻事務

契約一般職員	加藤	道子
契約一般職員	竹村	夕子
契約一般職員	松浦	真子

平成23年度の非常勤講師

田原	太平	（理化学研究所田原分子分光研究室／主任研究員）
	授業科目名：	凝縮系分光の基礎と分子のダイナミクス
	担当：	構造物理化学グループ
茶谷	直人	（大阪大学大学院工学研究科／教授）
	授業科目名：	均一触媒反応特論
	担当：	反応有機化学グループ
山田	淳	（九州大学大学院工学研究院／教授）
	授業科目名：	プラズモニクナノ構造の設計・制御と応用
	担当：	分析化学グループ

1-2-2 教職員の異動

平成23年 4月 1日	齋藤 健一（併任）	（光機能化学講座教授）	昇任
4月 1日	平賀 良知	（反応有機化学講座准教授）	昇任
9月 1日	水田 勉	（錯体化学講座教授）	昇任
10月 1日	石坂 昌司	（分析化学講座准教授） 北海道大学大学院理学研究院化学専攻助教より採用	
平成24年 3月31日	平賀 良知	（反応有機化学講座准教授） 広島工業大学生命学部（教授）へ転出	
3月31日	岩倉 いずみ	（反応有機化学講座助教） 神奈川大学工学部物質生命化学科（特別助手）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SSION・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SSION・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23年度化学専攻在籍学生数

(平成23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23年度	47 (5)	9 (3) {1}
平成22年度	40 (6) {4}	3
平成21年度	2 (1) {2}	3
平成20年度	2	4 {1}
平成19年度	1	
平成18年度		1
平成17年度以前		1
合 計	92 (12) {6}	21 (3) {2}

() 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23年度生	山崎・井口	安倍
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23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，山崎
	無機化学概論	2	2							水田，西原
	有機化学概論	2	2							安倍
	化学特別研究	2	6	2	6	2	6	2	6	各教員
選 択	現代英語			2	2					小島
	構造物理化学Ⅰ	2	2							井口
	構造物理化学Ⅱ			2	2					開講しない
	固体物性化学Ⅰ	2	2							開講しない
	固体物性化学Ⅱ			2	2					開講しない
	錯体化学Ⅰ	2	2							水田
	錯体化学Ⅱ			2	2					水田
	分析化学Ⅰ	2	2							藤原(照)
	分析化学Ⅱ			2	2					藤原(照)
	構造有機化学Ⅰ	2	2							開講しない
	構造有機化学Ⅱ			2	2					開講しない
	光機能化学			2	2					開講しない
	放射線反応化学	2	2							中島(自然科学研究支援開発センター)
	量子化学			2	2					相田，石橋
	集積化学	2	2							開講しない
	反応物理化学Ⅰ	2	2							高口
	反応物理化学Ⅱ			2	2					山崎，高口
	反応有機化学Ⅰ	2	2							安倍
	反応有機化学Ⅱ			2	2					安倍
	有機典型元素化学Ⅰ	2	2							開講しない
	有機典型元素化学Ⅱ			2	2					開講しない
	有機合成化学	2	2							小島
	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
択	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，西原
	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)，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	山崎，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(自然科学研究支援開発センター)
	放射線反応化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	中島(自然科学研究支援開発センター)
	有機化学系合同セミナー	1	2			1	2			灰野
特 別 講 義	均一触媒反応特論（1単位，後期集中）									茶谷 直人(大阪大学)
	プラズモニクナノ構造の設計・制御と応用 （1単位，前期集中）									山田 淳(九州大学)
	凝縮系分光の基礎と分子のダイナミクス （1単位，後期集中）									田原 太平(理化学研究所)

・平成23年度化学専攻開講授業科目

	担当教員	授業のキーワード
現代英語	小島	英語，ヒアリング，リスニング，熟語
構造物理化学Ⅰ	井口	群論，光吸収・発光，散乱，Maxwell方程式， 時間を含む摂動論
錯体化学Ⅰ	水田	有機金属化学，有機合成への応用，常磁性錯体， 高酸化数錯体，高配位錯体，生物有機金属化学
錯体化学Ⅱ	水田	有機金属化学，有機合成への応用，触媒反応
分析化学Ⅰ	藤原(照)	水溶液，ミセル溶液，非水溶媒，溶媒和， ソルバトクロミズム
分析化学Ⅱ	藤原(照)	溶液内反応，溶媒和，溶媒効果，表面・界面
放射線反応化学	中島	放射線，放射線利用
量子化学	相田, 石橋	量子力学，量子化学，分子軌道法，分光法
反応物理化学Ⅰ	高口	ラジカル分子，電子スピン，核スピン，微細構造， 散乱理論，非束縛状態
反応物理化学Ⅱ	山崎, 高口	反応速度論，化学反応動力学
反応有機化学Ⅰ	安倍	立体選択性，不斉合成反応
反応有機化学Ⅱ	安倍	電子的励起状態
有機合成化学	小島	立体選択性，不斉合成反応

・各研究グループの在籍学生数

(平成23年7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	6	5	1	0	1	1	0
固体物性化学研究グループ	7	2	1	0	0	0	0
錯体化学研究グループ	5	3	0	0	0	0	0
分析化学研究グループ	4	5	1	0	0	0	0
構造有機化学研究グループ	5	3	0	0	0	0	0
光機能化学研究グループ	6	2	1	0	1	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	4	2	1	0	0	0	0
有機典型元素化学研究グループ	5	5	1	0	1	0	0
反応有機化学研究グループ	5	4	2	0	0	0	0
量子化学研究グループ	0	7	0	3	1	2	2
放射線反応化学研究グループ	3	0	1	0	0	0	0
計	50	38	9	3	4	3	2

・博士課程修了者の進路

(平成23年5月現在)

	修了者総数	就 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				
前期修了	33(4)	23(2)	1(0)	1(1)	25(3)	3(1)	0	3(1)	4(0)	0	—	1(1)
後期修了*	3(0)	0	0	0	0	0	0	0	—	3	0	0

() 内は女子で内数

*単位取得退学者を含む。

1-3-3 大学院生の国内学会発表実績

	国内学会 件数
博士課程前期 ⁽¹⁾	101
博士課程後期 ⁽²⁾	13
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	0

(2011(H23)年度の発表について記載：2011(H23)年4月から2012(H24)年3月まで)

⁽¹⁾博士課程前期の学生が共同研究者の発表件数

⁽²⁾博士課程後期の学生が共同研究者の発表件数

⁽³⁾博士課程前期・後期の学生が共に共同研究者の発表件数

1-3-4 大学院生の国際学会発表実績

	国際学会 件数
博士課程前期 ⁽¹⁾	30
博士課程後期 ⁽²⁾	5
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	1

(2011(H23)年度の発表について記載：2011(H23)年4月から2012(H24)年3月まで)

⁽¹⁾博士課程前期の学生が共同研究者の発表件数

⁽²⁾博士課程後期の学生が共同研究者の発表件数

⁽³⁾博士課程前期・後期の学生が共に共同研究者の発表件数

1-3-5 修士論文発表実績

石 本 哲 也	W (V) と Cu (II) を用いたシアノ架橋型分子磁性体の合成と物性	固 体 物 性 化 学
小 澤 賢 伯	大環状4座ホスフィン2核ヒドリド錯体の合成と二酸化炭素との反応	錯 体 化 学
尾 下 隆 英	一重項シクロペンタン-1,3-ビラジカルのラジカル性に関する実験的研究	反 応 有 機 化 学
柏 原 孝 基	フラーレンを有するポリフェニルアセチレンのらせん制御を目指したキラルテトラキスカリックス[5]アレーンホストの合成	構 造 有 機 化 学
片 山 和 也	水性二相系における単一DNA分子の形態および相間移動のin situ 顕微蛍光測定と解析	分 析 化 学
片 桐 勇 志	レーザー脱離法を用いた不揮発性分子のレーザー分光及び装置開発	構 造 物 理 化 学
金 子 翔 平	レーザー分光を用いたカリックス[4]アレンの包接錯体に関する研究	構 造 物 理 化 学
小 西 宏 明	シリカ基板上マレイミド膜へのチオール化合物の固体と水溶液中における振動SFG分光	量 子 化 学
坂 本 勇 哉	拡張型クマリン骨格を有する新規光解離性保護基の合成とその光反応性	反 応 有 機 化 学
篠 森 直 樹	液液界面における蛍光色素の全内部反射-光退色後蛍光回復測定と拡散係数の評価	分 析 化 学
末 盛 秀 美	金属・非金属ナノ構造体の創製と増強効果の検討	光 機 能 化 学
菅 原 峻	反芳香族16 π ポルフィリンの創製と新規カルベン配位子を用いた遷移金属触媒の開発	有機典型元素化学
石 遠	七員環を二つ有する三座配位子を用いた遷移金属錯体の合成と触媒反応への応用	有機典型元素化学
谷 哲 龍	氷及びアンモニアの軟X線による光刺激脱離ダイナミクスに関する理論的研究	反 応 物 理 化 学
張 笑	加熱気化導入-ICP発光分析法における2波長同時測定の活用 -純金試料中の微量銀の直接定量-	分 析 化 学
土 井 豆 亜 希	立体制御したアクリルアミド系高分子薄膜の水分子およびタンパク質収着の解析	量 子 化 学
常 峰 裕 介	逆ミセル反応場におけるローダミンB化学発光とその分析化学的応用	分 析 化 学
寺 本 裕 一	1,8-ナフチレンジホスフィド架橋鉄2核錯体の合成とプロトン還元活性	錯 体 化 学
土 井 啓 右	I ⁻ +CH ₃ I SN2反応系における微視的溶媒効果の研究	構 造 物 理 化 学
中 居 大 貴	界面近傍に発生させた水溶液中の層流の助走区間内における流速分布の顕微測定と解析	分 析 化 学
中 垣 知 幸	一重項1,3-ビラジカルの寿命に及ぼす置換基効果	反 応 有 機 化 学

中 島 徹	内殻励起 cis-ヘキサフルオロシクロブタンの光解離ダイナミクス	構 造 物 理 化 学
西 岡 徳 真	オルト位に官能性シリル基を有するトリアリールゲルマニウムおよびケイ素化合物の合成研究	有機典型元素化学
西 田 祐	有機半導体薄膜の振動電子二重共鳴SFG分光	量 子 化 学
西 脇 和 穂	軸不斉を導入した環状カルボジホスホランを配位子にもつ貴金属錯体の合成	錯 体 化 学
乗 松 祐 輝	ホスホニウムイリドを分子内配位子とした新規5配位ケイ素化合物の合成研究	有機典型元素化学
秦 野 雅 夫	水熱合成法によるリン酸-鉄化合物の合成と物性	固 体 物 性 化 学
服 部 菜 々	DNAの塩基対間相互作用における多体効果についての理論化学的研究	量 子 化 学
花 田 拓 也	ハロゲン化アリの紫外光解離におけるスピン-軌道状態分岐に関する研究	反 応 物 理 化 学
久 本 謙	ゲラニオール類のPaternò-Büchi反応における位置選択性に関する研究	反 応 有 機 化 学
古 田 奈 穂 子	タンパク質高次構造の形成と変化についての理論化学的研究	量 子 化 学
増 田 哲 也	ペリレンビスイミドを導入したトリス（フェニルイソオキサゾリル）ベンゼンの自己集積挙動と光機能	構 造 有 機 化 学
村 上 晃 一	オキサアルキル鎖を持つアルカンジエステルの構造と熱物性の相関	構 造 物 理 化 学
山 本 光 恵	蛍光ラベル法による立体制御された高分子鎖近傍の局所溶媒環境測定	量 子 化 学
若 宮 与 二	メカノケミカル法による機能性ナノ粒子の創製と光物性研究	光 機 能 化 学

1-3-6 博士学位

授与年月日を〔 〕内に記す。

大久 真幸 〔平成23年9月5日〕(甲)

Theoretical Study on the Solvation Effect of Organic Reactions in Aqueous Solution

(水溶液中における有機化学反応の溶媒効果についての理論化学的研究)

主査：相田 美砂子 教授

副査：江幡 孝之 教授, 山崎 勝義 教授

堺 真通 〔平成23年9月5日〕(甲)

Specific fragmentation of K-shell excited/ionized pyridine derivatives studied by electron impact

(電子衝撃法による内殻励起・イオン化されたピリジン誘導体の特異的解離)

主査：岡田 和正 准教授

副査：相田 美砂子 教授, 江幡 孝之 教授, 山崎 勝義 教授

日下 良二 〔平成24年3月23日〕(甲)

Laser spectroscopic study of molecular recognition of crown ethers on the complexation with neutral molecules

(レーザー分光法によるクラウンエーテルの中性分子包接における分子認識機構の研究)

主査：江幡 孝之 教授

副査：相田 美砂子 教授, 山崎 勝義 教授, 井口 佳哉 准教授

1-3-7 T Aの実績

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

平成23年度のT A

氏 名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
赤瀬 大	化学実験	量子化学	D2
安藤 広司	化学実験	量子化学	D3
上脇 隼一	化学実験	分子生物物理学	D2
小澤 賢伯	化学実験	錯体化学	M2
河野 七瀬	化学実験	反応物理化学	D1
小坂 有史	化学実験	反応有機化学	D1
堺 真通	化学実験	構造物理化学	D4
坂宗 和明	情報活用演習	量子化学	D5
菅原 峻	化学実験	有機典型元素化学	M2
石 遠	化学実験	有機典型元素化学	D1
玉光 弘典	化学実験	光機能化学	D1
張 笑	化学実験	固体物性化学	D1
土居 英男	化学実験	量子化学	D2
土手 遙	化学実験	放射線反応化学	D1
韓 晶	化学実験	固体物性化学	D2
前田 晃弘	化学実験	量子化学	D4
三枝 俊亮	化学実験	量子化学	D2
宮本 秀範	化学実験・情報活用演習	量子化学	D4
若宮 与二	化学実験	光機能化学	M2

1-3-8 大学院教育の国際化

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

1-4 専攻の研究活動

1-4-1 研究活動の概要

・受賞実績

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

1992年度 (平成4年度)	化学ソフトウェア学会学会賞	吉田 弘
1993年度 (平成5年度)	第50回中国文化賞	菅 隆幸
1994年度 (平成6年度)	日本分析化学会学会賞	熊丸 尚宏
1996年度 (平成8年度)	フンボルト賞	秋葉 欣哉
1997年度 (平成9年度)	日本化学会賞 日本化学会学術賞	秋葉 欣哉 谷本 能文
1998年度 (平成10年度)	第55回中国文化賞	秋葉 欣哉
1999年度 (平成11年度)	日本化学会賞	岩田 未廣
1999年度 (平成11年度)	錯体化学研究会研究奨励賞	久保 和幸
2000年度 (平成12年度)	紫綬褒章	秋葉 欣哉
2000年度 (平成12年度)	第23回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞	小島 聡志
2004年度 (平成16年度)	第27回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞	灰野 岳晴
2007年度 (平成19年度)	広島大学学長賞	江幡 孝之
2007年度 (平成19年度)	第25回日本化学会学術賞	江幡 孝之
2007年度 (平成19年度)	日本分析化学会フローインジェクション分析研究 懇談会フローインジェクション分析学術賞	藤原 照文
2007年度 (平成19年度)	野副記念奨励賞	安倍 学
2008年度 (平成20年度)	William F. Meggers Award, Society for Applied Spectroscopy	石橋 孝章
2008年度 (平成20年度)	Visiting Lectureship of the Chemistry Research Promotion Center (National Taiwan University)	安倍 学
2008年度 (平成20年度)	第31回有機合成化学協会 中国四国支部奨励賞	高木 隆吉
2008年度 (平成20年度)	Zimmer Award (Univ. of Cincinnati)	安倍 学
2009年度 (平成21年度)	Visiting Lectureship of the Chemistry Research Promotion Center (National Taiwan University)	灰野 岳晴
2011年度 (平成23年度)	科学技術分野の文部科学大臣表彰 科学技術賞 理解増進部門	西原 禎文

・学生の実績

山下 潤	第27回化学反応討論会	(ベストポスター賞)
渡辺新治	Chairman of the International Organizing Committee	(ベストポスター賞)
菅原 峻	第22回基礎有機化学討論会	(ポスター賞)
土井啓右	第5回分子科学討論会	(優秀ポスター賞)
高下慶典	第5回分子科学討論会	(優秀ポスター賞)
叶 建准	The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium	(The Best Student Presentation Award)
吉水 稔	The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium	(The Best Student Presentation Award)
三枝俊輔	The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium	(The Best Student Presentation Award)
魏 紹禹	The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium	(The Best Student Presentation Award)
井上達也	The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium	(Student Award)
上田祐子	The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium	(Student Award)
菅原 峻	第38回有機典型元素化学討論会	(優秀ポスター賞)

・RAの実績

化学専攻における研究支援体制を充実・強化し、また若手研究者の養成を促進するために、リサーチ・アシスタント（RA）のシステムを適用している。大学院博士課程後期在学者を、その所属研究グループに研究補助者として参画させることによって、その研究グループにおける研究活動を効果的に促進し、研究体制を充実させる。さらに、その学生に対して、若手研究者としての研究遂行能力の養成を図る。

平成23年度のRA

大学院生氏名	赤瀬 大	所属研究グループ	量子化学
学年	D 2	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	水クラスターの水素結合パターンに関する理論化学的研究		

大学院生氏名	安藤 広司	所属研究グループ	量子化学
学年	D 3	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	共有結合性リガンドの反応特異性についての理論化学的研究		

大学院生氏名	河野 七瀬	所属研究グループ	反応物理化学
学年	D 1	指導教員	山崎 勝義 教授
研究プロジェクト名	振動励起分子の衝突素過程の速度論および動力学研究		

大学院生氏名	小坂 有史	所属研究グループ	反応有機化学
学年	D 1	指導教員	安倍 学 教授
研究プロジェクト名	環状共役エノンとフラン類との光[2+2]環化付加反応における位置及び立体選択性		

大学院生氏名	鈴川 直幸	所属研究グループ	有機典型元素化学
学年	D 3	指導教員	山本 陽介 教授
研究プロジェクト名	新規スフェランドの合成と超原子価アート錯体合成への応用		

大学院生氏名	玉光 弘典	所属研究グループ	光機能化学
学年	D 1	指導教員	齋藤 健一 教授
研究プロジェクト名	ナノ構造の創製とそれを用いた発光強度増強の研究		

大学院生氏名	土居 英男	所属研究グループ	量子化学
学年	D 2	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	新しいモンテカルロ法の開発と水溶媒系への適用		

大学院生氏名	土手 遙	所属研究グループ	放射線反応化学
学年	D 1	指導教員	中島 覚 教授
研究プロジェクト名	集積型錯体の構築とスピン状態制御		

大学院生氏名	韓 晶	所属研究グループ	固体物性化学
学年	D 2	指導教員	井上 克也 教授
研究プロジェクト名	マルチフェロイック化合物の開発と物性研究		

大学院生氏名	三枝 俊亮	所属研究グループ	量子化学
学年	D 2	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	生体高分子間相互作用に関する理論研究		

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）、岡田 和正（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、レーザー光、放射光や電子線衝撃と超音速分子線装置を用いて、機能性分子や分子クラスターの構造、光励起化学反応、エネルギー緩和に関する研究を行っている。対象としている系は包接化合物、生体関連分子、比較的簡単な多原子分子やそのクラスターである。実験と併行して、量子化学計算に基づいた分子クラスターや包接化合物の構造決定、振動スペクトルの解析を行っている。また、振動分光と熱分析を併用して、両親媒性分子を中心に多様な物質系の構造とそれに関わる相互作用を研究している。平成23年度の研究活動は次のとおりである。

- ① カリックスアレンやクラウンエーテルをホストとした包接錯体の構造や分子認識の研究を精力的に行っている。具体的には、超音速分子線中に包接錯体を生成し、錯体の電子スペクトルや赤外-紫外二重共鳴法により分子種を選別した赤外スペクトルを観測し、量子化学計算による最適化構造計算との比較から包接構造を決定した。カリックスアレンについては、疎水性、親水性のどちらのゲスト分子とも容易に包接錯体を形成することが分かった。この結果をアメリカ化学会誌 *J. Phys. Chem. A* に発表した。
- ② 井口が昨年スイス・ローザンヌ連邦工科大学のRizzo教授の研究グループと共同研究を行ったアルカリ金属イオン-クラウンエーテル包接錯体の構造に関するエレクトロスプレー／極低温イオントラップ-レーザー分光研究をまとめ、アメリカ化学会誌 *J. Am. Chem. Soc.* に発表した。
- ③ ベンゼン付加クラウンエーテルと中性ゲスト分子との包接化合物形成の研究を引き続き行っている。これまでの研究の結果、ベンゼン付加クラウンエーテルは、イオンだけでなく中性分子に対しても分子認識を示し、特に橋掛け型で水素結合する特定のゲスト分子に対してのみコンフォマー変形し安定包接錯体を形成することを見いだしている。この結果は、*Phys. Chem. Chem. Phys.* に発表した。
- ④ 不揮発性の高分子量機能性分子の新規質量分析法としてこれまで行ってきたレーザー蒸発／真空紫外イオン化質量分析法に加え、レーザー蒸発／レーザー誘起蛍光法の開発を行っている。
- ⑤ エレクトロスプレーによる気体イオン生成の研究を開始した。この研究は、今後展開するエレクトロスプレー／極低温イオントラップ・レーザー分光の第1歩となる研究である。
- ⑥ 時間分解分光実験を用い、ベンゼンクラスターの振動緩和ダイナミクス研究を行った。昨年発表したベンゼン二量体に加え三量体のCH伸縮振動励起後の振動エネルギー緩和をピコ秒の赤外-紫外ポンプ・プローブ法により実時間観測した。その結果T型のベンゼン二量体では、stem siteの側のベンゼンCHの振動緩和速度がTop site側に比べ約3倍速くなることを見いだした。また、その後の緩和は3つのステップで進み最終的に解離に進むこと、や各ステップの速度を求めた。この研究結果は、アメリカ物理学会誌 *J. Chem. Phys.* に発表した。
- ⑦ 基本的な有機化学反応である S_N2 反応における溶媒効果を微視的に明らかにするために、 $[I-(CH_3)_3I(H_2O)_n]$ 錯体を気相中に生成し、振動分光と量子化学計算により錯体の構造と水分子の増加に伴う構造変化を調べた。その結果、水分子3個で既に S_N2 反応を阻害する構造が安定になることが明らかになった。
- ⑧ 電子衝撃法によるピロール環のサイト特異的解離の研究を実施した。励起源として数百eVの電子線を用い、3-メチルピロールの窒素および炭素内殻領域でのフラグメンテーションを解離イオンの質量分析によって調べた。その結果、 $C_4H_5^+$ の収量が窒素内殻イオン化で増大することが分かった。すなわち、これまで実施したピリジン系と同様、この分子においても窒素近傍での選択的結合開裂が観測された。
- ⑨ 四員環フルオロ化合物の内殻励起と解離の研究を継続して行った。*cis*-ヘキサフルオロシク

ロブタンはパーフルオロ化合物代替ガスのひとつとして期待されるが、光解離に関する情報は不十分である。本研究では炭素およびフッ素内殻領域における光励起・解離メカニズムを考察した。解離イオン対の同時計測から、 $C_3H_2F_3^+/CF_2^+$ はF原子の脱離後に直接解離していることが分かった。この解離経路においてH原子をすべて形式的にF原子に置換すると、パーフルオロシクロブタンの $C_3F_5^+/CF_2^+$ の解離経路と一致した。このような解析によって、パーフルオロシクロブタンと *cis*-ヘキサフルオロシクロブタンにおける初期解離過程を整理することができた。また、 σ^*_{CC} へ励起するとC-F結合解離がさらに進むよりはC-C結合解離を起こしやすくなることが分かった。

- ⑩ オキサアルキル鎖による分子間引力と反発の拮抗相互作用を利用した、新しい分子間相互作用による非常にユニークで汎用性の高い有機材料の新規物性改良法を開発し、特許申請した。この手法の応用を目的として複数の企業との共同研究が進行中である。

○発表原著論文

- Ryoji Kusaka, Satoshi Kokubu, Yoshiya Inokuchi, Takeharu Haino, and Takayuki Ebata (2011),
 ◎“The Structure of host-guest complexes between dibenzo-18-crown-6 and water, ammonia, methanol, and acetylene – Evidence of Molecular Recognition on the Complexation –”,
Phys. Chem. Chem. Phys., **13**, 6827-6836
- Y. Inokuchi, O. V. Boyarkin, R. Kusaka, T. Haino, T. Ebata and T.R. Rizzo (2011),
 ◎“UV and IR Spectroscopic Studies of Cold Alkali Metal Ion-Crown Ether Complexes in the Gas Phase”,
J. Am. Chem. Soc. **133**, 12256-12263
- S. Kaneko, Y. Inokuchi, T. Ebata, E. Aprà, and S. S. Xantheas (2011),
 ◎“Laser Spectroscopic and Theoretical Studies of Encapsulation Complexes of Calix[4]arene”,
J. Phys. Chem. A **115**, 10846-10853
- Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi and Takayuki Ebata (2012),
 ◎“Vibrational energy relaxation of benzene dimer and trimer in the CH stretching region studied by picosecond time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopy”,
J. Chem. Phys. **136**, 044304 (8 pages)
- Y. Inokuchi, O. Boyarkin, T. Ebata and T. Rizzo (2012),
 ◎“UV and IR Spectroscopy of Cold 1,2-Dimethoxybenzene Complexes with Alkali Metal Ions”,
Phys. Chem. Chem. Phys., **14**, 4457-4462
- K. Okada, T. Nakashima, M. Sakai, A. Suemitsu, C. Huang, H. Yagi, H. Katayanagi, K. Mitsuke, and K. Tabayashi (2011) Dissociative photoionization of perfluorocyclobutane and *cis*-1,1,2,2,3,3-hexafluorocyclobutane.
J. Phys. Conf. Ser., **288**, 012021.
- K. Tabayashi, K. Yamamoto, T. Maruyama, H. Yoshida, K. Okada, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, T. Gejo, and K. Honma (2011) ◎“Core-electron excitation and fragmentation processes of hydrogen bonded acetic-acid clusters in the oxygen K-edge region”
J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., **184**, 134-139.
- Y. Tamenori, K. Okada, K. Tabayashi, A. Hiraya, T. Gejo, and K. Honma (2011) ◎“Photodissociation investigation of doubly charged ethanol clusters induced by inner-shell electron ionization”
J. Chem. Phys., **134**, 204302.
- K. Okada, A. Suemitsu, T. Terashima, Y. Iwasaki, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, S. Nagaoka, and K. Tabayashi (2011) “Photofragmentation of the K-shell excited perfluorocyclobutane: Anisotropies in the fragments and breakdown pathways”
J. Mass Spectrom., **46**, 635-639.
- M. Sakai and K. Okada (2011) “Effect of fluoro substitution on the fragmentation of the K-shell excited/ionized pyridine studied by electron impact”
J. Mass Spectrom., **46**, 666-671.

○著書および総説

Takayuki Ebata, Ryoji Kusaka and Yoshiya Inokuchi

◎“Vibrational Spectroscopy of Gas Phase Functional Molecules and Their Complexes Cooled in Supersonic Beams”, *Vibrational Spectroscopy, Chap. 3, pp79-84, Edited by Dominique de Caro, InTech* (2012)

○国際学会

T. Ebata, “Spectroscopic and Theoretical Study on the Structures and Dynamics of Functional Molecules – Towards an understanding of the molecular recognition for encapsulation complexes”, 66th OSU International Symposium on Molecular Spectroscopy (June 21-25, 2011, Columbus) (基調講演, 招待)

K. Okada, T. Terashima, A. Suemitsu, I. H. Suzuki, S. Nagaoka, K. Tabayashi, and Y. Tamenori: Photofragmentation of the K-shell excited perfluorocyclobutane probed by a multiple-ion coincidence technique. The 27th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (27 July-2 August 2011, Belfast, Northern Ireland, UK) (ポスター) “Laser spectroscopic study on structures of 3n-crown-n(n=4,5,6) complexes with phenol”

○Ryoji Kusaka and Takayuki Ebata (June 21-25, 2011, Columbus, Ohio) (Oral)
“Studies on hydration effect to $\text{Br}^-(\text{CH}_3\text{Br})$ cluster”

○Eijiro Togano, Keisuke Doi, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata (Dec. 10-11, 2011, Hiroshima) (Oral) “Excited state dynamics of Methyl-4-hydroxycinnamate studied by picosecond pump-probe spectroscopy”

○Daiki Shimada, Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Masahiro Ehara (Dec. 10-11, 2011, Hiroshima) (Oral) “Laser spectroscopic study of β -estradiol and its hydrated clusters in a supersonic jet”

○Fumiya Morishima, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata (Dec. 10-11, 2011, Hiroshima) (Oral) “Intramolecular vibrational energy redistribution of CH stretching vibration of benzene derivatives”

○Minoru Yoshimizu, Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata (Dec. 10-11, 2011, Hiroshima) (Oral)

○国内学会

江幡孝之, 「レーザー分光と理論化学計算による包接化合物の分子認識の解明」 レーザー学会学術講演会第32回年次大会 (2012年1月, 仙台) (招待講演)

井口佳哉, 「クラウンエーテルの金属イオン包接錯体の極低温気相分光」 文部省科研費特定領域研究「高次系分子科学」シンポジウム (2011年12月, 沖縄) (依頼講演)

井口佳哉「極低温イオントラップ中の金属イオン-クラウンエーテル錯体のレーザー分光」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌) (口頭発表)

M. Sakai, K. Okada: Effect of fluoro substitution on the fragmentation of the K-shell excited/ionized pyridine. 第27回化学反応討論会 (2011年6月, 東京) (ポスター)

○森島史哉, 井口佳哉, 江幡孝之 (口頭)

「Laser spectroscopic study of β -estradiol and its hydrated clusters」第11回分子分光研究会 (2011年5月, 広島)

○森島史哉, 井口佳哉, 江幡孝之 (口頭)

「超音速ジェット中でのレーザー分光を用いたestrogenの構造に関する研究」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)

○日下良二, 井口佳哉, 灰野岳晴, 江幡孝之 (口頭)

「(3n-crown-n)-phenol錯体のレーザー分光を用いたestrogenの構造に関する研究」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)

○島田大樹, 江幡孝之, 日下良二, 井口佳哉, 江原正博 (口頭)

「ピコ秒pump-probe分光によるmethyl-4-hydroxycinnamateとその水和クラスターの無輻射緩和ダイナミクスの研究」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)

○梅野英二郎, 井口佳哉, 土井啓介, 江幡孝之, (ポスター)

「 $\text{Br}^-(\text{CH}_3\text{Br})$ 錯体におよぼす水分子溶媒和効果の研究」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)

- 金子翔平, 井口佳哉, 江幡孝之, Sotiris Xantheas (ポスター)
「超音速ジェットレーザー分光によるカリックスアレン類似体のゲスト分子包接構造に関する研究」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)
- 土井啓介, 井口佳哉, 中西隆造, 永田敬, 江幡孝之, (ポスター)
「 $\text{I}^+(\text{CH}_3)_2\text{S}_\text{N}2$ 反応系における微視的溶媒効果の研究」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)
- 吉水稔, 日下良二, 井口佳哉, 江幡孝之, (ポスター)
「ベンゼンのCH伸縮振動のIVRにおよぼす置換基導入効果の研究」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)
- 片桐勇志, 中岡拓馬, 江幡孝之, 井口佳哉, 三枝洋之 (ポスター)
「レーザー脱離法を用いた不揮発性分子とその分子クラスターのレーザー分光」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)
- 中島 徹, 梶谷祐美子, 岡田和正, 末光 篤, 為則雄祐, 鈴木 功, 長岡伸一(ポスター)
「内殻励起 *cis*-ヘキサフルオロシクロブタンの光解離ダイナミクス」第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)
- 熊谷将紀, 村上晃一, 奈須遼渡, 堀田貴仁, 福原幸一, 江幡孝之 (ポスター)
「オキサアルカノールオキサアルカン酸エステルの熱物性」第47回熱測定討論会 (2011年10月, 桐生)

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部4年生	0	0
博士課程前期	4	10
博士課程後期	1	1
博士課程前期・後期共	0	0

○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審査会専門委員及び国際事業委員会書面審査員
 - 井口佳哉, 日本分光学会学会誌編集委員 (2007-)
 - 福原幸一, 日本熱測定学会委員 (2005-)
- ・高大連携事業
 - 岡田和正, サイエンス・パートナーシップ・プログラム (SPP) 事業「研究者招へい講座」(2004年11月, 広島県立西条農業高等学校)
 - 岡田和正, 広島県高等学校教科学力養成事業, 平成22年度第4回講演 (2011年2月, 広島県立呉三津田高等学校)
- ・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局 (2003-2004)
 - 岡田和正, 第20回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム実行委員会委員 (2005-2007)
 - 岡田和正, 第26回化学反応討論会実行委員会委員 (2009-2010)
- ・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-)

○産学官連携実績

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

○受賞状況（学生）

吉水稔：「The Best Student Presentation Award」第8回ナノ・バイオ・イオフォ化学シンポジウム（東広島，2011/12/10-11）

日下良二：「広島大学学長賞」（2012/3/20）

日下良二：「広島大学理学研究科長賞」（2012/3/23）

日下良二：「日本化学会中国四国支部長賞」（2012/3/23）

○座長を行った学会・討論会の名称

岡田和正，The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Higashi-Hiroshima, December 2011.

井口佳哉，第5回分子科学討論会（2011年9月，札幌）

○研究助成の受け入れ状況

江幡孝之，科学研究費補助金 特定領域研究「分子高次系機能解明のための分子科学」領域番号「477」「ピコ秒赤外-紫外二重共鳴法によるサイト選別したベンゼンクラスターの振動緩和の研究」（2010-2011）（公募代表）

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

岡田和正，科学研究費補助金 基盤研究(C)（2010-2012）「解離片の同時計測と実時間追跡による準安定イオンの生成・解離に関する研究」（代表）

井口佳哉，住友財団・基礎科学研究助成（2011-2012）「広範囲温度可変イオン源の開発と，イオンが関与した化学過程における温度ゆらぎの研究」（代表）

井口佳哉，倉田記念日立科学技術財団・倉田奨励金（2011-2012）「イオンのための簡便かつ高感度な紫外～赤外分光光度計の開発」（代表）

○外部資金の受け入れ状況

江幡孝之，“頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム採択（日本学術振興会，H23年度）”「実験・理論・合成の連携による次世代機能性分子創出のための海外共同研究」主担当研究者

○その他特記事項

海外での講演

1. 江幡孝之，国立交通大学(台湾)の招待により三研究機関で講演を行った。(Dec.14-16, 2011) 中央研究院原子分子科学研究所，国立精華大学，国立交通大学

講演題目

“Spectroscopic and Theoretical Study on the Structures and Dynamics of Encapsulation Complexes”

“Time-resolved Study for the Ground and Electronic Excited State Dynamics of Gas Phase Aromatic Molecules”

2. 江幡孝之，パシフィックノースウエスト国立研究所（米国）で講演を行った。

講演題目

“Laser Spectroscopic and Theoretical Study of Encapsulation Complexes in the Gas Phase—Toward Molecular Level Understanding of the Encapsulation Mechanism of Host-Guest Complexes”

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-）

福原幸一，サイエンスカフェ活動

固体物性化学研究グループ

スタッフ 井上 克也 (教授), 西原 禎文 (准教授)

○研究活動の概要

当研究室では新しい機能をもつ固体の創製を目指し、種々の手法を用い固体の静的・動的構造と物性の関係を解明してきた。

協奏的多重機能を有する分子磁性体の構築と物性研究：キラル構造を有する磁性体（キラル磁性体）は、空間反転対称性と時間反転対称性が同時に破れた新しいカテゴリーに属する固体と考えられる。キラル磁性体では2つのパリティが同時に破れていることから、特異な磁気光学効果、磁気構造、電気-磁気効果（M-E効果）を示すと考えられる。純粋な無機化合物でキラル構造を達成するのは難しいため、我々は分子性の設計性の容易さを利用してキラル磁性体の構築とその物性研究を進めている。また類似化合物群であるマルチフェロイック化合物に関する研究もすすめた。

動的イオン場を利用した新規機能性分子材料の開発：単結晶内部に動的イオン空間を人為的に構築することにより、新規機能性材料の構築を目指す。例えば、イオンが包接可能な大環状分子を一次元に配列させることによってイオン伝導可能な単結晶材料の合成が可能となる。この様に作成した材料を用いて、その電氣的、磁氣的評価や熱的效果を評価する。次いで、得られた物性値を基に固体電池などのデバイスへの応用を計り、新たな分子エレクトロニクスデバイスの構築を目指した。

新規スピングャップ系の構築と化学ドーピング：現在、低次元スピングャップ化合物の物理的・化学的研究が盛んに行われている。中でも、スピングャップ化合物の一種であるスピンラダー物質は一次元と二次元の中間に位置する材料であり、その基底状態に興味をもたれている。加えて、この系は高温超伝導体の母体と類似した基底状態を有することから、キャリアドーピングによる超伝導相の出現が理論的に指摘されている。そこで、本研究室では分子磁性体を基盤とした低次元スピンラダー物質の作成と本系へのキャリアドーピングを実現し、新種の分子性スピンラダー超伝導体の構築を目指した。

○発表原著論文

- K. Tsuruta, M. Mito, H. Deguchi, S. Takagi, Y. Yoshida, K. Inoue (2011) Effect of uniaxial strain on a molecule-based ferrimagnet with crystal chirality. *Polyhedron*, **30**(18), 3262-3264.
- M. Atsuchi, K. Inoue, S. Nakashima (2011) Reversible structural change of host framework triggered by desorption and adsorption of guest benzene molecules in $\text{Fe}(\text{NCS})_2(\text{bpp})_2 \cdot 2(\text{benzene})$ ($\text{bpp}=1,3\text{-bis}(4\text{-pyridyl})\text{propane}$). *Inorganica Chimica Acta*, **370**(1), 82-88.
- G. X. Liu, X. F. Wang, H. Zhou, S. Nishihara (2011) Synthesis, structure and magnetic properties of a pentanuclear Cu(II) coordination polymer with 4-(imidazol-1-yl)-benzoic acid. *Inorg. Chem. Commun.*, **14**(9), 1444-1447.
- G. X. Liu, W. Guo, H. Yang, S. Nishihara, X. M. Ren (2011) Synthesis, Crystal Structure, Electronic Absorption and Magnetic Properties of a Novel Anion-Radical Salt Based on 7,7,8,8-Tetracyanoquinodimethane. *J. Chem. Cryst.*, **41**(9), 1262-1267.
- G. X. Liu, X. C. Cha, X. L. Li, C. Y. Zhang, Y. Wang, S. Nishihara, X. M. Ren (2011) An unusual two-dimensional 2-fold interpenetrating metal-organic framework based on tetranuclear manganese(II) clusters: Synthesis, structure and magnetic properties. *Inorg. Chem. Commun.*, **14**(6), 867-872.
- G. X. Liu, X. L. Xu, Y. Y. Xu, S. Nishihara, X. M. Ren (2011) Construction of two metal coordination polymers based on 1,4-terephthalate and 1,4-bis(1,2,4-triazol-1-ylmethyl)benzene. *Russ. J. Coord. Chem.*, **37**(3), 202-210.
- G. X. Liu, X. C. Zha, Y. Wang, S. Nishihara, X. M. Ren (2011) A New Chiral Cu(II) Complex Consisting of Achiral Flexible Tripodal Ligand of Benzene-1,3,5-Triacetate Acid with Phenanthroline. *J. Inorg. Organomet. Polymer Mater.*, **21**(1), 201-206.
- G. X. Liu, W. Guo, S. Nishihara, X. M. Ren (2011) A chiral copper(II) inverse-9-metallacrown-3 complex: Synthesis, crystal structure, ferroelectric and magnetic properties. *Inorg. Chim. Acta*, **368**(1), 165-169.

○国際会議

- Sadafumi Nishihara: Chemical Doping into A Molecular Spin Ladder. Nano-S&T (October, 2011, Dalian, China) (招待講演)
- Katsuya INOUE: DM Interactions in Chiral Magnets. Hannover University Seminar (September, 2011, Hannover, Germany) (招待講演)
- Kazuhisa Kunishio, Sadafumi Nishihara, Tomoyuki Akutagawa, Takayoshi Nakamura, Katsuya Inoue: Physical properties of a carrier doped $[\text{Ni}(\text{dmit})_2]$ molecular spin ladder. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (NaBiT2011) (December, 2011, Hiroshima, Japan) (口頭発表)
- Masao Hadano, Motoko Akita, Sadafumi Nishihara, Motoko Akita, Katsuya Inoue: Chemical/Physical properties of iron(III) phosphates in sorption processes. The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices (November, 2011, Hyogo, Japan) (ポスター発表)
- Daisuke Kojo, Sadafumi Nishihara, Motoko Akita, Katsuya Inoue: Synthesis and structures of new organic-inorganic multiferroics. The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices (November, 2011, Hyogo, Japan) (ポスター発表)
- Daisuke Konno, Sadafumi Nishihara, Motoko Akita, Katsuya Inoue, Tomoyuki Akutagawa, Takayoshi Nakamura: Observation of Magnetic and Structural Phase Transition in $\text{Li}_2([\text{15}]\text{crown-5})_3[\text{Ni}(\text{dmit})_2]_2(\text{H}_2\text{O})_2$. The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds (November, 2011, Hyogo, Japan) (ポスター発表)
- Yuki Nakano, Sadafumi Nishihara, Motoko Akita, Katsuya Inoue: Synthesis and Magnetic Properties of Cu(II) Complexes Containing 1,3-bis(4-pyridyl)propane as Bridging Ligand. The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices (November, 2011, Hyogo, Japan) (ポスター発表)
- Li Li, Sadafumi Nishihara, Katsuya Inoue: Synthesis and structures of chiral molecule-based magnets. The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices (November, 2011, Hyogo, Japan) (ポスター発表)
- Chisato Kato, Sadafumi Nishihara, Ryo Tsunashima, Yoko Tatewaki, Katsuya Inoue: Crystal Structure and Magnetic Properties of A Doughnut-shaped POM Including Gadolinium(III). The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices (November, 2011, Hyogo, Japan) (ポスター発表)
- Marina Miyagawa, Sadafumi Nishihara, Katsuya Inoue: Synthesis and crystal growth new inorganic chiral magnets. The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices (November, 2011, Hyogo, Japan) (ポスター発表)
- Daisuke Konno, Sadafumi Nishihara, Motoko Akita, Katsuya Inoue, Tomoyuki Akutagawa, Takayoshi Nakamura: Crystal Structure and Physical Properties of $\text{Li}_2([\text{18}]\text{crown-6})_3[\text{Ni}(\text{dmit})_2]_2(\text{H}_2\text{O})_4$ Salt Having an Ion Channel. 9th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets (November, 2011, Poznań, Poland) (ポスター発表)

○国内学会

- 井上克也: 分子性キラル磁性体の特徴と可能性。第43回化合物新磁性材料研究会「キラル磁性体の構造と磁性」(2012年3月2日, 東京) (招待講演)
- 井上克也: 分子カイラル磁性体におけるメゾスコピックな新規新奇秩序の解明。ワークショップ「超低速ミュオン顕微鏡」(2011年5月29日, 東京) (招待講演)
- 井上克也: キラル磁性体の物性、構造：物質化学からの提案。日本物理学会シンポ「偏光特性を最大限に活用した放射光分光の新展開」(2012年3月25日, 兵庫) (招待講演)
- 井上克也: キラル磁性体の磁気構造と相図。領域会議「超低速ミュオン顕微鏡」(2012年1月7日, 山梨) (依頼講演)
- 井上克也: 分子性キラル磁性体の開發現状。Spring-8利用者懇談会「キラル磁性・マルチフェロイックス研究会」(2012年1月27日, 東京) (依頼講演)
- 井上克也: キラル磁性体における磁気的カイラリティ。中間子シンポジウム 超低速ミュオンが拓く無限の可能性 (2011年10月2日, 山梨) (依頼講演)
- 西原禎文: スピネル化合物 FeV_2O_4 の磁気物性。キラル磁性・マルチフェロイックス研究会 (2012

年1月 27日, 東京)(依頼講演)

西原禎文: 超分子構造体導入による金属錯体への機能付加。中国四国地区錯体化学研究会 (2011年4月23日, 広島)(依頼講演)

今野大輔, 西原禎文, 秋田素子, 井上克也, 芥川智行, 中村貴義: イオンチャネル構造を有する $\text{Li}_2([\text{15}]\text{crown-5})_3[\text{Ni}(\text{dmit})_2]_2(\text{H}_2\text{O})_2$ 塩の作製と物性。日本化学会第92春季年会(2012) (2012年3月27日, 神奈川)(口頭発表)

國塩和久, 西原禎文, 芥川智行, 中村貴義, 秋田素子, 井上克也: 超分子カチオンを含む新規導電性結晶 $[\text{Ph}(\text{NH}_3)]([\text{18}]\text{crown-6})[\text{Ni}(\text{dmit})_2]_3$ の合成と電気物性評価。日本化学会第92春季年会(2012) (2012年3月27日, 神奈川)(口頭発表)

中野佑紀, 西原禎文, 秋田素子, 井上克也: 新規スピンドラダー物質 $\text{Cu}_4(\text{bpp})_5(\text{CO}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_x$ の合成。日本化学会第92春季年会(2012) (2012年3月27日, 神奈川)(口頭発表)

加藤智佐都, 西原禎文, 綱島亮, 帯刀陽子, 井上克也: ランタノイドイオンを内包したPreyssler型POM、 $\text{K}_{12}[\text{GdP}_5\text{W}_{30}\text{O}_{110}]$ の構造と磁気物性。日本化学会第92春季年会(2012) (2012年3月27日, 神奈川)(口頭発表)

中野佑紀, 西原禎文, 井上克也: 架橋構造を有する $\text{Cu}(\text{II})$ 錯体の合成と磁気物性。2011日本化学会西日本大会 (2011年11月12日, 徳島)(口頭発表)

古城大祐, 西原禎文, 井上克也: 有機無機マルチフェロイック化合物: $(\text{RNH}_3)_2\text{CuCl}_4$ の合成と物性。錯体化学会第61回討論会 (2011年9月17日, 岡山)(口頭発表)

佐古渚, 西原禎文, 井上克也: Cucurbiturilを含む機能分子材料の開発。日本化学会第92春季年会(2012) (2012年3月27日, 神奈川)(ポスター発表)

宮川真里奈, 西原禎文, 高阪勇輔, 秋光純, 井上克也: FeGe 系化合物の合成と物性評価。日本物理学会第67回年次大会 (2012年3月25日, 兵庫)(ポスター発表)

石本哲也, 秋田素子, 西原禎文, 井上克也: オクタシアノメタルイオンを用いた新規分子磁性体の合成と物性。錯体化学会第61回討論会 (2011年9月17日, 岡山)(ポスター発表)

北尾大樹, 秋田素子, 西原禎文, 井上克也: ジメトキシフェニルニトロニルニトロキシドラジカルを含む遷移金属錯体の合成、構造及び磁氣的性質。錯体化学会第61回討論会 (2011年9月17日, 岡山)(ポスター発表)

今野大輔, 西原禎文, 秋田素子, 井上克也, 芥川智行, 中村貴義: イオンチャネル構造を有する $\text{Li}_2([\text{18}]\text{crown-6})_3[\text{Ni}(\text{dmit})_2]_2(\text{H}_2\text{O})_4$ 塩の電気物性評価。錯体化学会第61回討論会 (2011年9月17日, 岡山)(ポスター発表)

國塩和久, 西原禎文, 芥川智行, 中村貴義, 秋田素子, 井上克也: $[\text{Ni}(\text{dmit})_2]$ 分子を用いた分子性スピンドラダーへのキャリアドーピングと物性評価。錯体化学会第61回討論会 (2011年9月17日, 岡山)(ポスター発表)

中野佑紀, 西原禎文, 秋田素子, 井上克也: ピリジン誘導体を架橋配位子とした $\text{Cu}(\text{II})$ 錯体の合成と磁気物性。錯体化学会第61回討論会 (2011年9月17日, 岡山)(ポスター発表)

能美耕太郎, 西原禎文, 秋田素子, 井上克也: アミノ酸を用いた遷移金属錯体の合成、構造と物性。錯体化学会第61回討論会 (2011年9月17日, 岡山)(ポスター発表)

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部4年生	2	3
博士課程前期	7	11
博士課程後期	0	0
博士課程前期・後期共	0	0

○セミナー・講演会開催実績

井上克也, Spring-8利用者懇談会「キラル磁性・マルチフェロイックス研究会」(2012年1月27日) 組織委員長

○社会活動・学外委員

井上克也, 日本学術振興会科学研究費審査委員

井上克也, 高輝度放射光研究施設、利用者懇談会、委員
井上克也, 高輝度放射光研究施設、利用者懇談会、キラル／マルチフェロイック磁性研究会、
会長
井上克也, Ideen EXPO, ハノーバーアイデア博, ハノーバー, 出展 (2011)

○国際共同研究・国際会議開催実績

井上克也, The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin
Devices (November, Hyogo, Japan) 組織委員長 (2011)

○特許公報

特許公開, 井上 克也, 有機ラジカル化合物およびそれを用いた電池用電極、電池

特許公開 2012-74209

特許審査請求, 美藤 正樹、鶴田 一樹、長野 琢磨、根岸 順一郎、井上 克也、弾性操作で駆動
するスピンドバイス、特願 2011-016147

特許審査請求, 西原禎文, 呉剛志, 阪口翼, 松田奈緒, 赤土一行, 山上諒, 色／音変換装置, 出
願番号: 2008-297665

○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「スピネル酸化物 FeV_2O_4 の極低温相における磁気構造
の解明」(2010-)

井上克也、磁性領域共同研究「キラル磁性」(2004-)

○他研究機関での講義・客員

西原禎文, 大阪府立大学大学院理学系研究科物理科学専攻, 客員准教授, 2010年4月1日-

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金 基盤研究(A), キラル磁性体の合成戦略の構築, 代表 井上克也

科学研究費補助金 挑戦的萌芽研究, リボルバー型分子を利用した新規機能創出プログラム分子を
用いたスピン空間制御, 代表 西原禎文

A-Step, イオンチャネル型固体電解質の開発, 代表 西原禎文

産学連携若手研究支援プログラム, イオンチャネル構造を有する新規固体電解質の開発, 代表 西
原禎文

材料科学研究助成金, 超分子化学的手法による分子性スピンラダー構造へのキャリアドーピング,
代表 西原禎文

藤井研究助成基金, 新規分子性スピンラダー超伝導体の探索, 代表 西原禎文

物質・デバイス領域共同研究費, スピネル酸化物 FeV_2O_4 の極低温相における磁気構造の解明, 代
表 西原禎文

○受賞状況 (職員)

西原禎文, 文部科学大臣表彰・科学技術賞 (2011)

西原禎文, 松浦賞 (2012)

○受賞状況 (学生)

佐古渚, 平成23年度理学研究科長表彰 (2011)

宮川真里奈, 平成23年度日本化学会中国四国支部支部長賞 (2011)

○座長を行った学会・討論会の名称

西原禎文, 日本化学会第92春季年会(2012) (2012年3月, 神奈川)

錯体化学研究グループ

スタッフ 水田 勉 (教授), 久保 和幸 (助教)

○研究活動の概要

金属には、d-ブロック遷移金属だけでも 30 種以上の元素があり、それぞれの元素は個々に異なる電子環境を有している。したがって、複数の金属を組み合わせるとさらに多様な性質が生まれ、広大な未開拓の組み合わせには新しい素反応を見出せる可能性があると考えられている。しかしながら、複数の金属からなる錯体が期待する反応性を発揮するためには、二つの金属の相互配置と電子環境が狙い通りに整うことが重要なポイントとなる。目的とする多核錯体を合成するためには、架橋配位子が必要であり、リン配位子は、特に middle から late の遷移金属に対して強く配位することが出来るため、架橋配位子に適している。本研究グループでは、架橋配位子を巧みに設計することで新たな構造や反応性をもつ多核錯体の合成を行っている。

研究テーマ 1：大環状リン配位子を用いた多核錯体の合成と反応

2つの金属を内包できるような大環状配位子を用いると、2つの金属の協同効果により環内の空間に有用な反応場を構築することができる。しかしながら、分子が大きくなると大環状配位子の溶解度が低下し、反応に用いることが困難になる。そこで、側鎖としてシクロヘキシル基、およびウンデシル基をもつ大環状配位子の合製法を新たに開発した。

溶解度の向上に伴い、従来の白金を中心金属としたものに加えて、Cu(I)H を環内に 2 つ取り込ませることに成功した。これらの錯体は、二酸化炭素を還元する能力を有することを明らかにした。また、 $[\text{Ag}(\text{NCMe})_4]^+$ および $[\text{Cu}(\text{NCMe})_4]^+$ と大環状リン配位子との反応による生じる 2 核銀(I)および 2 核銅(I)錯体は、環内に基質としてビピリミジンを取り込むことを明らかにし、2 つ金属の協働効果による取り込み能の違いを明らかにした。

研究テーマ 2：ホスフィド架橋 2 核鉄錯体によるプロトン還元反応

ナフタレンの 1,8 位にホスフィドを結合させた配位子を架橋配位子として、2 核鉄カルボニル錯体を合成した。この錯体はプロトンの電気化学的還元反応を触媒することが出来る。架橋部が rigid なナフタレンとなっているため、強酸性条件下でも熱的に分解しにくい触媒として有用であった。また、カルボニル配位子を電子供与性の高い配位子とすることでプロトンとの親和性が高まり、過電圧がより少なくてすむ金属錯体触媒を開発することにも成功した。

さらに当研究グループでは、リン化合物の多彩な反応性に注目し、その特性を生かした新規な反応性配位子の開発を行っている。その遷移金属錯体には、金属中心と配位子とが協奏的に働く、新しい反応性が期待できる。

研究テーマ 3：活性多重結合を有する反応性リン配位子の開発

高周期典型元素を含む多重結合は極めて活性であり、不活性結合の切断反応に利用できると期待されている。本研究では、P=B や P=N 二重結合を有する反応性配位子を種々合成し、その鉄錯体と小分子との反応を検討した。

研究テーマ 4：機能化カルボジホスホラン配位子の開発

カルベンに類似した 2 配位炭素化合物であるカルボジホスホラン $\text{R}_3\text{P}-\text{C}-\text{PR}_3$ (以下, CDP) は、中心の 0 価炭素が強いドナー性を有することから、遷移金属触媒の支持配位子として有望である。本研究では、CDP 配位子の機能化について種々検討し、キラリティーの導入や、多座配位子化を検討するとともに、その遷移金属錯体の構造や反応性を検討した。さらに、これを架橋配位子として用いた多核金属錯体の合成を行った。

○発表原著論文

Y. Teramoto, K. Kubo, T. Mizuta (2011) ©PhP-PPh group bound to 1,8-positions of naphthalene: Preparation of *cis* isomer and synthesis of binuclear complex *J. Organomet. Chem.*, **696**(21), 3402-3407.

○国際会議

H. Jinno, K. Kubo, R. G. Cavell, T. MIZUTA: ©C-H and P-C Bond Activation of Hexaphenylcarbodiphosphorane Coordinating to Rhodium Complex. 1st International Symposium on Molecular Activation (Nov., 2011, Awaji, Japan) (ポスター)

○国内学会

- 木村尚弘, 水田 勉, 久保和幸, 小澤賢伯, 稲見裕太: 大環状 4 座ホスフィン配位子に内包された 2 つの金属の協働効果による基質の取り込み反応。第 61 回錯体化学討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)
- 湯浅隆寛, 久保和幸, 水田 勉: 鉄-ビスホスフィンイミド錯体とジクロロホスフィンとの反応によるシクロメタラホスファゼンの合成と反応性。第 61 回錯体化学討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)
- 小澤賢伯, 木村尚弘, 久保和幸, 水田 勉: アルキル鎖をもつ大環状 4 座ホスフィン配位子とそれを用いた 2 核白金錯体の合成。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜) (一般講演)
- 馬場美智子, 寺本裕一, 久保和幸, 水田 勉: 二つのナフタレンで強固に固定した P-P 結合: 配位子およびその二核金属錯体の合成。第 61 回錯体化学討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (ポスター)
- 寺本裕一, 久保和幸, 水田 勉: Preparation of Binuclear Iron Complexes with 1,8-Naphthylene-diphosphido Bridge and Their Catalytic Proton Reduction Activities. 第 58 回有機金属化学討論会 (2011 年 9 月, 名古屋) (ポスター)
- 西脇和穂, 久保和幸, 神野 弘, 吉田明美, Cavell, Ronald G., 水田 勉: Syntheses and Reactivities of Noble Metal Complexes of Hexaarylcarbodiphosphoranes Bearing a Chiral and/or Pincer Framework. 第 58 回有機金属化学討論会 (2011 年 9 月, 名古屋) (ポスター)
- 保田将吾, 久保和幸, 水田 勉: 6 座ホスフィン配位子を用いた白金 3 核錯体の合成。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜) (ポスター)

○学生の学会発表実績

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

○セミナー・講演会開催実績

- 水田 勉, 中国四国地区錯体化学研究会
日時: 2011 年 4 月 23 日
場所: 理学研究科 E002 号室
- 水田 勉, 錯体化学秋の学校
日時: 2011 年 9 月 19-20 日
場所: せとうち児島ホテル
- 水田 勉, 分子研研究会
「innovation を目指す若手錯体化学者シンポジウム」
日時: 2012 年 3 月 13 日
場所: 自然科学研究機構分子科学研究所
- 水田 勉, Dr. Rory Waterman 講演会
日時: 2011 年 4 月 18 日
場所: 理学研究科 E209 号教室
題目: Zirconium-Mediated Bond Formation: Methods, Molecules, and Materials.
- 水田 勉, Dr. Jean Pierre Djukic 講演会
日時: 2012 年 2 月 27 日
場所: 理学研究科 B301 号教室
題目: Non-Covalent Interactions in Transition Metal Chemistry: from Molecular Cohesion to Molecular Design

○社会活動・学外委員

・学協会役員，委員

水田 勉，日本化学会	中国四国支部庶務幹事（2005-2006）
水田 勉，日本化学会	中国四国支部会計幹事（2006-2007）
水田 勉，錯体化学会	理事（2006-2007）
水田 勉，錯体化学会	理事（2011-）
水田 勉，錯体化学会	錯体化学討論会運営委員（2006-）
水田 勉，錯体化学会	第 56 回錯体化学討論会広島実行委員（2006 年）

・高大連携事業

水田 勉，自然科学実験セミナー 鳥取県立鳥取東高等学校（2011 年 9 月，広島大学）
水田 勉，SSH ラボセミナー 広島県立国泰寺高校（2011 年 11 月，広島大学）
水田 勉，出張講義 鳥取県立鳥取西高等学校『学問への誘い』（2012 年 3 月，鳥取市）
久保和幸，自然科学実験セミナー 鳥取県立鳥取東高等学校（2011 年 9 月，広島大学）
久保和幸，SSH ラボセミナー 広島県立国泰寺高校（2011 年 11 月，広島大学）

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金 新学術領域研究(研究領域提案型)，大環状型とクリプタンド型のリン配位子を用いた多核錯体の合成と CO_2 との反応，代表 水田 勉
科学研究費補助金 基盤研究(C)，2 つの金属を内包したリンマクロサイクルを利用する二酸化炭素の還元反応，代表 水田 勉
科学研究費補助金 基盤研究(C)，Non-Innocent な高周期典型元素配位子を機軸とした、協奏的分子変換反応，代表 久保和幸

○座長を行った学会・討論会の名称

水田 勉，第 61 回錯体化学討論会，岡山，2011 年 9 月
久保和幸，第 61 回錯体化学討論会，岡山，2011 年 9 月
水田 勉，第 58 回有機金属討論会，名古屋，2011 年 9 月
久保和幸，日本化学会第 92 春季年会，横浜，2012 年 3 月

分析化学研究グループ

スタッフ 藤原 照文 (教授), 石坂 昌司 (准教授), 岡本 泰明 (助教)

○研究活動の概要

近年、著しく発展したナノテクノロジーや地球科学などの先端的な研究分野において、種々の異相界面などのナノメートルサイズの微小域やマイクロメートルサイズの微小液滴、例えばエアロゾル水滴における化学種の相互作用に関する情報を得る方法論が重要となっている。そのため、ナノ・マイクロ微小域の計測技術に関する研究、及びその特異性を活用した新規な分離・検出法の開発が盛んに押し進められている。また、微小域の溶液が有する特異な構造や性質の本質はあまり解明されておらず、溶液化学の分野においても関心が向けられている。そこで、当研究グループでは界面等の微小域における特異な反応性の本質の解明とレーザー分光法、分離法及び原子・分子スペクトルによる新規な超微量計測法の開発を目的として、以下のテーマを中心に研究を行っている。平成23年度の研究成果を以下に掲げる。

1. ナノ・マイクロ微小域における特異な反応性とレーザー分光法及び分離法に関する研究

(a) 逆ミセルメディア化学発光(CL)反応と液-液抽出を組み合わせた新規なフローインジェクション分析法の開発: イオン液体を用いた抽出法と逆ミセルメディアCL検出法を組み合わせたロジウム(III)のフローインジェクション定量法を開発した。また、当研究グループにて見いだしたCTAC逆ミセル中でのローダミンB-セリウム(IV)系CLにおけるナノ反応場の特異性の解明とともに、ローダミンBを用いたイオン会合抽出法と組み合わせたアンチモンの酸化数別定量法の開発を行った。さらに、その分析システムのオンライン化を達成した。

(b) シリカ表面への逆ミセルの吸着挙動に関する研究: 蛍光色素であるフルオレセインをプローブとして分散させたCTAC逆ミセルのシリカ表面への吸着挙動を顕微蛍光法により観測し、CTAC濃度、水とCTACのモル濃度比およびバルク溶媒組成などの影響の結果から、吸着した逆ミセルのナノ界面場の特性について考察した。

(c) 我々は、気相の温度と湿度を制御可能なレーザー捕捉・顕微分光システムを構築し、降雨・降雪に関係するエアロゾル微小水滴の物理化学現象を光学顕微鏡下で人工的に再現し、単一水滴ごとに分光計測可能なシステムの開発を目指している。当研究グループにて新たに構築したレーザー捕捉顕微分光システムに湿度制御装置を組み込んだ。これにより、チャンバー内の湿度を任意に制御することが可能となった。温度一定条件下においてチャンバー内湿度を変化させることにより、微小水滴を空中の一点に非接触で静止させたまま、その平衡直径を可逆に制御することに成功した。

2. 電気加熱気化誘導結合プラズマ原子スペクトル分析

ヨーロッパ連合において施行されているRoHS指令(電気電子機器における特定有害物質の使用制限指令)によって使用が制限されている有害金属、臭素系難燃剤、環境ホルモンと認定されているテトラブロモビスフェノールAなど、主に性能向上の目的でプラスチック中に添加されていたこのような臭素系有機物に対して、従来の蛍光X線分析法より高感度かつ簡単な操作によるスクリーニング分析法が求められている。そこで、メタル炉加熱気化導入法を用いたICP-AESによるプラスチック中の微量水銀の簡便・迅速定量法を開発した。本法によれば、わずか2~3 mgの試料量で充分測定可能で、かつ検出感度もサブppbレベルの水銀が検出できる。従来法より数桁程度は感度が向上した。

○発表原著論文

- T. H. A. Hasanin, Y. Tsunemine, S. Tsukahara, Y. Okamoto, T. Fujiwara (2011) ©Chemiluminescence from Oxidation Reaction of Rhodamine B with Cerium (IV) in a Reversed Micellar Medium of Cetyltrimethylammonium Chloride in 1-Hexanol-Cyclohexane/Water. *Anal. Sci.*, **27**(3), 297-304.
- S. Tsukahara, K. Mukai, S. Watanabe, T. Fujiwara (2011) *In Situ* Fluorescence Microscopic Measurements of the Phase Transition Behavior of Dipalmitoyl Phosphatidylcholine Monolayers Prepared at Hydrocarbon/Water Interfaces. *Solv. Extr. Res. Develop. Jpn.*, **18**, 149-158.
- S. Tsukahara, Y. Shishino, T. Fujiwara (2011) Microscope Measurements for the Transient Formation of W/O Emulsions of Sodium Bis(2-ethylhexyl) Sulfosuccinate in the Dodecane/Water Interfacial Region. *Langmuir*, **27**(12), 7392-7399.
- S. Ishizaka, T. Wada and N. Kitamura (2011) *In Situ* Observations of Freezing Processes of Single

- Micrometer-sized Aqueous Ammonium Sulfate Droplets in Air. *Chem. Phys. Lett.*, **506**(1-3), 117-121.
- K. Namba, A. Osawa, S. Ishizaka, N. Kitamura and K. Tanino (2011) Direct Synthesis of Fluorescent 1,3a,6a-Triazapentalene Derivatives via Click-Cyclization-Aromatization Cascade Reaction. *J. Am. Chem. Soc.*, **133**(30), 11466-11469.
- T. Yoshimura, S. Ishizaka, T. Kashiwa, A. Ito, E. Sakuda, A. Shinohara and N. Kitamura (2011) Direct Observation of a $\{\text{Re}_6(\mu_3\text{-S})_8\}$ Core-to-Ligand Charge-Transfer Excited State in an Octahedral Hexarhenium Complex. *Inorg. Chem.*, **50**(20), 9918-9920.

○総説

- 石坂昌司 (2011) 光ピンセットで単一微小水滴を気相中に浮遊させる。化学と工業, **64**(3), 230-231.

○国際会議

- S. Tsukahara, S. Watanabe, Y. Okamoto, T. Fujiwara: *In Situ* Measurements of Reversible Adsorptions of Single Protein Molecules to Phospholipid Monolayers Prepared at Hexadecane/Water Interface by Total Internal Reflection Fluorescence Microscopy. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (招待講演)
- S. Ishizaka, T. Wada, and N. Kitamura: Laser Trapping and Spectroscopy of Single Supercooled Water Droplets in Air. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (一般講演)
- C. M. Nguyen, S. Ishizaka, and N. Kitamura: In situ Study on the Diffusion Process of Malachite Green in Single Laser-Trapped Ion-exchange Resin Beads. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (一般講演)
- K. Yamauchi, S. Ishizaka, and T. Fujiwara: Laser Trapping and Raman Spectroscopy of Single Water Droplets in Air. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec., 2011, Higashi-Hiroshima, Japan) (一般講演)
- S. Ishizaka: Laser trapping spectroscopy and dynamics of single water droplets in air. Academia Sinica & JST Joint Workshop on "Innovative Use of Light and Nano/Bio Materials (May, 2011, Taipei, Taiwan) (ポスター発表)
- D. Nakai, S. Tsukahara, Y. Okamoto, T. Fujiwara: Microscopic Measurements and Analysis of Velocity Profiles of Laminar Flow Formed near Interfaces. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (ポスター発表)
- N. Shinomori, S. Tsukahara, Y. Okamoto, T. Fujiwara: Microscopic Measurements of Lateral Diffusion of Rhodamine B at Liquid/Liquid Interfaces by Total Internal Reflection-Fluorescence Recovery after Photobleaching. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (ポスター発表)
- K. Ito, T. Shinoda, N. Miyamoto, T. Kuromoto, H. Morikawa, Y. Okamoto, T. Fujiwara, T. Hirokawa: Determination of Iodine in Food-related Substances. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (ポスター発表)
- K. Katayama, S. Tsukahara, Y. Okamoto, T. Fujiwara: *In Situ* Fluorescence Microscopic Measurements of Phase Transfers of Single DNA Molecules in Aqueous Two-Phase System. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (ポスター発表)
- Y. Tsunemine, T. H. A. E. Hasanin, Y. Okamoto, S. Tsukahara, T. Fujiwara: Flow-Injection Method for Determination of Antimony(V) Based on Cerium(IV) - Rhodamine B Chemiluminescence Using a Reversed Micelle System of Cetyltrimethylammonium Chloride Following Extraction. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (ポスター発表)
- X. Zhang, Y. Tamai, Y. Okamoto, S. Tsukahara, T. Fujiwara: Direct Determination of Scandium and Yttrium in Plastic Samples by Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry with Sample Cuvette-Tungsten Boat Furnace Vaporizer. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto, Japan) (ポスター発表)
- K. Yamauchi, S. Ishizaka, and N. Kitamura: Laser trapping and Raman spectroscopy of single aerosol water droplets. IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2011 (May, 2011, Kyoto,

○国内学会

藤原照文：逆ミセルのナノ界面反応場の特異性とその分析化学的应用。2011年日本化学会西日本大会（2011年11月，徳島）（特別講演）

石坂昌司：過冷却微小水滴のレーザー捕捉・顕微分光。文部科学省・科研費特定領域研究「高次系分子科学」第14回ミニ公開シンポジウム，北海道大学低温科学研究所共同利用研究集会合同研究会（2012年1月，札幌）（招待講演）

石坂昌司：光ピンセットを用いたエアロゾル微小液滴の物理化学特性の計測。フロンティアセミナー「粒径別に見るエアロゾル計測」～新研究領域および計測市場の創出を目指して～（2012年3月，東京）（招待講演）

石坂昌司：過冷却微小水滴のレーザー捕捉・顕微分光。日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2011（2011年11月，大阪）（依頼講演）

石坂昌司：光ピンセットを用いた単一エアロゾル微小水滴の分析技術。平成23年度広島地区分析技術講演会（2012年2月，東広島）（依頼講演）

豊川裕也，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：Aerosol OT/水/イソオクタン系における水溶性色素の抽出に及ぼす塩濃度の影響。日本分析化学会第60年会（2011年9月，名古屋）（一般講演）

奥野 諒，藤原照文，岡本泰明，塚原 聡：蛍光色素を用いた逆ミセルのガラス表面への吸着挙動の顕微蛍光測定。日本分析化学会第60年会（2011年9月，名古屋）（一般講演）

松田卓也，藤原照文，塚原 聡，岡本泰明：イオン液体による Rh の抽出と逆ミセル反応場のルミノールを用いたフローインジェクション化学発光法。日本分析化学会第60年会（2011年9月，名古屋）（一般講演）

橋本佑介，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面での還元反応による金コロイドの生成挙動の *in situ* 顕微測定。日本分析化学会第60年会（2011年9月，名古屋）（一般講演）

常峰裕介，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：セリウム-ローダミンB化学発光反応に対するCTAC逆ミセル効果。2011年日本化学会西日本大会（2011年11月，徳島）（一般講演）

篠森直樹，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面における蛍光プローブ分子の全内部反射-光退色後蛍光回復の顕微測定。2011年日本化学会西日本大会（2011年11月，徳島）（一般講演）

片山和也，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：水性二相系における単一DNA分子の形態および相間移動の *in situ* 顕微蛍光測定。2011年日本化学会西日本大会（2011年11月，徳島）（一般講演）

中居大貴，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：界面近傍を流れる層流の流速分布の顕微測定と解析。2011年日本化学会西日本大会（2011年11月，徳島）（一般講演）

常峰裕介，山本智之，早川不男，岡本泰明，石坂昌司，塚原 聡，藤原照文：逆ミセル反応場におけるローダミンBの酸化とフローインジェクション化学発光分析法への応用。平成23年度広島地区分析技術講演会（2012年2月，東広島）（一般講演）

山内邦裕，石坂昌司，喜多村昇：気相中におけるレーザー捕捉・顕微ラマン分光法における湿度制御に関する検討。北海道支部2011年夏季研究発表会（2011年7月，室蘭）（一般講演）

山内邦裕，石坂昌司，喜多村昇：単一エアロゾル水滴のレーザー捕捉・顕微ラマン分光法における湿度制御に関する検討。第28回エアロゾル科学技術討論会（2011年8月，大阪）（一般講演）

石坂昌司，斉藤翔太，喜多村昇：レーザー捕捉顕微分光法を用いた気相中における光誘起微小水滴発生機構に関する研究。2011年 光化学討論会（2011年9月，宮崎）（一般講演）

石坂昌司，斉藤翔太，喜多村昇：レーザー捕捉・顕微分光法を用いた空気からの光誘起微小水滴発生機構に関する検討。日本分析化学会第60年会（2011年9月，名古屋）（一般講演）

山内邦裕，石坂昌司，喜多村昇：単一エアロゾル水滴の光閉じ込め効果に基づく高感度温度計測。日本分析化学会第60年会（2011年9月，名古屋）（一般講演）

吉村 崇，伊藤亮孝，作田絵里，石坂昌司，喜多村昇，篠原 厚：塩化物イオンとピリジン型配位子によるレニウム六核錯体の発光特性および酸化還元電位のコントロール。錯体化学会第61回討論会（2011年9月，岡山）（一般講演）

中居大貴，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：界面近傍に発生させた層流の流速分布の顕微測定

と解析。第 17 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2011 年 9 月，愛媛県大洲）（ポスター発表）

奥野 諒，岡本泰明，塚原 聡，藤原照文：フルオレセインをプローブとした逆ミセルのガラス表面への吸着挙動の観測。第 17 回中国四国支部分析化学若手セミナー（2011 年 9 月，愛媛県大洲）（ポスター発表）

橋本佑介，塚原 聡，岡本泰明，藤原照文：液液界面における金コロイドの生成挙動の *in situ* 顕微測定。第17回中国四国支部分析化学若手セミナー（2011年9月，愛媛県大洲）（ポスター発表）

山内邦裕，石坂昌司，喜多村昇：硫酸アンモニウムを含む単一エアロゾル水滴のレーザー捕捉・顕微ラマン分光。2011年 光化学討論会（2011年9月，宮崎）（ポスター発表）

石坂昌司：エアロゾル微小水滴のレーザー捕捉・顕微計測法の開発と展開。第4回文部科学省「最先端の光の創成を目指したネットワーク研究拠点プログラム」シンポジウム（2011年11月，名古屋）（ポスター発表）

石坂昌司：エアロゾル微小水滴のレーザー捕捉・顕微計測法の開発と展開。日本化学会第92春季年会，JSTさきがけ研究領域合同国際シンポジウム「持続する社会を先導する光科学：環境・エネルギー・機能材料」シンポジウム（2012年3月，横浜）（ポスター発表）

金松泰範，有川康弘，馬越啓介，石坂昌司，喜多村昇：ジフェニルピラゾラトがシクロメタル化した二核白金錯体の合成と性質。錯体化学会 第61回討論会（2011年9月，岡山）（ポスター発表）

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部 4 年生	1	1
博士課程前期	5	12
博士課程後期		
博士課程前期・後期共	1	

○セミナー・講演会開催実績

藤原照文，プラズマ分光分析研究会第 83 回講演会，2011 年 10 月 14 日，広島県立産業技術交流センター第 2 研修室（広島県情報プラザ，広島），主催：プラズマ分光分析研究会

○社会活動・学外委員

・学協会役員，委員

藤原照文，日本化学会，中国四国支部西日本大会幹事（2003）

藤原照文，日本化学会，中国四国支部庶務幹事（2004）

藤原照文，日本化学会，中国四国支部事務局長（2007）

藤原照文，日本化学会，中国四国支部地区幹事（2008）

藤原照文，日本化学会，中国四国支部長（2011）

藤原照文，日本分析化学会，代議員（2011-）

藤原照文，日本分析化学会，中国四国支部庶務幹事（1989-2005）

藤原照文，日本分析化学会，中国四国支部常任幹事（2006-2009）

藤原照文，日本分析化学会，中国四国支部副支部長（2010-2011）

藤原照文，日本鉄鋼協会，評議員（2005-2006）

石坂昌司，日本化学会北海道支部庶務幹事（2011）

石坂昌司，日本分析化学会北海道支部幹事（2000-2011）

石坂昌司，日本分析化学会若手交流会全国代表幹事（2007-2009）

岡本泰明，日本分析化学会中国四国支部庶務幹事（2011-）

・高大連携事業

藤原照文，模擬授業，2005年10月，広島県立廿日市高等学校（廿日市）

石坂昌司，スーパーサイエンスハイスクール（SSH）講師（2002-2005，北海道札幌北高等学校）

石坂昌司，サイエンス・パートナーシップ・プログラム（SPP）講師（2007-2010，北海道札幌

藻岩高等学校)

石坂昌司, 平成19年度理数系教員指導力向上研修 (ティーチャーズ・サイエンスキャンプ) 講座「機器分析法の理解と実践～最先端の機器分析の体験とその原理・特徴の理解～」副講師 (2007年8月, 北海道大学)

・論文誌編集委員

藤原照文, 日本分析化学会, 「分析化学」誌編集委員 (2003-2004)

・討論会の組織委員

藤原照文, 日本分析化学会第64回分析化学討論会実行委員会委員 (2002-2003)

藤原照文, 日本分析化学会第71回分析化学討論会実行委員会委員 (2009-2010)

藤原照文, 日本化学会西日本大会実行委員会委員 (2003)

藤原照文, ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員会委員 (2004-)

藤原照文, 日本分析化学会第56年会実行委員会委員 (2006-2007)

石坂昌司, 日本分析化学会第51年会実行委員会委員 (2001-2002)

石坂昌司, 日本分析化学会第66回分析化学討論会実行委員会委員 (2004-2005)

石坂昌司, 日本分析化学会第58年会実行委員会委員 (2008-2009)

・その他の委員

藤原照文, 日本分析化学会中国四国支部第37回分析化学講習会実行委員 (2000)

藤原照文, 日本分析化学会中国四国支部第42回分析化学講習会実行委員 (2005)

藤原照文, 日本分析化学会中国四国支部第47回分析化学講習会実行委員 (2010)

石坂昌司, 日本分析化学会会誌「ぶんせき」編集委員 (2008-2009)

石坂昌司, 日本分析化学会北海道支部第18回分析化学緑陰セミナー実行委員長 (2002)

石坂昌司, 日本分析化学会北海道支部第26回分析化学緑陰セミナー実行委員長 (2010)

岡本泰明, 日本分析化学会中国四国支部第42回分析化学講習会実行委員 (2005)

岡本泰明, 日本分析化学会中国四国支部第47回分析化学講習会実行委員 (2010)

○国際共同研究・国際会議開催実績

藤原照文, The 15th International Conference of Flow Injection Analysis (ICFIA 2008) 組織委員 (2008)

石坂昌司, JSPS二国間交流事業「多核遷移金属錯体の光化学に関する日露共同研究: 化学的修飾と発光性制御」(2009-2011)

○他研究機関での講義・客員

藤原照文, 福岡大学理学部, 非常勤講師, 2011年9月14日-2012年3月31日

○研究助成の受け入れ状況

理学部学術研究助成金 (委任経理金), 三井化学株式会社, 工程管理における微量金属及び過酸化物のオンライン化学発光分析法の開発, 代表者 藤原照文

日本学術振興会科学研究費補助金 基盤研究(C), 逆ミセルを活用する金ナノ粒子-ポリアミドのナノ複合体形成と分光特性, 代表者 藤原照文

科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業「さきがけ」, エアロゾル微小水滴のレーザー捕捉・顕微計測法の開発と展開, 代表者 石坂昌司

○受賞状況 (学生)

豊川裕也 (M1), 第30回溶媒抽出討論会 (ポスター発表) 学生ポスター賞「Aerosol OT/水/イソオクタン系における水溶性色素の抽出と水相の塩濃度の関係」(2011年11月, 宮崎)

豊川裕也 (M1), 関西分析研究会平成23年度第二回例会 (口頭発表) 奨励賞「Aerosol OT/水/イソオクタン系における水溶性色素の抽出特性」(2012年1月, 堺)

○座長を行った学会・討論会の名称

藤原照文, 日本分析化学会第60年会 (2011年9月, 名古屋)

藤原照文, 平成23年度広島地区分析技術講演会 (2012年2月, 東広島)

石坂昌司，日本分析化学会第60年会（2011年9月，名古屋）
岡本泰明，平成23年度広島地区分析技術講演会（2012年2月，東広島）

構造有機化学研究グループ

スタッフ 灰野 岳晴 (教授), 池田 俊明 (助教)

○研究活動の概要

当研究グループは、分子間相互作用により形成される超分子集合体の化学を中心に研究を行っている。特に、有機化合物の三次元的な立体構造と、それらが示す様々な機能との相関を調べることを研究の基本としており、さらにその結果をもとにして、興味ある機能性分子集合体の開発を目指している。

2011 年度の研究成果の概要を以下に示す。

1. フェニルイソオキサゾリルベンゼンを基盤とした積層型らせん集合体に蛍光色素としてペリレンビスイミドを導入した系で、らせん集積に由来する円偏光発光の観測に成功した。また、フェニルイソオキサゾール部位の数によって会合定数が大きく変化することを明らかにした。
2. カリックス[5]アレーンとフラーレンのホスト-ゲスト相互作用を利用して一次元および多次元型の超分子ポリマーの構築に成功した。
3. クレフト構造をもったポルフィリン二量体が電子不足なゲスト分子とホスト-ゲスト錯体を形成するという相互作用を利用し、超分子ポリマーの構築に成功した。濃度によって低分子的な振る舞いから高分子的な振る舞いへと変化することを明らかにした。
4. カリックス[4]レゾルシンアレーン二量体の合成に成功した。また、アルコールとの水素結合によって超分子ポリマーを形成することを明らかにした。

○発表原著論文

- M. Tanaka, T. Ikeda, J. Mack, N. Kobayashi, T. Haino (2011) ©Self-Assembly and Gelation Behavior of Tris(phenylisoxazolyl)benzenes, *The Journal of Organic Chemistry*, **76**, 5082-5091.
- T. Ikeda, A. Watanabe, T. Oshita, T. Haino (2011) ©Electrochemically Switchable Supramolecular Complex between Bisporphyrin Cleft and Electron-Deficient Aromatic Guest, *Heteroatom Chemistry*, **22**, 590-593.
- H. Iwamoto, S. Nishi, T. Haino (2011) Highly shape-selective guest encapsulation in the precisely defined cavity of a calix[4]arene-capped metalloporphyrin, *Chemical Communications*, **47**, 12670-12672.
- Y. Inokuchi, O. V. Boyarkin, R. Kusaka, T. Haino, T. Ebata, T. R. Rizzo (2011) ©UV and IR Spectroscopic Studies of Cold Alkali Metal Ion-Crown Ether Complexes in the Gas Phase, *Journal of the American Chemical Society*, **133**, 12256-12263.
- R. Kusaka, S. Kokubu, Y. Inokuchi, T. Haino, T. Ebata (2011) ©Structure of host-guest complexes between dibenzo-18-crown-6 and water, ammonia, methanol, and acetylene: Evidence of molecular recognition on the complexation, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **13**, 6827-6836.
- T. Iwamoto, Y. Watanabe, T. Sadahiro, T. Haino, S. Yamago (2011) Size-Selective Encapsulation of C(60) by [10]Cycloparaphenylene: Formation of the Shortest Fullerene-Peapod, *Angewandte Chemie International Edition*, **50**, 8342-8344.
- P. Kim, T. Ikeda, J. M. Lim, J. Park, M. Lim, N. Aratani, A. Osuka, D. Kim (2011) Excited-state energy relaxation dynamics of triply linked Zn(II) porphyrin arrays, *Chemical Communications*, **47**, 4433-4435.

○総説

灰野岳晴 (2011) 分子認識により重合する超分子ポリマーの新展開, *高分子*, **60**, 437-440.

○著書

T. Haino, T. Ikeda (2011) ©Fullerene-containing Supramolecular Polymers and Dendrimers, *Supramolecular Chemistry of Fullerenes and Carbon Nanotubes*. N. Martín, J.-F. Nierengarten Eds.; Wiley-VCH, Weinheim, 173-202.

○国際会議

- T. Haino: Supramolecular Polymer Formed via Molecular Recognition. 6th Japan-Taiwan Bilateral Symposium (Aug. 2011, Hiroshima, Japan) (招待講演)
- T. Haino: Supramolecular Cross-linking of C60-grafted Polyphenylacetylene driven by Molecular Recognition. 219th ECS Meeting (May 2011, Montreal, Canada) (一般講演)
- T. Ikeda, T. Masuda, T. Hirao, T. Haino: Self-assembly and chiroptical properties of chiral tris(phenylisoxazolyl)benzene possessing perylenebisimide. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2011, Hiroshima, Japan) (一般講演)
- Y. Hirai, T. Ikeda, T. Haino: Photochromic Organogel Formed by Molecular Association of Tris(phenylisoxazolyl)benzene and Bis(pyridylethynyl)benzene. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2011, Hiroshima, Japan) (一般講演)
- T. Hirao, T. Ikeda, T. Haino: Supramolecular fullerene networks driven by molecular recognition of calix[5]arene and C₆₀. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2011, Hiroshima, Japan) (一般講演)
- Y. Ueda, T. Ikeda, T. Haino: Self-assembly of extended π -conjugated molecules based on phenylisoxazoles. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2011, Hiroshima, Japan) (一般講演)

○国内学会

- 灰野岳晴: 分子認識により自己集合する超分子ポリマー。第12回リング・チューブ超分子研究会シンポジウム (2011年11月, 大阪) (招待講演)
- 灰野岳晴: 金属配位により自己集合する超分子ホストの分子認識。第4回中国四国地区錯体化学研究会 (2011年4月, 広島) (招待講演)
- 灰野岳晴・藤井隆吏・渡邊亮英・高柳麗・平尾岳大・金城可愛志・池田俊明: クレフト型ビスポルフィリンの分子認識により形成される超分子ポリマー。第60回高分子討論会 (2011年9月, 岡山) (依頼講演)
- 灰野岳晴・貞廣達也・塩秀美・片山進・池田俊明: 金属配位により集合したカリックス[4]アレーントリプルヘリケートの分子認識。第22回基礎有機化学討論会 (2011年9月, 茨城) (一般講演)
- 池田俊明・増田哲也・平尾岳大・灰野岳晴: キラルな (フェニルイソオキサゾリル) ベンゼンによって誘起されるペリレンビスイミドのらせん集積と円偏光発光。日本化学会第92春季年会 (2012年3月, 神奈川) (一般講演)
- 平尾岳大・池田俊明・灰野岳晴: 3つのフラーレン包接部位をもつヘキサキスカリックス[5]アレーンとダンベル型フラーレンからなる拡張された超分子ネットワーク。日本化学会第92春季年会 (2012年3月, 神奈川) (一般講演)
- 上田祐子・池田俊明・灰野岳晴: π 共役平面を拡張したオリゴ(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼン誘導体の合成と自己集合。日本化学会第92春季年会 (2012年3月, 神奈川) (一般講演)
- 平井裕子・池田俊明・灰野岳晴: アゾベンゼン部位を導入したトリス(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼンの会合により誘起される光応答性超分子ゲル。日本化学会第92春季年会 (2012年3月, 神奈川) (一般講演)
- 池田俊明・増田哲也・灰野岳晴: トリス (フェニルイソオキサゾリル) ベンゼンによって誘起されるペリレンビスイミドのらせん集積と円偏光発光。第5回有機 π 電子系シンポジウム (2011年11月, 大阪) (ポスター)
- 上田祐子・田中正洋・池田俊明・灰野岳晴: 4つのフェニルイソオキサゾリルベンゼンで π 平面を拡張したジフェニルアセチレンの会合挙動。第5回有機 π 電子系シンポジウム (2011年11月, 大阪) (ポスター)
- 平井裕子・池田俊明・灰野岳晴: アゾベンゼンを導入したトリス(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼンとビス(ピリジルエチニル)ベンゼンの混合により誘起される超分子ゲル。第5回有機 π 電子系シンポジウム (2011年11月, 大阪) (ポスター)
- 平尾岳大・池田俊明・灰野岳晴: ダンベル型フラーレンとヘキサキスカリックス[5]アレーンのホスト-ゲスト相互作用による超分子ポリマーの合成。第5回有機 π 電子系シンポジウム (2011年11月, 大阪) (ポスター)

池田俊明・増田哲也・灰野岳晴：ペリレンビスイミドを導入したキラルなトリス（フェニルイソオキサゾリル）ベンゼンの自己集合と光物性。第 22 回基礎有機化学討論会（2011 年 9 月，茨城）（ポスター）

平井裕子・池田俊明・灰野岳晴：トリス(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼンとビス(ピリジルエチニル)ベンゼンの混合により誘起される超分子ゲル。第 60 回高分子討論会（2011 年 9 月，岡山）（ポスター）

増田哲也・池田俊明・灰野岳晴：ペリレンビスイミドを導入したトリス（フェニルイソキサゾリル）ベンゼンの集合挙動とらせん誘起。第 7 回ホスト-ゲスト化学シンポジウム（2011 年 5 月，広島）（ポスター）

平尾岳大・坂元克司・柏原孝基・池田俊明・灰野岳晴：ダンベル型フラーレンとテトラキスカリックス[5]アレーンのホスト-ゲスト相互作用による超分子ポリマー。第 7 回ホスト-ゲスト化学シンポジウム（2011 年 5 月，広島）（ポスター）

平井裕子・池田俊明・灰野岳晴：トリスフェニルイソオキサゾリルベンゼンとビスピリジンの自己集合により生成する超分子ゲル。第 7 回ホスト-ゲスト化学シンポジウム（2011 年 5 月，広島）（ポスター）

○学生の学会発表実績

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

○セミナー・講演会開催実績

灰野岳晴：第6回機能性ホストゲスト化学研究会サマーセミナー実行委員長（2000）

灰野岳晴：新規素材探索研究会幹事（2001－）

灰野岳晴：第18回シクロファン研究会実行委員（2003）

灰野岳晴：生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事（2004－2005）

灰野岳晴：第 17 回生体機能関連化学若手の会サマースクール実行委員長（2005）

灰野岳晴：ホスト・ゲスト化学研究会幹事（2006－）

灰野岳晴：有機合成化学協会中国四国支部幹事（2007－）

灰野岳晴：日本化学会中国四国支部庶務幹事（2008）

灰野岳晴：第 7 回ホスト-ゲスト化学シンポジウム組織委員長（2011）

灰野岳晴：日本化学会第 91 春季年会特別企画「分子配列空間の精密制御と情報変換」，企画主催者（2011）

池田俊明：日本化学会生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事（2011－）

池田俊明：第 7 回ホスト-ゲスト化学シンポジウム実行委員（2011）

池田俊明：第 23 回生体機能関連化学若手の会サマースクール実行委員（2011）

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金 基盤研究（B），特異な包接モチーフを用いた超分子らせんポリマーの構築と高度分子配列制御，灰野岳晴（代表者）

科学研究費補助金 挑戦的萌芽研究，自己修復性超分子機能性材料の開発，灰野岳晴（代表者）

中国電力技術研究財団 財団設立 20 周年記念特別助成，炭素クラスターの超分子化学を基盤とした高度ナノ分子配列制御と光電変換素子への応用，灰野岳晴（代表者）

泉 科学技術振興財団研究助成，超分子化学を基盤とした炭素ナノクラスターの高度分子配列制御と機能発現，灰野岳晴（代表者）

徳山科学技術振興財団研究助成，分子認識を基盤とするらせん超分子ポリマーの高度配列制御，池田俊明（代表者）

○受賞状況（学生）

上田祐子(M1)，The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Student Award, “Self-assembly of

extended π -conjugated molecules based on phenylisoxazoles” (2011)

○座長を行った学会・討論会の名称

灰野岳晴：The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2011, Hiroshima, Japan)

灰野岳晴：第7回ホストゲスト化学シンポジウム（2011年5月，広島）

灰野岳晴：第22回基礎有機化学討論会（2011年9月，茨城）

灰野岳晴：第12回リング・チューブ超分子研究会シンポジウム（2011年11月，大阪）

池田俊明：日本化学会第93春季年会（2012年3月，神奈川）

○その他特記事項

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

灰野岳晴：広島大学薬品管理システム専門委員会委員（2004年4月～）

灰野岳晴：広島大学図書館運営戦略会議委員（2009年4月～2012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：図書館運営戦略会議委員（2009年4月～2011年3月）

灰野岳晴：自然科学系専門部会委員長（2009年4月～2011年3月）

分子反応化学講座

反応物理化学研究グループ

スタッフ 山崎 勝義 (教授), 高口 博志 (准教授), 高橋 修 (助教)

○研究活動の概要

1. 高振動励起分子の反応素過程の研究

振動励起分子と他分子の衝突により進行する振動緩和過程と化学反応過程の速度定数の同時決定を行い、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。振動励起OH($v = 1 \sim 4$)とHeの衝突による非常に遅い緩和過程の速度定数を決定した内容を第27回化学反応討論会(東京, 6月)において発表し、高い評価を受けてベストポスター賞を受賞した。実験装置関連では、気相反応観測装置のガス供給配管の全面更新を行い、ドライポンプによる24時間排気により配管内壁に吸着した水の影響を回避することに成功した。新規な実験テーマとしてO(1D)+OCS系の反応素過程研究を立ち上げ、紫外光解離レーザーおよび紫外・可視域レーザー誘起蛍光(LIF)検出システムを利用して、同反応によりS₂の2種の電子状態($a^1\Delta_g$ および $X^3\Sigma_g^-$)が生成していることを明らかにすると同時に、同反応の総括速度定数および2電子状態の生成最高振動準位を決定した。

2. 量子状態選別した散乱実験による光解離反応とイオン・分子反応の反応ダイナミクス研究

反応ポテンシャルエネルギー曲面上の運動様式を実験的に観測して化学反応機構を解明するために、光化学反応と二分子反応を対象として、量子状態を選別した散乱実験を行っている。光化学反応系としては、異性体であるニトロメタンと亜硝酸メチルを取り上げ、いずれも紫外光解離で生成する生成物の振動・回転状態を選別して、速度・角度分布の観測を行った。振動状態によって敏感に変化する特徴的な散乱分布から、複数の解離過程が競合して、詳細な反応機構が明らかにされてこなかったニトロメタンと亜硝酸メチルの紫外光解離ダイナミクスに対して新たな反応経路を見出した。ヨウ化アリの光解離実験では、生成ヨウ素原子のスピン・軌道状態を分離して散乱分布を測定することで、それぞれが経由する反応ポテンシャルエネルギー曲面の同定を行うことができた。

3. 二重内殻光電子分光法に対する理論的研究

近年実用化してきた新しい光源であるX線自由電子レーザーの原子・分子への応用の1つとして二重内殻光電子分光法があげられる。従来の一電子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ピークが観測されることがしばしばあるが、二重内殻励起では正孔間の反発、相関緩和エネルギーの違いなどにより、より豊かな化学的情報を提供できる。本年度はSiX₄(X=H,F,Cl,CH₃)、生体分子のうち核酸塩基をターゲットとし計算を行った。

○発表原著論文

- N. Kohno, M. Izumi, H. Kohguchi, K. Yamasaki (2011) ©Acceleration of the Reaction OH + CO $\rightarrow$ H + CO₂ by Vibrational Excitation of OH. *J. Phys. Chem. A*, **115**(19), 4867–4873.
- H. Kohguchi, Y. Ogi, T. Suzuki (2011) Rovibrational state specific scattering distributions of the O(1D) + CD₄ $\rightarrow$ OD + CD₃ (v_1, v_2, N) reaction. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**(18), 8371 – 8378.
- Y. Liu, K. Alnama, J. Matsumoto, K. Nishizawa, H. Kohguchi, Y-P. Lee, T. Suzuki (2011) He(I) Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy in Supersonic Molecular Beams Using Photoelectron Imaging. *J. Phys. Chem. A*, **115**(14), 2953–2965.
- K. Tabayashi, Y. Tsutsumi, M. Chohda, O. Takahashi, Y. Tamenori, I. Higuchi, I. H. Suzuki, S. Nagaoka, T. Gejo, and K. Honma (2011) Site- and geometry-specific CH...O interaction in small acetaldehyde clusters studied with core-electron excitation spectroscopy in the carbon *K*-edge region, *J. Phys. Conf. Ser.*, **288**, 012022–11.
- K. Yasunaga, J. M. Simmie, H. J. Curran, T. Koike, O. Takahashi, Y. Kuraguchi, Y. Hidaka (2011) Detailed Chemical Kinetic Mechanisms of Ethyl Methyl, Methyl *tert*-Butyl and Ethyl *tert*-Butyl Ethers: The Importance of Unimolecular Elimination Reactions, *Comb. Flame*, **158**, 1032–1036.
- P. Linusson, O. Takahashi, K. Ueda, J. H. D. Eland, R. Feifel (2011) Structure sensitivity of double inner-shell holes in sulfur-containing molecules, *Phys. Rev. A*, **83**, 022506–4.

- I. H. Suzuki, Y. Kono, A. Ikeda, T. Ouchi, K. Ueda, O. Takahashi, I. Higuchi, Y. Tamenori, and S. Nagaoka (2011) Disentanglement of photoexcited orbitals to resonant Auger final states in Si *KLL* decays of Si(CH₃)₄ and SiF₄, *J. Chem. Phys.*, **134**, 084312-7.
- O. Takahashi, M. Tashiro, M. Ehara, K. Yamasaki, K. Ueda (2011) ©Theoretical spectroscopy on K^{-2} , $K^{-1}L^{-1}$, and L^{-2} double core hole states of SiX₄ (X=H, F, Cl, and CH₃) molecules, *Chem. Phys.*, **384**, 28-35.
- S.-i., Nagaoka, H. Fukuzawa, G. Prumper, M. Takemoto, O. Takahashi, K. Yamaguchi, T. Kakiuchi, K. Tabayashi, I. Suzuki, J. Harries, Y. Tamenori, K. Ueda (2011) A Study to Control Chemical Reactions Using Si:2*p* Core Ionization – Site-Specific Fragmentation –, *J. Phys. Chem. A*, **115**(32), 8822-8831.
- O. Takahashi, M. Tashiro, M. Ehara, K. Yamasaki, K. Ueda (2011) ©Molecular double core hole electron spectroscopy of nucleobases, *J. Phys. Chem. A*, **115**(44), 12070-12082.
- O. Takahashi, K. Yamasaki, S.-i. Nagaoka, K. Ueda (2011) ©Molecular double core-hole electron spectroscopy of large molecules for probing molecular size: A series of bridged trihalosilyl-trimethylsilyl molecules, *Chem. Phys. Lett.*, **518**(1-3), 44-48.

○国際会議

- H. Kohguchi : Photodissociation Dynamics of Nitro-Compound. The 14th Asian Conference of Chemistry (Sep. 2011, Bangkok, Thailand) (招待講演)

○国内学会

- 高口博志 : 反跳速度測定によるニトロ化合物の微量分析と光解離ダイナミクス。日本化学会西日本大会2011 (2011年11月, 徳島) (依頼講演)
- T. Hanada, M. Sumida, K. Yamasaki, H. Kohguchi : Spin-orbit Branching in Photodissociation of Allyl Iodide at 266 nm and 213 nm. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011年12月, 東広島) (一般講演)
- 山下 潤, 河野七瀬, 高口博志, 山崎勝義 : Rate Coefficients for Vibrational Relaxation of OH(X²Π, v = 0 - 4) by He and Nascent Vibrational Energy Distributions of OH Generated in O(¹D) + H₂ Reaction. 第27回化学反応討論会 (2011年6月, 東京) (ポスター)
- 高下慶典, 花田拓也, 住田聖太, 山崎勝義, 高口博志 : Elucidation of Three-body Dissociation Mechanism of Nitromethane by UV Absorption. 第27回化学反応討論会 (2011年6月, 東京) (ポスター)
- 高下慶典, 花田拓也, 住田聖太, 山崎勝義, 高口博志 : 対生成物の状態間相関測定によるニトロメタンの紫外光解離機構の解明。第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌) (ポスター)
- 大久保泰裕, 高橋修, 山崎勝義 : ©Theoretical Calculations of Vibrational Relaxation in O₂+N₂ System. 第27回化学反応討論会 (2011年6月, 東京) (ポスター)
- 吉田綾香, 新井秀実, 堀川裕加, 徳島高, 高橋修, 大浦昌樹, 下條竜夫, 本間健二, 辛埴 : Soft X-ray emission spectra of carbonate ions in aqueous solution of alkali carbonates. 第27回化学反応討論会 (2011年6月, 東京) (ポスター)
- 高橋修, 田代基慶, 江原正博, 山崎勝義, 上田 潔 : 生体分子に対するX線二重内殻正孔分光理論計算。第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌) (ポスター)
- 谷哲龍, 高橋修, 山崎勝義 : アンモニアの光刺激脱離反応に関する理論的研究。第25回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2012年1月, 鳥栖) (ポスター)
- 國武尚登, 木元麻衣, 高橋修, 山崎勝義 : 軟X線分光法に対する理論計算手法の開発。第25回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2012年1月, 鳥栖) (ポスター)

○学生の学会発表実績

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

○セミナー・講演会開催実績

- ・組織委員，実行委員
高口博志，2011年第19回原子衝突セミナー，実行委員長
高口博志，2011年第5回分子科学会シンポジウム，世話人

○社会活動・学外委員（過去5年以内）

- ・学協会役員
山崎勝義，日本化学会中国四国支部会計幹事（2008）
山崎勝義，日本化学会中国四国支部事務局長（2009）
山崎勝義，日本化学会第8回化学イノベーションシンポジウム準備委員会事務局長（2009）
山崎勝義，日本化学会物理化学ディビジョン幹事（2010）
山崎勝義，日本化学会代議員（2011～2012）
山崎勝義，日本分光学会代議員（2004，2006-）
山崎勝義，日本分光学会支部監査（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，日本化学会中国四国支部庶務幹事（2010）
高口博志，原子衝突研究協会行事委員（2004-2007）
高口博志，原子衝突研究協会運営委員（2008-）
高口博志，原子衝突研究協会幹事（行事委員長）（2009-2011）
高口博志，分子科学会企画委員（2010-2011）
- ・講習会・セミナー講師
山崎勝義，広島大学理工フェア「サイエンス（＝科学＝理学）の魅力と楽しみ方」（2007年5月，福山商工会議所）
山崎勝義，日本化学会実力養成化学スクール「化学反応論・遷移状態理論」（2007年8月，日本化学会）
山崎勝義，広島大学図書館学術講演会「単行書の公開と機関リポジトリへの期待」（2007年10月，広島大学図書館）
山崎勝義，中四国6大学による第1回理系大学教育に関する研究フォーラム「協調演習による理学的知力の育成支援」（2007年12月，高知大学総合研究棟）
山崎勝義，図書館における学習環境提供に関する懇談会「協調演習による理学的知力の育成支援」（2008年2月，広島大学図書館）
山崎勝義，日本化学会実力養成化学スクール「化学反応論・遷移状態理論」（2008年8月，日本化学会）
山崎勝義，科学研究費補助金説明会「科学研究費補助金に採択されるためには，どのように研究計画調書を書けばよいか」（2009年9月，広島大学）
山崎勝義，東北大学理学部化学教室 一般雑誌会「振動励起分子のエネルギー移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，神戸大学大学院理学研究科 講演会「振動励起分子のエネルギー移動と化学反応の速度論的研究」（2010年12月，神戸大学）
山崎勝義，サイエンスカフェ「化学反応の謎に迫る！」（2011年3月，広島大学）
高口博志，上智大学理工学部物理学科コロキウム「開殻系原子分子の衝突過程と化学反応」（2007年5月，上智大学）
高口博志，第4回原子・分子・光科学（AMO）討論会ディスカッションリーダー（2007年5月，

電気通信大学)

高口博志, 分子科学若手の会夏の学校講師「ラジカル分子の反応と分光の基礎」(2007年8月, 長良川会館)

高橋修, 情報メディア教育研究センター&INSAM共同企画: ハイパフォーマンスコンピューティングセミナー「数値シミュレーション技法基礎セミナー」(2007年9月, 広島大学情報メディア教育研究センター)

・高大連携事業(出張講義等)

山崎勝義, 大学模擬講義「分子に光をあてると化学結合の長さや強さがわかる」(2008年7月, 広島県立広島皆実高等学校)

山崎勝義, 大学模擬講義「サイエンス(=科学=理学)の魅力と楽しみ方」(2010年11月, 鳥取県立鳥取東高等学校)

山崎勝義, 大学模擬講義「分子はコマのように回りバネのように伸び縮みする」(2011年7月, 広島県立広島皆実高等学校)

山崎勝義, 大学模擬講義「サイエンス(=科学=理学)の魅力と楽しみ方」(2011年10月, 鳥取県立鳥取東高等学校)

山崎勝義, 大学模擬講義「サイエンス=科学=理学の楽しみ方と物理化学研究の最前線」(2011年11月, 広島大学附属中高等学校)

・討論会の組織委員

山崎勝義, 第26回化学反応討論会実行委員会委員長(2009-2010)

高口博志, 第14回理論化学シンポジウム実行委員会委員(2007)

高口博志, 第26回化学反応討論会実行委員会委員(2009-2010)

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

高口博志, 原子衝突研究協会第36回年会実行委員会委員長(2010-2011)

高口博志, 分子科学会企画委員分子科学会シンポジウム担当(2010-2011)

高橋修, 第26回化学反応討論会実行委員会委員(2009-2010)

・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-)

○研究助成の受け入れ

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

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

第24回松尾学術研究助成, 全自由度制御した反応性散乱法の開発と多原子イオン・分子反応機構の解明, 研究代表者 高口博志

科学研究費補助金 基盤研究(C), 生体分子系に対する軟エックス線分光理論計算, 研究代表者 高橋修

物質・デバイス領域共同研究課題, 二重内殻光電子分光法の確立, 研究代表者 高橋修

○受賞状況(学生)

山下 潤, ベストポスター賞, 第27回化学反応討論会(2011年6月, 東京)

高下慶典, 優秀ポスター賞, 第5回分子科学会(2011年9月, 札幌)

○座長を行った学会・討論会の名称

山崎勝義, 第27回化学反応討論会, 東京, 2011年6月

高口博志, 第27回化学反応討論会, 東京, 2011年6月

高口博志，第5回分子科学会2011，札幌，2011年9月

○その他の特記事項

広島大学学術情報リポジトリ広報誌「HiRニュースレター」(2011年5月号)に「第3回 研究室訪問」の記事として本研究グループが紹介された。

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

ポルフィリンの酸化体である 16π 化合物を新しく合成し, その構造の平面性と反芳香族性に比例関係があることを見いだした。(山本)

ケイ素原子上の水素原子とホウ素原子上のアリール基の交換反応を見出した。この反応機構を量子化学計算により明らかにした。さらに分子内芳香族 C-H ボリル化による新規なジベンゾシラボリンの合成を達成した。(河内)

ヒドラジンを置換基にもつ新規アンチアピコフィリックホスホランの合成と性質を明らかにした。また, 形式的には求核的である不斉フラン合成反応において, 生成物の立体化学を決定することができ, 不斉誘起の機構を考察することができた。(小島)

○発表原著論文

- R. Takagi, N. Igata, K. Yamamoto, S. Kojima (2011) © Zirconium-Catalyzed Chemoselective Methylalumination of Ethers, Amines, and Sulfides Bearing Two Terminal Alkenyl Groups, *J. Organomet. Chem.*, **696**, 1556-1564.
- S. Sugawara, M. Kodama, Y. Hirata, S. Kojima, Y. Yamamoto (2011) © Synthesis and Characterization of the Most Distorted 16π porphyrin: 16π Octaisopropyltetraphenylporphyrin (OiPTPP), *J. Porph. Phthalocyanines*, **15**(11-12), 1326-1334.
- S. Fuku-en, T. Yamaguchi, S. Kojima, Y. Yamamoto (2011) © Generation of Triplet Carbenes by Oxidation of an Allene Compound, *Journal of Physical Organic Chemistry*, **24**(10), 1009-1017. (Special issue for Pacificchem 2010 Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules)
- A. Kawachi, S. Nagae, Y. Onoue, O. Harada, Y. Yamamoto (2011) © Ortho Magnesiation of Boron-substituted Benzenes by Using $(\text{TMP})_2\text{Mg}$, *Chemistry - A European Journal*, **17**(29), 8005-8008.
- T. Kakui, S. Sugawara, Y. Hirata, S. Kojima, Y. Yamamoto (2011) © Anti-aromatic 16π Porphyrin Metal Complexes with meso-Alkyl Substituents, *Chemistry - A European Journal*, **17**(28), 7768-7771.
- Y. Yamamoto, A. Ishii (2011) A Tribute to Professor Kin-ya Akiba on the Occasion of His 75th Birthday, *Heteroatom Chemistry*, **22**(3/4), 205-206 (dedicated to Professor Kin-ya Akiba).
- S. Kojima, M. Nakamoto, S. Matsukawa, K.-y. Akiba (2011) Stereomutation of a Diastereomeric Pair of 10-P-5 Hydroxyphosphoranes, *Heteroatom Chemistry*, **22**(3/4), 491-499 (dedicated to Professor Kin- ya Akiba)
- Y. Yamamoto, K. Nakao, T. Hashimoto, S. Matsukawa, N. Suzukawa, S. Kojima, K.-y. Akiba, (2011) © Crystallographic and NMR Studies on Species Intermediate between Haloalkoxyphosphoranes and Haloalkoxyphosphonium Halides, *Heteroatom Chemistry*, **22**(3/4), 523-530 (dedicated to Professor Kin- ya Akiba.)
- H. Yamamichi, S. Matsukawa, S. Kojima, K. Ando, Y. Yamamoto (2011) © Structure and Dynamic Behavior of Neutral Hexacoordinate Antimony Compounds with Intramolecular Coordination, *Heteroatom Chemistry*, **22**(3/4), 553-561 (dedicated to Professor Kin- ya Akiba.)
- A. Kawachi, H. Morisaki, A. Tani, M. Zaima, Y. Yamamoto (2011) © Reaction of $o\text{-(HSiR}_2\text{)}(\text{BMes}_2)\text{C}_6\text{H}_4$ with a Fluoride Ion: Fluoride Attack at Silicon and Hydride Transfer from Silicon to Boron to Form F-Si $\cdots$ H-B Interaction, *Heteroatom Chemistry*, **22**(3/4), 471-475 (dedicated to Professor Kin- ya Akiba.)
- Y. Hirano, S. Kojima, Y. Yamamoto (2011) © A Hypervalent Pentacoordinate Boron Compound with an N-B-N Three- Center Four-Electron Bond, *The Journal of Organic Chemistry*, **76**(7), 2123-2131.

○著書

宮浦憲夫・鈴木寛治・小澤文幸・山本陽介・永島英夫編 (2011) 高配位典型元素化合物の化学: 構造と安定性現代化学増刊 44: 有機金属化学の最前線—多様な元素を使いこなす— (東京化学同人) 3 章 p37-48

○国際会議

- Y. Yamamoto: Synthesis and Properties of 16 π -Electron Porphyrins, 14th Asian Chemical Congress 2011 (14 ACC), Sep. 2011, Bangkok, Thailand (招待講演)
- Y. Yamamoto: 16 π -Electron Porphyrins, The 6th Japan-Taiwan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules, Aug. 2011, Higashi-Hiroshima (招待講演)
- A. Kawachi, H. Morisaki, Y. Yamamoto: H-Ar Ligand Exchange between Silicon and Boron in *o*-(Hydrosilyl)(diarylboryl)benzenes and Subsequent Intramolecular Cyclization: Formation of Dibenzosilaborins, 16th International Symposium on Silicon Chemistry, Aug. 2011, Hamilton, Canada (一般講演)
- A. Kawachi, O. Harada, S. Nagae, Y. Yamamoto: Ortho Magnesiation of Boron-substituted Benzenes Using (TMP)₂Mg, 1st International Symposium on Molecular Activation, Nov. 2011, Awaji, Japan (ポスター)
- Y. Yamamoto: Synthesis and Properties of 16 π -electron Porphyrins, 14th Asian Chemical Congress 2011 (14 ACC), Sep. 2011, Bangkok, Thailand (ポスター)
- S. Kojima, A. Iwamoto, Y. Sashihara, A. Katori, Y. Yamamoto: A Mild Synthesis of Furans Bearing a Chiral Quaternary Carbon Substituent at the 2-position. 42nd National Organic Chemistry Symposium, Jun. 2011, Princeton, New Jersey, USA (ポスター)
- S. Fuku-en: Attempted Synthesis of Stable Triplet Carbenes, MDF International Workshop: Open-shell Organic Molecules — Synthesis and Electronic Structure Freedom — Oct. 2011, Osaka (ポスター)
- T. Inoue, Y. Yamamoto: Synthesis of a Novel Tridentate Ligand System Bearing a Benzene Ring Condensed with Two Seven Membered Rings and Its Application, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium. Dec. 2011, Higashi-Hiroshima (ポスター)

○国内学会

- 山本陽介: 超原子価 5 配位及び 6 配位炭素・ホウ素化合物の合成とその後の展開, 第 37 回反応と合成の進歩シンポジウム, 2011 年 11 月, 徳島市 (特別講演)
- 河内 敦: 新学術領域研究「直截の物質変換をめざした分子活性化法の開発」第 1 回全体会議, 2011 年 5 月, 大阪大学中之島センター (大阪府大阪市) (一般講演)
- 福圓真一: 安定な三重項カルベンの合成検討, 第 46 回有機反応若手の会, 2011 年 7 月, 群馬県水上 (一般講演)
- 福圓真一, 山口虎彦, 山本陽介: 安定な三重項カルベンの合成検討, 第 22 回基礎有機化学討論会, 2011 年 9 月, つくば (一般講演)
- 菅原 峻, 小玉めぐみ, 平田祐介, 小島聡志, 山本陽介: ジイソプロピロール及び立体的に高度に歪んだ 16 π ポルフィリンの合成, 第 41 回複素環化学討論会, 2011 年 10 月, 熊本市 (一般講演)
- 河内 敦: 分子内反応による反応活性種の生成を鍵段階とするホウ素置換芳香族化合物の合成, 新学術領域研究「分子活性化」第 2 回公開シンポジウム, 2011 年 11 月, 京都大学桂キャンパス (京都府京都市) (一般講演)
- 戸屋裕也・小島聡志・山本陽介: ヒドラジンおよびジアゼンを導入したアンチアピコフィリックホスホランの性質, 第 38 回有機典型元素化学討論会, 2011 年 12 月, 金沢 (一般講演)
- 廣藤龍哉・河内 敦・山本陽介: ケイ素官能性ジベンゾシラボリンの合成, 構造および反応, 日本化学会第 92 春季年会, 2012 年 3 月, 横浜 (一般講演)
- 植木幸広・河内 敦・山本陽介: 分子内 B-H/C-H 脱水素化による含ホウ素環状化合物の合成, 日本化学会第 92 春季年会, 2012 年 3 月, 横浜 (一般講演)
- 香取亜希・指原慶彰・小島聡志・山本陽介: 2-フラニル基を有する不斉炭素の構築の検討, 日本化学会第 92 春季年会, 2012 年 3 月, 横浜 (一般講演)
- 南出 秀・鎌田賢司・太田浩二・伊藤聡一・米田京平・岸亮平・中野雅由・福圓真一・山本陽介: テトラ (フェニルアクリジン) 分子の電子構造と二光子吸収特性についての研究, 日本化学会第 92 春季年会, 2012 年 3 月, 横浜 (一般講演)
- 田中友紀也: *o*-(フルオロシリル)フェニルリチウムと 14 属 2 価化学種との反応, 第 46 回有機反応若手の会, 2011 年 7 月, 群馬県水上 (ポスター)

戸屋裕也： Martin Ligand を有する 6 配位リン化合物の研究 2011 年 7 月，第 46 回有機反応若手の会，2011 年 7 月，群馬県水上（ポスター）

西岡徳真： 新規な 14 属元素化合物の合成を目的としたアニオン種の合成および反応研究，第 46 回有機反応若手の会，2011 年 7 月，群馬県水上（ポスター）

乗松祐輝： 分子内配位子としてのホスホニウムイリドを有する高配位ケイ素化合物の合成研究 ポスター，第 46 回有機反応若手の会，2011 年 7 月，群馬県水上（ポスター）

福圓真一： アレン化合物の二電子酸化による三重項カルベンの合成検討と一重項ビラジカル研究への展開，第 43 回構造有機若手の会，2011 年 8 月，竹原市大久野島（ポスター）

菅原 峻・角井隆功・山本陽介： メソ位アルキル置換 16 π ポルフィリンの構造と反芳香族性評価，第 43 回構造有機若手の会，2011 年 8 月，竹原市大久野島（ポスター）

井上達也： 7 員環を二つ縮環した新規ベンゼン誘導体骨格を有する配位子の合成とその応用，第 43 回構造有機若手の会，2011 年 8 月，竹原市大久野島（ポスター）

河内 敦・森崎 宏・山本陽介： ケイ素原子とホウ素原子との間の水素-アリアル基交換反応についての理論的研究，第 58 回 有機金属化学討論会，2011 年 9 月，名古屋（ポスター）

今田康公・山道秀映・諏沢宏・松川史郎・小島聡志・山本陽介： 超原子価 5 配位アンチモン化合物の Turnstile Rotation による異性化機構の研究，第 27 回若手研究者のための化学道場，2011 年 9 月，高知県吾川郡（ポスター）

井上達也： 7 員環を 2 つ縮環した新規ベンゼン誘導体骨格を有する配位子の合成とその応用，第 27 回若手研究者のための化学道場，2011 年 9 月，高知県吾川郡（ポスター）

戸屋裕也・姜 新東・小島聡志・山本陽介： Martin-Ligand または拡張 Martin-Ligand を有する 6 配位リン化合物の立体異性体，第 22 回基礎有機化学討論会，2011 年 9 月，つくば(ポスター)

菅原 峻・平松尚悟・角井隆功・平田祐介・小島聡志・山本陽介・John Mack・小林 長夫・Zhen Fu・Karl M. Kadish・Young Mo Sung・Kil Suk Kim・Dongho Kim： 反芳香族性 16 π ポルフィリンの構造と電子的性質，第 22 回基礎有機化学討論会，2011 年 9 月，つくば(ポスター)

菅原 峻・小島聡志・山本陽介： 新規なカルベン配位子と金属錯体の合成，第 38 回有機典型元素化学討論会，2011 年 12 月，金沢（ポスター）

今田康公・山道秀映・諏沢 宏・松川史郎・山本陽介・安藤香織： 強固な三座配位子と二座配位子を有する超原子価 5 配位アンチモン化合物の Turnstile Rotation による異性化機構の研究，第 38 回有機典型元素化学討論会，2011 年 12 月，金沢（ポスター）

○学生の学会発表実績

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

○セミナー・講演会開催実績

山本 陽介，K.M. Pietrusiewicz 教授 講演会

日時：平成 23 年 7 月 6 日（水）15:00-

場所：理学部 E002 号室

講師：K.M. Pietrusiewicz（Marla Curie-Sklodowska University）

演題：Olefin metathesis as a new tool in the synthesis of chiral phosphine ligands

山本 陽介，Derek P. Gates 教授講演会

日時：平成 23 年 11 月 11 日（金）16:30-

場所：理学部 B301 号室

講師：Derek P. Gates（University of British Columbia）

演題：Applications of P=C Bonds in Polymer Science and Catalysis

山本 陽介，Shih-Yuan Liu 先生講演会

日時：平成 23 年 12 月 15 日(木)15:00-

場所：理学部 E002 号室

講師：Shih-Yuan Liu (University of Oregon)

演題：Developing The Basic Science and Applications of Boron(B)-Nitrogen(N) Containing Heterocycles

山本 陽介，第 34 回有機合成化学協会中国四国支部奨励賞受賞講演並びに特別招待講演会（構造有機化学研究グループと共同で開催）

日時：平成 23 年 11 月 19 日(土) 13:40

場所：理学部 E002 号室

講師：大山 陽介（広島大学大学院工学研究院）

演題：機能性色素のオプトエレクトロニクスデバイスへの新展開

講師：山元 公寿（東京工業大学資源化学研究所）

演題：Metallochemistry の創成に向けて：分子リアクターを利用した精密無機金属合成

○社会活動・学外委員

- ・学協会委員，講習会・セミナー講師，外部評価委員など記載ください。

山本陽介，第 22 期日本学術会議連携会員（2011～）

小島聡志，有機合成化学協会中国四国支部事務局（2003～）

河内 敦，ケイ素化学協会理事（2008～）

- ・外部評価委員

山本陽介，IUPAC Commission II-2, National Representative（2002～2010）

- ・講習会・セミナー講師

山本 陽介，2011 年 11 月，大塚製薬「16 π ポルフィリンの合成とその性質」（徳島市）

- ・高大連携事業

山本 陽介，2011 年 12 月，広島県立呉昭和高校，模擬授業

山本 陽介，2011 年 7 月，広島大学附属高等学校 SSH 事業

- ・論文誌編集委員

山本 陽介，Journal of Physical Organic Chemistry, Editorial Board（2005-）

- ・その他の委員

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

山本 陽介，中国四国・化学と工業懇話会常任運営委員（2007-）

○国際共同研究・国際会議開催実績

山本 陽介，10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) 国内組織委員（2011）

○共同プロジェクトへの参加状況（国内）

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

○他研究機関での講義・客員

山本 陽介，大阪大学産業科学研究所，非常勤講師，2011 年 5 月 27 日

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金基盤研究(B)，スフェランドの新規誘導体合成を基盤とする新規超原子価アール錯体合成への応用，代表者 山本 陽介

科学研究費補助金基盤研究(C)，14 族元素を含む新規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

科学研究費補助金新学術領域「直截的物質変換をめざした分子活性化法の開発」（公募班）分子

内反応を鍵段階とするホウ素置換芳香族化合物のオルトメタル化反応の開発と応用, 代表者 河内 敦
徳山科学技術振興財団研究助成, 新規典型元素 π 電子系としてのジベンゾシラボリンの合成, 光物性および応用, 代表者 河内 敦
日本学術振興会特別研究員 (DC1) 安定な三重項カルベンの合成, 福圓真一 (D1)

○受賞状況 (学生)

菅原 峻 (M2), 第 22 回基礎有機化学討論会 ポスター賞「反芳香族性 16π ポルフィリンの構造と電子的性質」(2011)
菅原 峻 (M2), 第 38 回有機典型元素化学討論会 優秀ポスター賞「新規なカルベン配位子と金属錯体の合成」(2011)
井上 達也 (M1), The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Student Award “Synthesis of a Novel Tridentate Ligand System Bearing a Benzene Ring Condensed with Two Seven Membered Rings and Its Application” (2011)

○座長を行った学会・討論会の名称

山本陽介, 第 22 回基礎有機化学討論会 (2011 年 9 月, つくば)
山本陽介, 第 38 回有機典型元素化学討論会 (2011 年 12 月, 金沢)
河内 敦, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011 年 12 月, 東広島)
小島聡志, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011 年 12 月, 東広島)
河内 敦, 日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜)
小島聡志, 日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜)

○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 (2007-2010)
山本 陽介, 広島大学研究設備サポート推進会議委員 (2011.3-)
山本 陽介, 広島大学研究設備サポート推進会議専門部会委員 (2011.3-)
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海外派遣プログラム主担当研究者 (理工農系: サステナブル社会の実現に貢献する自然科学系国際的若手研究者の育成プログラム) (2010.2-)
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)
小島 聡志, 入試科目検討ワーキンググループ委員 (2011)
福圓真一 (D1), 日本学術振興会主催第 4 回 HOPE ミーティングに参加し, ノーベル賞受賞者や著名研究者の講演やディスカッションに参加したほか, “Synthesis of Stable Triplet Carbenes” というタイトルでポスター発表を行った (2012.3.7-11)

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 (准教授), 高木 隆吉 (助教), 岩倉 いずみ (助教)

○研究活動の概要

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

反応性中間体の反応挙動精査に関しては、アゾ化合物の脱窒素反応の機構に関する研究を実施して、熱的には段階的に脱窒素反応が進行することを見出した。また、一重項 1,3-ビラジカルの反応性に及ぼす顕著な 2 位のケイ素原子効果と 2 位上のアルコキシ基の特異な効果を見出した。

1,4-ビラジカルの化学では、その中間体を經由して生じるオキセタン環形成における立体選択性発現機構解明に関する大きな情報を得た。さらに、ビラジカルのスピン多重度制御に基づくテトララジカルのスピン整列にも挑戦し、ビラジカルのスピン整列で得られた知見が応用できることを見出した。また、光解離性ケージド化合物の設計と合成を行っている。

隣接したスルホンイミド基を有するビナフチル誘導体を創製し、アルケニルアミン誘導体の分子内ヒドロアミノ化反応の触媒として働くことを見いだした。

○発表原著論文

R. Takagi, N. Igata, K. Yamamoto, S. Kojima (2011) © Zirconium-catalyzed chemoselective methylalumination of ethers, amines, and sulfides bearing two terminal alkenyl groups, *J. Organomet. Chem.*, **696**, 1556–1564.

S. Yagi, Y. Hiraga, R. Takagi, M. Abe (2011) © Stereochemical Deuterium Labeling Study on the Denitrogenation of 7,7-Diethoxy-2,3-diazabicyclo[2.2.1]hept-2-ene, *J. Phys. Org. Chem.*, **24**, 894–901.

K. Hisamoto, Y. Hiraga, M. Abe (2011) © Hydroxy-group effect on the regioselectivity in a photochemical oxetane formation reaction (the Paternò-Büchi Reaction) of geraniol derivatives, *Photochem. Photobiol. Sci.*, **10**, 1469–1473.

Y. Hiraga, T. Widinti, T. Kunishi, M. Abe (2011) © The cooperative effect of a hydroxyl and carboxyl group on the catalytic ability of novel beta-homoproline derivatives on direct asymmetric aldol reactions, *Tetrahedron Asym.*, **22**, 226–237.

J. Arimura, T. Mizuta, Y. Hiraga, M. Abe (2011) © Formation of Macrocyclic Lactones in the Paternò-Büchi Dimerization Reaction, *Beilstein J. Org. Chem.*, **7**, 265–269.

Y. Yabuno, Y. Hiraga, R. Takagi, M. Abe (2011) © Concentration and Temperature Dependency of Regio- and Stereoselectivity in a Photochemical [2+2] Cycloaddition Reaction (the Paternò-Büchi Reaction): Origin of the Hydroxy-group Directivity, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 2592–2604.

○国際会議

M. Abe: Substitute Effect on the Reactivity of Triplet Excited State of Cyclic Azoalkanes: α -CN Cleavage versus β -CC cleavage reaction. XXV International Conference on Photochemistry ICP 2011 (August, 2011, Beijing, China) (一般講演)

M. Abe: Spin Alignment in Tetraradicals, Based on the Spin Control of Localized Biradicals. The 6th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules (August, 2011, Hiroshima, Japan) (招待講演)

M. Abe: Interplay Between Computations and Experiments: A Case Study in Biradicals. Applied Theory On Molecular Systems (ATOMS2011) (November, 2011, Hyderabad, India) (招待講演)

M. Abe: Generation of Long-lived Singlet Biradicals and Its Application to the Spin Alignment of Tetraradicals. 3rd International Symposium on Emergence of Highly Elaborated π -Space and Its Function (November, 2011, Ibaragi, Japan) (ポスター)

S. Watanabe, M. Abe: Substituent Effect on the Reactivity of Triplet Excited State of Cyclic Azoalkanes: α -CN Cleavage versus β -CC Cleavage Reaction. The 13th European Symposium on Organic Reactivity (ESOR) (September, 2011, Tartu, Estonia) (ポスター)

M. Mishima, M. Abe: Heteroatom Effect on the Reactivity of Localized Singlet Biradicals. The 13th European Symposium on Organic Reactivity (ESOR) (September, 2011, Tartu, Estonia) (一般講

演)

- S. Watanabe, M. Abe: Substituent Effect on the Reactivity of Triplet Excited State of Cyclic Azoalkanes: α -CN Cleavage versus β -CC cleavage reaction. Korean-Japan Symposium on Frontier Photoscience (KJFP2011) (October, 2011, Seoul Korea) (招待講演)
- J. Ye, M. Abe: Kinetic Stabilization of Singlet 2,2-Dialkoxycyclopentane-1,3-diyls. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (December, 2011, Hiroshima, Japan) (ポスター)

○国内学会

- 田村大志, 安倍 学: 三重項励起状態アゾ化合物の反応挙動に及ぼす置換基効果。2011 年光化学討論会 (2011 年 9 月, 宮崎市) (ポスター)
- 坂本勇哉, 安倍 学: 拡張型クマリン骨格を有する新規光解離性保護基の合成とその光反応性。2011 年光化学討論会 (2011 年 9 月, 宮崎市) (ポスター)
- 伊藤晋平, 安倍 学: 二光子吸収能に及ぼす構造および置換基効果に関する計算化学的研究。2011 年光化学討論会 (2011 年 9 月, 宮崎市) (ポスター)
- 中垣知幸, 安倍 学: π 単結合性を持つ局在化一重項ビラジカルの寿命に及ぼす置換基効果。第 22 回基礎有機化学討論会 (2011 年 9 月, つくば市) (一般講演)
- 渡辺新治, 安倍 学: 三重項環状アゾ化合物の反応性に及ぼす置換基効果。第 22 回基礎有機化学討論会 (2011 年 9 月, つくば市) (ポスター)
- 尾下隆英一, 安倍 学: 重項 2,2-ジメトキシ-1,3-ビラジカルの反応挙動に及ぼす 1,3 位のアリール基の効果。第 22 回基礎有機化学討論会 (2011 年 9 月, つくば市) (ポスター)
- 三島 愛, 安倍 学: 局在化一重項ビラジカルの反応性に及ぼす窒素原子効果と置換基効果。第 22 回基礎有機化学討論会 (2011 年 9 月, つくば市) (ポスター)
- 岡本一茂, 安倍 学: シクロペンタン-1,3-ビラジカルのスピン制御に基づくテトララジカルのスピン整列。第 22 回基礎有機化学討論会 (2011 年 9 月, つくば市) (ポスター)
- 中垣知幸, 安倍 学: π 単結合性を持つ局在化一重項ビラジカルの寿命に及ぼす置換基効果。2011 年日本化学会西日本大会 (2011 年 11 月, 徳島市) (一般講演)
- 安倍 学: π 単結合性を持つ局在化一重項ビラジカルの寿命に及ぼす置換基効果。第 7 回公開シンポジウム 高次 π 空間の創発と機能開発 (2012 年 3 月, 松山市) (ポスター)
- 坂井 雄一郎, 安倍 学: 強酸性部位が隣接したブレンステッド酸の創製と分子内ヒドロアミノ化反応への応用。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 元石流生, 安倍 学: 2 光子吸収能に優れた光解離性保護基の合成。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 坂本勇哉, 安倍 学: 拡張型クマリン骨格を有する新規光解離性保護基の合成とその光反応性。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 叶 建准, 安倍 学: 一重項 1,3-ビラジカルの速度論的安定化。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 古永遥香, 安倍 学: ストレッチ効果を利用したマルチラジカルの長寿命化。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 岡本一茂, 安倍 学: シクロペンタン-1,3-ビラジカルのスピン制御に基づくテトララジカルのスピン整列。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 藤井良美, 安倍 学: フルフリルアルコール誘導体の Paterno-Buechi 反応。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 渡辺新治, 安倍 学: 三重項状態環状アゾ化合物の反応性に及ぼす置換基効果。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 森川慶樹, 安倍 学: 異常な電子配置を持つビラジカルの化学的性質。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 重川泰之, 安倍 学: バタフライフラップ型運動によるスピンスイッチ反応。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)
- 三島 愛, 安倍 学: 一重項ビラジカルの反応性に及ぼす窒素原子の効果。日本化学会第 92 春季年会 (2012 年 3 月, 横浜市) (ポスター)

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部 4 年生	0	5
博士課程前期	7	13
博士課程後期	0	1
博士課程前期・後期共	0	

○セミナー・講演会開催実績

安倍 学, Professor Armido Studer 講演会

日時：平成 23 年 9 月 30 日（金）16：30～18：00

会場：広島大学理学部 B-301 教室

演題：Oxidative C-C-bond forming reactions – with and without transition metals

安倍 学, Professor G. Narahari Sastry 講演会

日時：平成 24 年 2 月 2 日（木），16：30～18：00

会場：広島大学理学部 B-603 教室

演題：Cooperativity of non-bonded interaction

安倍 学, Professor Ken Laali 講演会

日時：平成 24 年 3 月 6 日（火），10：30～12：00

会場：広島大学理学部 B-301 教室

演題：Room Temperature Ionic Liquids (RT-ILs) as Designer Solvents and Catalysts in Contemporary Synthetic Schemes, Emphasizing Carbocation and Onium Ion Chemistry

○社会活動・学外委員

安倍学

- ・学協会役員，委員
 - 分子情報ダイナミクス研究会事務局(2005-2007)
 - 分子情報ダイナミクス研究会代表(2007-)
 - 基礎有機化学会・副会長（2010-）
- ・論文誌 EDITORIAL BOARD
 - ARKIVOC EDITORIAL BOARD OF REFEREES (2005-)
- ・論文誌編集委員
 - Bulletin of the Chemical Society of Japan (2009-)
 - 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-)

○産学官連携実績

平賀良知

独立行政法人酒類総合研究所,「酵母由来の新規リパーゼを用いた不斉非対称化に関する研究」
(2011)

○国際共同研究・国際会議開催実績

安倍 学

- ・国際共同研究
 - Norbert Hoffmann 博士（仏国 CNRS Universite de Reims）（2011）
- ・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

○他研究機関での講義・客員

安倍 学, 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所, 物質分子科学研究領域客員教授, 2011 年 4 月 1 日 - 2012 年 3 月 31 日

○研究助成の受け入れ状況

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

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

科学研究費補助金, 新学術領域研究, 炭素-炭素 π 1 重結合の創製・集積化による新規 π 電子系の構築, 安倍 学

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

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

○受賞状況 (学生)

渡辺新治 (M1), The 13th European Symposium on Organic Reactivity, Best Poster Award「Substituent Effect on the Reactivity of Triplet Excited State of Cyclic Azoalkanes: α -CN Cleavage versus β -CC Cleavage Reaction.」(2011)

叶 建准 (M2), The 8th Nabit Symposium, The Best Student Presentation Award「Kinetic Stabilization of Singlet 2,2-Dialkoxycyclopentane-1,3-diyls.」(2011)

○座長を行った学会・討論会の名称

安倍 学, The 6th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules, Japan, 2011 年 8 月

安倍 学, 第 22 回基礎有機討論会, つくば, 2011 年 9 月

安倍 学, 光化学討論会, 宮崎, 2011 年 9 月

安倍 学, 日本化学会第 92 春季年会, 神奈川, 2012 年 3 月

○その他特記事項

おもしろワクワク化学の世界-'11 広島化学展ミニ版 (平成 23 年 8 月 1 日, 広島市こども文化科学館)

青少年のための科学の祭典第 17 回広島大会 (平成 23 年 10 月 30, 31 日, 広島市こども文化科学館)

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), 勝本 之晶 (助教)

○研究活動の概要

量子化学研究グループの研究の目的は、生命系や凝集系また界面における、分子の構造や反応の特異性や分子挙動の特徴を、量子化学における理論と実験の両方の手法を用いることによって明らかにすることである。バイオ分野においては生体系における特異性の予測を、ナノサイエンス分野においてはナノサイズの分子設計・反応性予測をめざしている。

①アダマンタン周囲の水分子に関する水素結合解析：疎水的な分子は水溶液中で、水分子とどのような相互作用をしているのか明らかにするために、非常に疎水的な分子と考えられるアダマンタンと 1-アダマンチルクロライドの水和構造の比較を行った。温度 298K のカノニカルモンテカルロ法を行い、約 13 億構造を発生させ、その中の 400 万構造を解析に用いることにより、疎水性水素結合の特徴を明らかにした。

②アラニンモデル分子の Φ, Ψ マップ：タンパク質中のアミノ酸残基の主鎖構造の変化のしやすさを表すために、N 末側と C 末側に置換基をつけたアラニンモデル分子を使用し、主鎖の二面角 (Φ, Ψ) によるエネルギーマップを非経験的分子軌道法計算により作成した。

③有機半導体薄膜の振動電子二重共鳴 SFG 分光：バルク層が反転対称性を有する有機半導体薄膜試料の振動 SFG 信号について、双極子分極由来の薄膜界面からの信号と四重極子など高次の分極由来のバルクからの信号の寄与を検討した。シリカ基板上に作製した CuPc 有機薄膜（このバルク層は対称中心を有している）を試料として選び、反射方向と透過方向に発生する振動 SFG 信号の薄膜厚さ依存性を測定し、空気-有機層界面（以下、表面）、有機層-シリカ基板界面（以下、界面）、有機バルク層それぞれの寄与をフレネル係数を使った解析で評価した。解析の結果、CuPc 薄膜の場合は、約 40 nm 以下の厚さでは表面、界面、バルクからの信号が干渉し、それ以上の膜厚では表面とバルクからの信号の寄与が大きいことがわかった。

④水溶性高分子の立体規則性と水蒸気吸着挙動の相関：Poly(*N*-isopropylacrylamide) (PNiPAm) は、主鎖の meso ダイアド比が増加するにしたがって疎水的になり相分離温度が低下するが、Poly(*N,N*-diethylacrylamide) (PNdEA) では相分離温度が上昇する。本研究では、立体制御したアクリルアミド系高分子の薄膜に水分子が取り込まれていく様子を赤外分光法と QCM 法を用いて観察し、アミド基と水との相互作用に対する立体規則性の影響について考察した。

⑤水溶液中における poly(2-isopropyl-2-oxazoline) (PiPrOx) のコンホメーションと溶媒和：PiPrOx は、水溶液中 40°C 付近で LCST 型の相分離挙動を示し、なおかつ相分離点以上で一定時間保持すると結晶化することが知られている。本研究では、PiPrOx 水溶液の相分離過程および結晶化過程における分子論的变化を赤外分光法によって追跡した。

○発表原著論文

Masayuki Ohisa and Misako Aida (2011) Solvent distributions, solvent orientations and specific hydration regions around 1-adamantyl chloride and adamantane in aqueous solution. *Chemical Physics Letters*, **511** (1-3), 62.

Tetsuhiko Nagahara, Hitoshi Fukushima, Misako Aida and Taka-aki Ishibashi (2011) ©Self-assembled monolayers of cyanoterphenyl terminated alkyl disulfides studied by vibrationally and electronically doubly-resonant sum-frequency generation spectroscopy. *Chemical Physics Letters*, **506**, 190-195.

S. Nakano, T. Ogiso, R. Kita, N. Shinyashiki, S. Yagihara, M. Yoneyama, and Y. Katsumoto (2011) Thermoreversible gelation of isotactic-rich poly(*N*-isopropylacrylamide) in water. *Journal of Chemical Physics*, **135**, 114903.

Y. Akagi, T. Katashima, Y. Katsumoto, K. Fujii, T. Matsunaga, U. Chung, M. Shibayama, and T. Sakai (2011) Examination of the Theories of Rubber Elasticity Using an Ideal Polymer Network. *Macromolecules*, **44**, 5817-5821.

○国際会議

Taka-aki Ishibashi: Vibrational SFG Studies of Chemisorbed Monolayers on Silica-Deposited CaF₂ Substrates in Aqueous Environments. The Third Asian Spectroscopy Conference (December 2011, 12, Xiamen China) (招待講演)

Y. Katsumoto: Molecular Mechanism Underlying the Heat-Induced Phase Separation and Crystallization of Poly(2-isopropyl-2-oxazoline) in Water. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011 年 12 月, 東広島) (一般講演)

Shunsuke Mieda, Misako Aida: Comparison of ab initio MO, DFT and semi-empirical quantum chemical methods for computing biological molecules. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011 年 12 月, 東広島) (一般講演)

Sakiko Idei, Misako Aida: A theoretical study of glucose mutarotation reaction. The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011年12月, 東広島) (一般講演)

Shunsuke Mieda, Misako Aida: Theoretical study on differences between dipole moments of L-amino acid residues and D-amino acid residues. WATOC2011 (July 2011, Santiago de Compostela) (ポスター)

Misako Aida, Nana Hattori: Many-body effect in the interactions between nucleobases of DNA. 2012 Gordon Research Conferences on Molecular & Ionic Clusters (January 2012, Ventura, CA, United States) (ポスター)

Dai Akase, Misako Aida: Topologically distinct isomers of water hexamer anion. Gordon Research Conference Molecular & Ionic Clusters (January 2012, Ventura, CA, United States) (ポスター)

○国内学会

石橋 孝章: 水溶液中のシランカップリング膜の指紋領域における振動SFG分光。第5回SFG研究会 (2012年3月, 仙台) (招待講演)

勝本 之晶, 土井豆 亜希, ロドルフ・オビィ, フランソワーズ・ウィニク :
“Poly(2-isopropyl-2-oxazoline)の脱水および結晶化挙動” 第 60 回高分子学会年次大会(2011 月 5 月, 大阪) (依頼講演)

勝本 之晶, 下田 直嗣: アクリルアミド系高分子と水との相互作用に立体規則性が及ぼす影響とその分子機構。第 60 回高分子討論会(2011 年 9 月, 岡山) (依頼講演)

勝本 之晶, 土井豆 亜希, R. Obeid, F. Winnik: 水溶液中における Poly(2-isopropyl-2-oxazoline)の脱水および結晶化挙動。第 60 回高分子年次大会 (2011 年 5 月, 大阪) (一般講演)

勝本 之晶, 下田 直嗣: アクリルアミド系高分子と水との相互作用に立体規則性が及ぼす影響とその分子機構—主に Poly(*N*-ethylacrylamide)について。第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山大学) (一般講演)

勝本 之晶, 土井豆 亜希, R. Obeid, F. Winnik: 水溶液中における Poly(2-isopropyl-2-oxazoline)の感熱応答および結晶化挙動。第 34 回溶液化学シンポジウム (2011 年 11 月, 名古屋) (一般講演)

勝本 之晶: 「Poly(*N*-ethylacrylamide)の親水性に立体規則性を与える影響について」液体・溶液の微視的構造からダイナミクスまで—最近の研究結果から見えてくるもの— (2011 年 11 月, 愛媛) (一般講演)

多田 貴則, 喜多村 昇, 勝本 之晶, 坪井 泰之: ポリ (*N*-イソプロピルアクリルアミド) 水溶液の相分離ダイナミクス: レーザー-T ジャンプ法による分子量・濃度依存性の検討。第 60 回高分子年次大会 (2011 年 5 月, 大阪) (一般講演)

西 健吾, 千々石 雅志, 松永 拓郎, 勝本 之晶, 酒井 崇匡, 鄭 雄一, 柴山 充弘: Tetra-PEG ゲルのゲル化過程の解析。第 60 回高分子年次大会 (2011 年 5 月, 大阪) (一般講演)

多田 貴則, 勝本 之晶, 喜多村 昇, 坪井 泰之: レーザー-T - ジャンプ法によるポリ (*N*-イソプロピルアクリルアミド) 水溶液の相分離ダイナミクスの研究。第 5 回分子科学討論会 (2011 年 9 月, 札幌) (一般講演)

四方 俊幸, 前田 朋子, 長谷川 龍太, 源 恵美, 勝本 之晶, Winnik Francoise M: ポリ (2-アルキル-2-オキサゾリン) 水溶液の水和・脱水和・相分離挙動。第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)

安楽 泰孝, 岸村 顕広, 狩野 光伸, 勝本 之晶, 長田 健介, 片岡 一則: 架橋率の異なるポリイオンコンプレックス型中空粒子(Nano-PICsome)の基礎物性評価と体内動態評価。第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)

千々石 雅志, 西 健吾, 赤木 友紀, 藤井 健太, 勝本 之晶, 柴山 充弘, 鄭 雄一, 酒井 崇匡: 高分子ゲルの構造に及ぼす結合欠陥の影響。第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)

赤木 友紀, 石原 俊也, 藤井 健太, 松永 拓郎, 勝本 之晶, 柴山 充弘, 鄭 雄一, 酒井 崇匡:

ゲルの構造形成に及ぼすプレポリマーの分岐数の効果。第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)

西 健吾, 千々石 雅志, 松永 拓郎, 勝本 之晶, 酒井 崇匡, 鄭 雄一, 柴山 充弘: Tetra-PEG ゲルのゲル化過程の解析。第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)

下赤 卓史, 勝本 之晶, 長谷川 健: 量子化学計算による氷 Ih の OH 伸縮振動波数と水素結合構造の相関解析。第 5 回分子科学討論会 (2011 年 9 月, 札幌) (一般講演)

大久 真幸, 相田 美砂子: 水溶液中における 1-adamantyl chloride の溶媒和構造の理論化学的研究。第 14 回理論化学討論会 (2011 年 5 月, 岡山) (一般講演)

前田 晃宏, 背山 信, 尾下 隆英, 安倍 学, 石橋 孝章: cyclopentane-1,3-diyl 型ジラジカル種の時間分解赤外分光。第 5 回分子科学討論会 (2011 年 9 月, 札幌) (一般講演)

三枝 俊亮, 相田 美砂子: 「DNA 塩基配列とアミノ酸モデルによる双極子-双極子相互作用」日本生物物理学会 第 3 回 中国四国支部大会 (2011 年 5 月, 広島) (一般講演)

土井豆 亜希, 勝本 之晶: 立体制御したアクリルアミド系高分子薄膜の水分子吸着 II - poly(*N*-ethylacrylamide)と polyacrylamide について。第 60 回高分子年次大会 (2011 年 5 月, 大阪) (一般講演)

小西 翔大, 荒 正人, 多田 博一, 石橋 孝章: 水溶液中のフルオレセイン単分子膜の振動電子二重共鳴SFG分光。第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌) (一般講演)

山本 光恵, 勝本 之晶: 「蛍光ラベル法による立体制御されたアクリルアミド系高分子鎖近傍の局所溶媒環境測定」第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (一般講演)

山本 光恵, 勝本 之晶: 蛍光ラベル法による立体制御された刺激応答性高分子近傍の溶媒環境測定。第 26 回中国四国地区高分子若手研究会 (2011 年 11 月, 広島) (一般講演)

古田 菜穂子, 相田 美砂子: α ヘリックスのらせんの巻き替え過程についての理論化学的研究。第 34 回情報化学討論会 (2011 年 11 月, 長崎) (一般講演)

出射 早希子, 相田 美砂子: グルコースの立体異性化反応についての理論化学的研究。日本化学会西日本大会 (2011 年 11 月, 徳島) (一般講演)

勝本 之晶, 土井豆 亜希, F. Winnik: Poly(2-isopropyl-2-oxazoline)水溶液の相分離と結晶化挙動における局所構造変化。第 6 回 LSW シンポジウム (2011 年 1 月, 北海道) (ポスター)

土居 英男, 相田 美砂子: アダマンタンと水分子に関する水素結合解析。第14回理論化学討論会 (2011年5月, 岡山) (ポスター)

赤瀬 大, 相田 美砂子: 有限温度における $(\text{H}_2\text{O})_6$ の水素結合パターンと $(\text{H}_2\text{O})_6^-$ の安定構造。第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌) (ポスター)

三枝 俊亮, 相田 美砂子: 主鎖一側鎖間相互作用がタンパク質の高次構造に与える影響について。第 5 回分子科学討論会 (2011 年 9 月, 札幌) (ポスター)

三枝 俊亮, 相田 美砂子: "Dipole-dipole interaction between methylated cytosine and amino acid residue model," CBI/JSBi2011 合同大会 (2011 年 10 月, 兵庫) (ポスター)

安藤 広司, 吉田 智喜, 相田 美砂子: 共有結合性 PPAR γ リガンドの反応性についての理論化学的研究。第 5 回分子科学討論会 (2011 年 9 月, 札幌) (ポスター)

小西 宏明, 小山 愛美子, 藤原 享子, 石橋 孝章: シリカ基板上マレイミド膜へのアデニン誘導体の固定と振動 SFG 分光。第 5 回分子科学討論会 (2011 年 9 月, 大阪) (ポスター)

土井豆 亜希, 勝本 之晶: 立体制御したアクリルアミド系高分子薄膜の水分子収着 III-薄膜成形成法による違い。第 60 回高分子討論会 (2011 年 9 月, 岡山) (ポスター)

土井豆 亜紀, 勝本 之晶: 赤外分光法と QCM 法を用いた立体制御したアクリルアミド系高分子薄膜に対する収着挙動解析。第 26 回中国四国地区高分子若手研究会 (2011 年 11 月, 広島) (ポスター)

古田 美由紀, 勝本 之晶: 立体制御した PNiPAm を用いたソフト界面の作成。第 26 回中国四国地区高分子若手研究会 (2011 年 11 月, 広島) (ポスター)

服部 菜々, 相田 美砂子: A-DNA と B-DNA の核酸塩基間相互作用における多体効果。第 34 回情報化学討論会 (2011 年 11 月, 長崎) (ポスター)

堀内 輔, 勝本 之晶: 立体規則性を制御した PNiPAm ヒドロゲルの作成。第 26 回中国四国地区高分子若手研究会 (2011 年 11 月, 広島) (ポスター)

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部 4 年生	1	2
博士課程前期	1	14
博士課程後期	3	8
博士課程前期・後期共	0	0

○セミナー・講演会開催実績

相田 美砂子, 第 54 回中国四国産学連携化学フォーラム “イノベーション創出と人材育成”
(2011 年 4 月 8 日)

相田 美砂子, 「第 137 回量子生命科学セミナー」(2011 年 9 月 12 日)

相田 美砂子, 企業人材セミナー (第 17 回～第 20 回) (2011 年 5 月～6 月)

相田 美砂子, 企業人材セミナー (第 21 回～第 28 回) (2011 年 10 月～2012 年 3 月)

相田 美砂子, 第 4 回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会 (2011 年 9 月 28 日)

相田 美砂子, 第 5 回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会 (2012 年 3 月 8 日)

相田 美砂子, 第 3 回広島大学若手研究人材養成シンポジウム (2012 年 3 月 8 日)

○社会活動・学外委員

・学協会役員, 委員

相田 美砂子, 日本化学会情報化学部会幹事 (1996–2007)

相田 美砂子, 日本化学会中国四国支部幹事 (2002–2008)

相田 美砂子, 情報計算法学生物学会 (CBI 学会) 理事 (2002–)

相田 美砂子, 分子科学会運営委員 (2008–2011)

相田 美砂子, 中国四国・化学と工業懇話会運営委員長 (2011–2012)

相田 美砂子, 日本学術会議連携会員 (2011–)

石橋 孝章, 日本分光学会 赤外ラマン部会 幹事 (2005–)

石橋 孝章, 日本分析機器工業会 ラマン分光分析通則 JIS 新規原案作成委員会委員
(2008–2009)

・外部評価委員など

相田 美砂子, 岡崎国立共同研究機構計算科学センター運営委員会委員 (2000–2001)

相田 美砂子, 産業技術総合研究所 計算科学研究部門評価委員 (2005–)

相田 美砂子, 立命館大学 産学連携コーポ型高度人材育成プログラム 外部評価委員
(2011–)

相田 美砂子, 広島県 イノベーション人材等育成事業補助金審査会 委員 (2011–)

・講習会・セミナー講師

相田 美砂子, 第 54 回中国四国産学連携化学フォーラム “イノベーション創出と人材育成”, 講師
(2011 年 4 月 8 日, 東広島市)

相田 美砂子, 平成 23 年度「大学職員のための男女共同参画推進研修」(国立女性教育会館) 講師
(2011 年 12 月 8 日・9 日, 埼玉県比企郡)

相田 美砂子, 「若手研究人材養成のための担当者連絡会」コーディネーター (2012 年 1 月 5 日・
6 日, 広島市)

相田 美砂子, 岩手大学男女共同参画推進シンポジウム「科学技術・学術分野における男女共同参
画の推進」講師 (2012 年 2 月 20 日, 盛岡市)

相田 美砂子, 「広島大学 4 プロジェクト合同シンポジウム」講師 (2012 年 3 月 30 日, 東広島市)

勝本 之晶, 「The use of Infrared Spectroscopy for Monitoring Intra- and Inter-Molecular Interactions in
Solutions」モントリオール大学化学科セミナー, 講師, 2011 年 9 月, Montréal (Canada)

・高大連携事業

勝本 之晶, 国泰寺高校 SSH・ラボセミナー講師 (2011 年 11 月 26 日, 広島大学)

・論文誌編集委員

相田 美砂子, 日本生物物理学会「生物物理」編集委員 (2003–2004)

・ 討論会の組織委員

相田 美砂子, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium 実行委員長 (2011 年 12 月)

○産学官連携実績

相田 美砂子, 共同研究「金属エロージョンにおける反応過程の研究」(株) 日本製鋼所広島製作所 (2011)

○共同プロジェクトへの参加状況

相田 美砂子, 科学技術システム改革事業 ポストドクター・インターンシップ推進事業 (イノベーション創出若手研究人材養成)「地方協奏による挑戦する若手人材の養成計画」実施責任者 (2009-2013)

相田 美砂子, 科学技術システム改革事業 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促進」実施責任者 (2010-2014)

○研究助成の受け入れ状況

日本学術振興会 頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム

「実験・理論・合成の連携グループによる次世代機能性分子創出のための海外共同研究」

(分担: 相田 美砂子) (代表: 江幡 孝之, 広島大学)

文部科学省科学研究費補助金, 特定領域研究 計画研究

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

文部科学省科学研究費補助金, 挑戦的萌芽研究

「可変位相差板を用いた新しい偏光変調キラル振動 S F G 分光」(代表: 石橋 孝章)

京都大学化学研究所・共同研究課題・分野選択型萌芽

「立体制御された親水性高分子を用いた新たなソフト界面の構築」(代表: 勝本 之晶)

文部科学省科学研究費補助金 若手B

「高分子と水との相互作用に対する立体規則性の影響を分子レベルで解明する試み」

(代表: 勝本 之晶)

文部科学省科学研究費補助金 基盤研究C

「ビナフチル型CDプローブを利用した実用的絶対配置決定法の開発とその天然物への応用」(分

担: 勝本 之晶)(代表: 細井信造, 京都薬科大学)

文部科学省科学研究費補助金 基盤研究S

「セリウムの化学種と安定同位体比の解析に基づく精密な酸化還元指標の確立と地球史研究」(分

担: 勝本 之晶)(代表: 高橋嘉夫, 広島大学)

○受賞状況 (学生)

三枝 俊亮 (博士課程後期 2 年)

The Best Student Presentation Award, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2011, Higashi-Hiroshima, Japan)

○座長を行った学会・討論会の名称

石橋 孝章, The 5th Symposium on Molecular Science for Supra Functional Systems
(2011 年 7 月, 札幌)

石橋 孝章, 第5回SFG研究会 (2012年3月, 仙台)

勝本 之晶, 第 60 回高分子学会年次大会(2011 月 5 月, 大阪)

勝本 之晶, 第60回高分子討論会(2011年 9月, 岡山)

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23年度は、博士課程前期に0名、後期に2名の外国人留学生を受け入れた。

1-4-4 研究助成金の受け入れ状況

化学専攻のスタッフが平成23年度（2011年度）に受けた研究費等の総数を示す。

項 目	分 類	件数
文部科学省科学研究費補助金	特定領域研究	0
	新学術領域	0
	基盤研究(A)	1
	基盤研究(B)	5
	基盤研究(C)	7
	挑戦萌芽研究	3
	若手研究(A)	0
	若手研究(B)	2
	若手研究(スタートアップ)	0
その他の研究費（公募）		18

1-4-5 学会ならびに社会での活動

・学協会役員、委員（過去5年以内）

江幡孝之，分子科学研究所運営委員会委員（2007-）
井口佳哉，日本分光学会学会誌編集委員（2007-）
岡田和正，日本化学会中国四国支部庶務幹事（2007-）
水田 勉，日本化学会，中国四国支部会計幹事（2006-2007）
水田 勉，錯体化学会，理事（2006-2007）
水田 勉，錯体化学会，理事（2011-）
藤原照文，日本化学会，中国四国支部事務局長（2007）
藤原照文，日本化学会，中国四国支部地区幹事（2008）
藤原照文，日本化学会，中国四国支部長（2011）
藤原照文，日本分析化学会，中国四国支部常任幹事（2006-2009）
藤原照文，日本分析化学会，中国四国支部副支部長（2010-2011）
藤原照文，日本分析化学会，代議員（2011-）
石坂昌司，日本化学会北海道支部庶務幹事（2011）
石坂昌司，日本分析化学会北海道支部幹事（2000-2011）
石坂昌司，日本分析化学会若手交流会全国代表幹事（2007-2009）
岡本泰明，日本分析化学会中国四国支部庶務幹事（2011-）
塚原 聡，日本溶媒抽出学会理事（2004-）
塚原 聡，日本分析化学会中国四国支部庶務幹事（2005-）
灰野岳晴：新規素材探索研究会幹事（2001-）
灰野岳晴：ホスト・ゲスト化学研究会幹事（2006-）
灰野岳晴：有機合成化学協会中国四国支部幹事（2007-）
灰野岳晴：日本化学会中国四国支部庶務幹事（2008）
池田俊明：日本化学会生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事（2011-）
山崎勝義，日本化学会中国四国支部会計幹事（2008）
山崎勝義，日本化学会中国四国支部事務局長（2009）
山崎勝義，日本化学会第8回化学イノベーションシンポジウム準備委員会事務局長（2009）
山崎勝義，日本化学会物理化学ディビジョン幹事（2010）
山崎勝義，日本化学会代議員（2011-2012）
山崎勝義，日本分光学会代議員（2004，2006-）
山崎勝義，日本分光学会支部監査（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，日本化学会中国四国支部庶務幹事（2010）
高口博志，原子衝突研究協会行事委員（2004-2007）
高口博志，原子衝突研究協会運営委員（2008-）
高口博志，原子衝突研究協会幹事（行事委員長）（2009-2011）
高口博志，分子科学会企画委員（2010-2011）
山本陽介，第22期日本学術会議連携会員（2011-）
小島聡志，有機合成化学協会中国四国支部事務局（2003-）
河内 敦，ケイ素化学協会理事（2008-）
安倍 学，分子情報ダイナミクス研究会事務局（2005-2007）
安倍 学，分子情報ダイナミクス研究会代表（2007-）
安倍 学，基礎有機化学会・副会長（2010-）
相田美砂子，日本化学会情報化学部会幹事（1996-2007）
相田美砂子，日本化学会中国四国支部幹事（2002-2008）
相田美砂子，情報計算化学生物学会（CBI学会）理事（2002-）
相田美砂子，分子科学会運営委員（2008-2011）
相田美砂子，中国四国・化学と工業懇話会運営委員長（2011-2012）
相田美砂子，日本学術会議連携会員（2011-）
石橋孝章，日本分光学会 赤外ラマン部会 幹事（2005-）

石橋孝章, 日本分析機器工業会 ラマン分光分析通則JIS新規原案作成委員会委員 (2008-2009)

・外部評価委員など (過去5年以内)

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

山本陽介, IUPAC Commission II-2, National Representative (2002-2010)

相田美砂子, 産業技術総合研究所 計算科学研究部門評価委員 (2005-)

相田美砂子, 立命館大学 産学連携コ-オプ型高度人材育成プログラム 外部評価委員 (2011-)

相田美砂子, 広島県 イノベーション人材等育成事業補助金審査会 委員 (2011-)

・講習会・セミナー講師 (過去5年以内)

山崎勝義, 広島大学理工フェア「サイエンス (=科学=理学) の魅力と楽しみ方」(2007年5月, 福山商工会議所)

山崎勝義, 日本化学会実力養成化学スクール「化学反応論・遷移状態理論」(2007年8月, 日本化学会)

山崎勝義, 広島大学図書館学術講演会「単行書の公開と機関リポジトリへの期待」(2007年10月, 広島大学図書館)

山崎勝義, 中四国6大学による第1回理系大学教育に関する研究フォーラム「協調演習による理学的知力の育成支援」(2007年12月, 高知大学総合研究棟)

山崎勝義, 図書館における学習環境提供に関する懇談会「協調演習による理学的知力の育成支援」(2008年2月, 広島大学図書館)

山崎勝義, 日本化学会実力養成化学スクール「化学反応論・遷移状態理論」(2008年8月, 日本化学会)

山崎勝義, 科学研究費補助金説明会「科学研究費補助金に採択されるためには, どのように研究計画調書を書けばよいか」(2009年9月, 広島大学)

山崎勝義, 東北大学理学部化学教室 一般雑誌会「振動励起分子のエネルギー移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, 神戸大学大学院理学研究科 講演会「振動励起分子のエネルギー移動と化学反応の速度論的研究」(2010年12月, 神戸大学)

山崎勝義, サイエンスカフェ「化学反応の謎に迫る!」(2011年3月, 広島大学)

高口博志, 上智大学理工学部物理学科コロキウム「開殻系原子分子の衝突過程と化学反応」(2007年5月, 上智大学)

高口博志, 第4回原子・分子・光科学 (AMO) 討論会ディスカッションリーダー (2007年5月, 電気通信大学)

高口博志, 分子科学若手の会夏の学校講師「ラジカル分子の反応と分光の基礎」(2007年8月, 長良川会館)

高橋修, 情報メディア教育研究センター&INSAM共同企画: ハイパフォーマンスコンピューティングセミナー「数値シミュレーション技法基礎セミナー」(2007年9月, 広島大学情報メディア教育研究センター)

山本陽介, 平成21年度岡山大学次世代研究者・異分野研究連携育成支援事業による講演会「超原子価5配位および6配位炭素・ホ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, 岡山県高等学校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～高校化学の授業に役立つ話～」(2010年11月, 岡山県立倉敷工業高校)

山本陽介, 2011年11月, 大塚製薬「16 π ポルフィリンの合成とその性質」(徳島市)

相田美砂子, 広島大学テレビセミナー「宇宙人は何人いるの?～地球外文明の数を“科学的”に考える～」 「第2回地球誕生と生命誕生の妙」(2010年11月放送)

相田美砂子, 「広大システム改革による女性研究者活躍促進」シンポジウム～活躍する女性研究者からのメッセージ～, コーディネーター (2011年3月17日, 広島市)

相田美砂子, 第54回中国四国産学連携化学フォーラム “イノベーション創出と人材育成”, 講師 (2011年4月8日, 東広島市)

相田美砂子, 平成23年度「大学職員のための男女共同参画推進研修」(国立女性教育会館) 講師 (2011年12月8日・9日, 埼玉県比企郡)

相田美砂子, 「若手研究人材養成のための担当者連絡会」 コーディネーター (2012年1月5日・6

日，広島市)

相田美砂子，岩手大学男女共同参画推進シンポジウム「科学技術・学術分野における男女共同参画の推進」講師（2012年2月20日，盛岡市）

相田美砂子，「広島大学4プロジェクト合同シンポジウム」講師（2012年3月30日，東広島市）
勝本之晶，JAIMAコンファレンス日本分光学会赤外・ラマン分光部会講習会，（2006年8月，千葉）

勝本之晶，振動スペクトルの解析法：振動スペクトルの多変量解析～ケモメトリックス～入門
勝本之晶，「The use of Infrared Spectroscopy for Monitoring Intra- and Inter-Molecular Interactions in Solutions」モントリオール大学化学科セミナー，講師，2011年9月，Montréal (Canada)

・高大連携事業（過去5年以内）

岡田和正，広島県高等学校教科学力養成事業，平成22年度第4回講演（2011年2月，広島県立呉三津田高等学校）

水田 勉，鳥取県立鳥取東高等学校 SSH自然化学実験（2010年9月広島大学）

水田 勉，自然科学実験セミナー 鳥取県立鳥取東高等学校（2011年9月，広島大学）

水田 勉，SSHラボセミナー 広島県立国泰寺高校（2011年11月，広島大学）

水田 勉，出張講義 鳥取県立鳥取西高等学校『学問への誘い』（2012年3月，鳥取市）

久保和幸，自然科学実験セミナー 鳥取県立鳥取東高等学校（2011年9月，広島大学）

久保和幸，SSHラボセミナー 広島県立国泰寺高校（2011年11月，広島大学）

石坂昌司，サイエンス・パートナーシップ・プログラム（SPP）講師（2007-2010，北海道札幌藻岩高等学校）

石坂昌司，平成19年度理数系教員指導力向上研修（ティーチャーズ・サイエンスキャンプ）講座「機器分析法の理解と実践～最先端の機器分析の体験とその原理・特徴の理解～」副講師（2007年8月，北海道大学）

塚原 聡，模擬授業，2009年9月17日，出雲市（島根県立出雲高等学校）

山崎勝義，大学模擬講義「分子に光をあてると化学結合の長さや強さがわかる」（2008年7月，広島県立広島皆実高等学校）

山崎勝義，大学模擬講義「サイエンス（＝科学＝理学）の魅力と楽しみ方」（2010年11月，鳥取県立鳥取東高等学校）

山崎勝義，大学模擬講義「分子はコマのように回りバネのように伸び縮みする」（2011年7月，広島県立広島皆実高等学校）

山崎勝義，大学模擬講義「サイエンス（＝科学＝理学）の魅力と楽しみ方」（2011年10月，鳥取県立鳥取東高等学校）

山崎勝義，大学模擬講義「サイエンス＝科学＝理学の楽しみ方と物理化学研究の最前線」（2011年11月，広島大学附属中高等学校）

山本陽介，2010年9月，県立広島高等学校，模擬授業

山本陽介，2010年7月，広島大学附属高等学校SSH事業

山本陽介，2011年12月，広島県立呉昭和高校，模擬授業

山本陽介，2011年7月，広島大学附属高等学校SSH事業

小島聡志，2010年6月，島根県立浜田高等学校，模擬授業

勝本之晶，国泰寺高校 SSH・ラボセミナー講師（2011年11月26日，広島大学）

・論文誌編集委員（過去5年以内）

岡田和正，日本分光学会「分光研究」編集委員（2003-2007年度）

塚原 聡，日本溶媒抽出学会，「Solv. Extr. Res. Devel. Jpn.」誌編集委員（2007-）

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-）

・学会・討論会の組織委員（過去5年以内）

岡田和正，第20回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム実行委員会委員（2005-2007）

岡田和正，第26回化学反応討論会実行委員会委員（2009-2010）

水田 勉，錯体化学会，錯体化学討論会運営委員（2006-）

藤原照文, 日本分析化学会第71回分析化学討論会実行委員会委員 (2009-2010)
 藤原照文, ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム実行委員会委員 (2004-)
 藤原照文, 日本分析化学会第56年会実行委員会委員 (2006-2007)
 石坂昌司, 日本分析化学会第58年会実行委員会委員 (2008-2009)
 塚原 聡, 日本分析化学会第56年会実行委員 (2006-2007)
 塚原 聡, 日本分析化学会第71回分析化学討論会実行委員会委員 (2009-2010)
 塚原 聡, 第29回日本溶媒抽出討論会実行委員長 (2010)
 灰野岳晴: 第7回ホスト-ゲスト化学シンポジウム組織委員長 (2011)
 灰野岳晴: 日本化学会第91春季年会特別企画「分子配列空間の精密制御と情報変換」, 企画主催者 (2011)
 池田俊明: 第7回ホスト-ゲスト化学シンポジウム実行委員 (2011)
 池田俊明: 第23回生体機能関連化学若手の会サマースクール実行委員 (2011)
 山崎勝義, 第26回化学反応討論会実行委員会委員長 (2009-2010)
 高口博志, 第14回理論化学シンポジウム実行委員会委員 (2007)
 高口博志, 第26回化学反応討論会実行委員会委員 (2009-2010)
 高口博志, 原子衝突研究協会第35回年会実行委員会委員長 (2009-2010)
 高口博志, 原子衝突研究協会第36回年会実行委員会委員長 (2010-2011)
 高口博志, 分子科学会企画委員分子科学会シンポジウム担当 (2010-2011)
 高橋 修, 第26回化学反応討論会実行委員会委員 (2009-2010)
 安倍 学, 基礎有機化学討論会組織委員 (2007-)
 相田美砂子, The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium実行委員長 (2010年12月)
 相田美砂子, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium 実行委員長 (2011年12月)
 相田美砂子, 第35回情報化学討論会 実行委員長 (2012年10月)

・その他の委員 (過去5年以内)

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-)
 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-)
 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-)
 福原幸一, 「サイエンスカフェ」スタッフ (2007-)
 井上克也, 日本学術振興会科学研究費審査委員
 井上克也, 高輝度放射光研究施設、利用者懇談会、委員
 井上克也, 高輝度放射光研究施設、利用者懇談会、キラル/マルチフェロイック磁性研究会会長
 井上克也, Ideen EXPO, ハノーバーアイデア博, ハノーバー, 出展 (2011)
 藤原照文, 日本分析化学会中国四国支部第47回分析化学講習会実行委員 (2010)
 石坂昌司, 日本分析化学会会誌「ぶんせき」編集委員 (2008-2009)
 石坂昌司, 日本分析化学会北海道支部第26回分析化学緑陰セミナー実行委員長 (2010)
 塚原 聡, 日本分析化学会会誌「ぶんせき」編集委員 (2008~2009)
 塚原 聡, 日本分析化学会中国四国支部第47回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四国支部第47回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-)
 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-2012年3月)
 灰野岳晴: 自然科学系専門部会委員長 (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, 化学系研究設備有効活用ネットワーク中国地域委員長 (2005-2010)
 山本陽介, 中国四国・化学と工業懇話会常任運営委員 (2007-)
 山本陽介, 広島大学薬品管理システム専門委員会委員長 (2006年4月-2011年3月)
 山本陽介, 広島大学設備マスタープランワーキング委員 (2007-2010)

山本陽介, 広島大学研究設備サポート推進会議委員 (2011.3-)
山本陽介, 広島大学研究設備サポート推進会議専門部会委員 (2011.3-)
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年3月)
山本陽介, 先端機能物質研究センター運営委員会委員 (2005-)
山本陽介, 組織的な若手研究者等海外派遣プログラム主担当研究者 (理工農系: サステナブル社会の実現に貢献する自然科学系国際的若手研究者の育成プログラム) (2010年2月-)
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年4月-2011年3月)
小島聡志, 入試科目検討ワーキンググループ委員 (2011)
安倍 学, おもしろワクワク化学の世界'11広島化学展ミニ版 (平成23年8月1日, 広島市こども文化科学館)
安倍 学, 青少年のための科学の祭典第17回広島大会 (平成23年10月30, 31日, 広島市こども文化科学館)

・他研究機関での講義・客員 (2011年度)

西原禎文, 大阪府立大学大学院理学系研究科物理科学専攻, 客員准教授, 2010年4月1日-
藤原照文, 福岡大学理学部, 非常勤講師, 2011年9月14日-2012年3月31日
山本陽介, 京都大学大学院工学研究科, 非常勤講師, 2011年1月26日-27日
山本陽介, 大阪大学産業科学研究所, 非常勤講師, 2011年5月27日
安倍 学, 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所, 物質分子科学研究領域客員教授, 2011年4月1日-2012年3月31日

・座長を行った学会・討論会の名称 (2011年度)

井口佳哉, 第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)
岡田和正, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Higashi-Hiroshima, December 2011.
西原禎文, 日本化学会第92春季年会(2012) (2012年3月, 神奈川)
水田 勉, 第61回錯体化学討論会, 岡山, 2011年9月
水田 勉, 第58回有機金属討論会, 名古屋, 2011年9月
久保和幸, 第61回錯体化学討論会, 岡山, 2011年9月
久保和幸, 日本化学会第92春季年会, 横浜, 2012年3月
藤原照文, 日本分析化学会第60年会 (2011年9月, 名古屋)
藤原照文, 平成23年度広島地区分析技術講演会 (2012年2月, 東広島)
石坂昌司, 日本分析化学会第60年会 (2011年9月, 名古屋)
岡本泰明, 平成23年度広島地区分析技術講演会 (2012年2月, 東広島)
灰野岳晴: The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2011, Hiroshima, Japan)
灰野岳晴: 第7回ホスト-ゲスト化学シンポジウム (2011年5月, 広島)
灰野岳晴: 第22回基礎有機化学討論会 (2011年9月, 茨城)
灰野岳晴: 第12回リング・チューブ超分子研究会シンポジウム (2011年11月, 大阪)
池田俊明: 日本化学会第93春季年会 (2012年3月, 神奈川)
山崎勝義, 第27回化学反応討論会, 東京, 2011年6月
高口博志, 第27回化学反応討論会, 東京, 2011年6月
高口博志, 第5回分子科学会2011, 札幌, 2011年9月
山本陽介, 第22回基礎有機化学討論会 (2011年9月, つくば)
山本陽介, 第38回有機典型元素化学討論会 (2011年12月, 金沢)
河内 敦, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011年12月, 東広島)
小島聡志, The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2011年12月, 東広島)
河内 敦, 日本化学会第92春季年会 (2012年3月, 横浜)
小島聡志, 日本化学会第92春季年会 (2012年3月, 横浜)
安倍 学, The 6th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules, Japan, 2011年8月
安倍 学, 第22回基礎有機討論会, つくば, 2011年9月

安倍 学, 光化学討論会, 宮崎, 2011年9月
安倍 学, 日本化学会第92春季年会, 神奈川, 2012年3月
石橋孝章, The 7th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2010, Higashi-Hiroshima, Japan)
石橋孝章, The 5th Symposium on Molecular Science for Supra Functional Systems (2011年7月, 札幌)
石橋孝章, 第5回SFG研究会 (2012年3月, 仙台)
勝本之晶, 第60回高分子学会年次大会(2011年5月, 大阪)
勝本之晶, 第60回高分子討論会(2011年 9月, 岡山)

・セミナー・講演会開催実績 (2011年度)

井上克也, Spring-8利用者懇談会「キラル磁性・マルチフェロイックス研究会」(2012年1月27日)組織委員長
水田 勉, 中国四国地区錯体化学研究会 (2011年4月23日, 理学研究科 E002 号室)
水田 勉, 錯体化学秋の学校 (2011年9月19-20日, セトウチ児島ホテル)
水田 勉, 分子研研究会「innovation を目指す若手錯体化学者シンポジウム」(2012年3月13日, 自然科学研究機構分子科学研究所)
水田 勉, Dr. Rory Waterman 講演会「Zirconium-Mediated Bond Formation: Methods, Molecules, and Materials」(2011年4月18日, 理学研究科 E209 号教室)
水田 勉, Dr. Jean Pierre Djukic 講演会「Non-Covalent Interactions in Transition Metal Chemistry: from Molecular Cohesion to Molecular Design」(2012年2月27日, 理学研究科 B301 号教室)
藤原照文, プラズマ分光分析研究会第83回講演会, 2011年10月14日, 広島県立産業技術交流センター第2研修室(広島県情報プラザ, 広島), 主催: プラズマ分光分析研究会
高口博志, 2011年第19回原子衝突セミナー, 実行委員長
高口博志, 2011年第5回分子科学会シンポジウム, 世話人
山本陽介, K.M. Pietrusiewicz 教授 (Marla Curie-Sklodowska University) 講演会「Olefin metathesis as a new tool in the synthesis of chiral phosphine ligands」(平成23年7月6日(水)15:00-, 理学部 E002 号室)
山本陽介, Derek P. Gates 教授講演会 (University of British Columbia) 「Applications of P=C Bonds in Polymer Science and Catalysis」(平成23年11月11日(金)16:30-, 理学部 B301 号室)
山本陽介, Shih-Yuan Liu 先生 (University of Oregon) 講演会「Developing The Basic Science and Applications of Boron(B)-Nitrogen(N) Containing Heterocycles」(平成23年12月15日(木)15:00-, 理学部 E002 号室)
山本陽介, 第34回有機合成化学協会中国四国支部奨励賞受賞講演並びに特別招待講演会(構造有機化学研究グループと共同で開催) 大山 陽介 (広島大学大学院工学研究院) 「機能性色素のオプトエレクトロニクスデバイスへの新展開」, 山元 公寿 (東京工業大学資源化学研究所) 「Metallochemistry の創成に向けて: 分子リアクターを利用した精密無機金属合成」(平成23年11月19日(土)13:40, 理学部 E002 号室)
安倍 学, Professor Armido Studer 講演会「Oxidative C-C-bond forming reactions - with and without transition metals」(平成23年9月30日(金)16:30~18:00, 広島大学理学部 B-301 教室)
安倍 学, Professor G. Narahari Sastry 講演会「Cooperativity of non-bonded interaction」(平成24年2月2日(木), 16:30~18:00, 広島大学理学部 B-603 教室)
安倍 学, Professor Ken Laali 講演会「Room Temperature Ionic Liquids (RT-ILs) as Designer Solvents and Catalysts in Contemporary Synthetic Schemes, Emphasizing Carbocation and Onium Ion Chemistry」(平成24年3月6日(火), 10:30~12:00, 広島大学理学部 B-301 教室)
相田美砂子, 第54回中国四国産学連携化学フォーラム「イノベーション創出と人材育成」(2011年4月8日)
相田美砂子, 「第137回量子生命科学セミナー」(2011年9月12日)
相田美砂子, 企業人材セミナー (第17回~第20回) (2011年5月~6月)
相田美砂子, 企業人材セミナー (第21回~第28回) (2011年10月~2012年3月)
相田美砂子, 第4回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会 (2011年9月28日)
相田美砂子, 第5回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会 (2012年3月8日)
相田美砂子, 第3回広島大学若手研究人材養成シンポジウム (2012年3月8日)

・産学官連携実績（2011年度）

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

平賀良知，独立行政法人酒類総合研究所，「酵母由来の新規リパーゼを用いた不斉非対称化に関する研究」（2011）

相田美砂子，共同研究「金属エロージョンにおける反応過程の研究」（㈱日本製鋼所広島製作所（2011）

・国際共同研究・国際会議開催実績（2011年度）

井上克也，キラル磁性体の磁気構造解明国際共同研究：スペイン・Zaragoza大学，フランス・ラウエーランジェバン研究所，中性子線回折研究，2002-

井上克也，キラル磁性体の磁気ダイナミクス国際共同研究：ロシア・ウラル州立大学，ロシア科学アカデミー・チェルノゴフカ・固体物性研究所，パルス磁場による高速磁化過程研究，2000-

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

井上克也，低次元磁性体に関する国際共同研究：フランス・ULP，2008-

井上克也，The Fifth Japanese-Russian Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices (November, Hyogo, Japan) 組織委員長（2011）

石坂昌司，JSPS二国間交流事業「多核遷移金属錯体の光化学に関する日露共同研究：化学的修飾と発光性制御」（2009-2011）

山本陽介，10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) 国内組織委員（2011）

安倍 学，仏国CNRS Universite de Reimsとの国際共同研究（2011-）

安倍 学，International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules組織委員（2005-）

平賀良知，米国Texas Tech大学との国際共同研究（2011）

1-5 その他特記事項

1-5-1 量子生命科学プロジェクト研究センター

Center for Quantum Life Sciences (QuLiS)

メンバー

理学研究科化学専攻

相田 美砂子（代表）、井上 克也、江幡 孝之、石橋 孝章、小島 聡志、勝本 之晶

理学研究科数理分子生命理学専攻

井出 博、楯 真一、泉 俊輔、片柳 克夫、中坪 敬子

先端物質科学研究科分子生命機能科学専攻

田中 伸和

医歯薬学総合研究科

小澤 孝一郎、古武 弥一郎、原田 隆範

工学研究科

森本 康彦、大倉 和博

特任助教

吉田 智喜

研究員

Adchara Padermshoke, 杉本 廣之

○研究活動の概要

量子生命科学プロジェクト研究センター（*Center for Quantum Life Sciences* : QuLiS）は広島大学プロジェクト研究センターの一つとして平成 15 年 4 月に設置された。膨大化しつつあるライフサイエンス分野の情報から有益な概念を抽出するためには、IT 技術を駆使することが必須であり、また、従来の大学に根強く残っている既成の枠にとらわれることなく、複合領域の研究者の自由な連携が必須である。量子生命科学プロジェクト研究センターは、理学研究科化学専攻・同数理分子生命理学専攻、医歯薬総合研究科および先端物質科学研究科の若手研究者が連携して構成している。

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」の推進母体として活動した。このプロジェクトは、専攻横断的な教育と研究の土壌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「イノベーション創出若手研究人材養成」（現：科学技術人材育成費補助金「ポストドクター・インターンシップ推進事業」）（文部科学省）として「地方協奏による挑戦する若手人材の養成計画」が採択され、量子生命科学プロジェクト研究センター（QuLiS）は、その推進母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」アドバンストコースの母体としての活動実績をふまえ、新しい分野における教育や研究を推進し、さらに若手研究人材の養成をめざしている。被養成者がそれぞれの独自の専門領域をもったうえで、とくに計算機を活用した融合領域研究のスキルを身につけ、イノベーション創出をめざす研究をすすめるための場としての機能を果たしている。

さらに、平成 23 年度に採択された、「頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム」の『実験・理論・合成の連携グループによる次世代機能性分子創出のための海外共同研究』（平成 23～25 年度）の推進母体として、学生および若手研究者の海外派遣と研究の推進を進めている。

また、本センターは、女子中高生対象の科学教室の実施等、理学研究科としてのアウトリーチ活動にも協力している。

○平成 23 年度の活動の記録

《1》量子生命科学プロジェクト研究センターの拠点

総合研究実験棟 6 階（ユニット No.2）を計算機室として、また、理学研究科共用スペース（B102 室）を実験室として使用している。また、弾力的活用スペース（教育学部研究棟 B 807 室）を拠点として使用し、研究員や大学院生が一緒になって、生体系に関する研究・開発を推進している。

《2》「地方協奏による挑戦する若手人材の養成計画」の一環として次のようなセミナーやシンポジウムを開催した。

①「企業人材セミナー」の開催

第17回	(株) ヒロテック	平成23年5月13日
第18回	ダイキョーニシカワ(株)	平成23年5月27日
第19回	宇部興産(株)	平成23年6月10日
第20回	マツダ(株)	平成23年6月24日
第21回	ナカシマプロペラ(株), ナカシマメディカル株式会社	平成23年10月13日
第22回	三菱レイヨン(株)	平成23年10月28日
第23回	(株) ファーマフーズ	平成23年11月11日
第24回	大塚製薬(株)	平成23年12月16日
第25回	三菱重工業(株)	平成24年1月20日
第26回	花王(株)	平成24年2月3日
第27回	ナガセケムテックス(株)	平成24年2月22日
第28回	三菱電機(株)	平成24年3月22日

②「量子生命科学セミナー」の開催

第137回 2011年9月12日(月) 10:30~12:00 理学部小会議室 E202 室

講演題目:

Research in a National Laboratory in the USA: Multidisciplinary Approach to Energy Research

講演者: Dr. Michel Dupuis (Pacific Northwest National Laboratory)

③ The 8th Nano Bio Info Chemistry Symposium の開催

Date: Dec 10 (Sat) – 11 (Sun), 2011

Venue: Reception Hall of the Faculty Club, Hiroshima University (Higashi-Hiroshima)

英語での口頭発表のみの「第7回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム」を開催した。

- ・一般講演: 22 (内学生の発表数: 19)
- ・特別講演: Prof. Marek J. Wójcik (Jagiellonian University, Poland)
“Dynamic interactions in vibrational spectra and multidimensional proton tunneling in hydrogen-bonded systems”
- ・参加者数: 100 人 (内学生数 = 77 人)
- ・学生賞授与 (参加者 (学生を除く) の投票により決定)

The Best Student Presentation Award 4 名

Shunsuke Mieda

“Comparison of ab initio MO, DFT and semi-empirical quantum chemical methods for computing biological molecules”

Shaoyu Wei

“White-light-emitting silicon nanocrystal generated by pulsed laser ablation in supercritical fluid - Investigation of spectral components as a function of excitation wavelengths and aging time - ”

Jianhuai Ye

“Kinetic Stabilization of Singlet 2,2-Dialkoxycyclopentane-1,3-diyls”

Minoru Yoshimizu

“Intramolecular Vibrational energy Redistribution(IVR) of CH stretching vibration of Benzene derivatives”

Student Award 2 名

Tatsuya Inoue

“Synthesis of a Novel Tridentate Ligand System Bearing a Benzene Ring Condensed with Two Seven Membered Rings and Its Application”

Yuko Ueda

“Self-assembly of extended π -conjugated molecules based on phenylisoxazoles”

④ 理学研究科の正式授業科目として「プロテオミクス実験法・同実習」および「量子情報科学」を集中講義として実施した。

プロテオミクス実験法・同実習 (NaBr/T 生命科学系集中講義)

2011 年 9 月 12 日 (月) ~ 9 月 17 日 (土)

ポストゲノムの時代を迎え、プロテオミクス研究においてますます主要な解析手法になりつつあるタンパク質の質量分析法と X 線結晶構造解析について最新機器を用いた実験法の講義と実習を行う。質量分析法、X 線構造解析法をそれぞれ 3 日間ずつ計 6 日間である。

・主な内容

X 線結晶構造解析 (担当: 片柳克夫) (理学部 C104 号室, N-BARD RI センター L302 号室)

タンパク質の結晶化, X 線回折実験, 電子密度図の表示

質量分析法 (担当: 泉 俊輔) (理学部 A017 号室, N-BARD 遺伝子実験施設 201 号室)

電気泳動ゲルからの試料調製, 質量分析装置の使用法

量子情報科学

期間: 2011 年 10 月 19 日 ~ 12 月 15 日

授業担当者: 神沼 二真 (かみぬま つぐちか)

統合テーマ: 自然認識の方法論の発展と情報計算学との関係 (理 C104)

第 1 回 10 月 19 日 (水) 12:50-14:10 自然認識と思考、計算、計算機

第 2 回 10 月 19 日 (水) 14:35-16:05 情報学とはどんな学問か

統合テーマ: 古典物理学における情報と統計の概念 (理 C104)

第 3 回 10 月 20 日 (木) 12:50-14:10 情報計算機械として生物をみる

第 4 回 10 月 20 日 (木) 14:35-16:05 熱力学とマックスウエルのデモン

統合テーマ: 統計力学とエントロピー

第 5 回 11 月 1 日 (火) 12:50-14:10 ボルツマン分布と統計力学

第 6 回 11 月 1 日 (火) 14:35-16:05 統計力学におけるエントロピー

量子情報と量子計算のための量子力学再入門 (理 C104)

第 7 回 11 月 2 日 (水) 12:50-14:10 量子力学の理論形式

第 8 回 11 月 2 日 (水) 14:35-16:05 スピンと 2 状態系

統合テーマ: 多粒子系の量子力学と情報学 (理 C104)

第 9 回 11 月 30 日 (水) 12:50-14:10 多粒子系の量子力学

第 10 回 11 月 30 日 (水) 14:35-16:05 シュミット分解と情報学

統合テーマ: 量子情報・量子計算 (理 C104)

第 11 回 12 月 1 日 (木) 12:50-14:10 量子情報・量子計算の原理

第 12 回 12 月 1 日 (木) 14:35-16:05 量子情報・量子計算への期待

統合テーマ: 学際的な領域における Carrier Path (理 C104)

第 13 回 12 月 14 日 (水) 12:50-14:10 自然科学と情報計算学との学際領域

第 14 回 12 月 14 日 (水) 14:35-16:05 グローバルに展開する研究開発と Carrier Path

第 15 回 12 月 15 日 (木) 12:50-14:10 演習回答など

⑤ ナノテク・バイオ・IT グランドマスター認定証授与

「ナノテク・バイオ・IT 融合教育プログラムマスター認定証」を取得済みで、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認定証」を授与する。2011 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認定証」を授与した。なお、全体で 5 人目である。

大久 真幸 (2011 年 9 月 5 日 博士課程後期化学専攻修了)

《3》「頭脳循環を加速する若手研究者戦略的海外派遣プログラム」『実験・理論・合成の連携グループによる次世代機能性分子創出のための海外共同研究』の一環として次の学生を派遣し、共同研究を推進した。

派遣学生: 赤瀬 大 (博士課程後期 2 年) 2011 年 12 月 27 日 ~ (研究期間 1 年)

派遣先研究機関: Pacific Northwest National Laboratory (USA)

受入れ研究者: Dr. Sotiris Xantheas

2 化 学 科

2-1 学科の理念と目標

化学科の理念・目標は、自然科学の基盤である化学における教育研究を深化、推進するとともに、化学の基礎を体系的に身につけ、幅広く深い教養に根ざした総合的判断力を持った社会で活躍できる人材を育成することである。

2-2 学科の組織

【1】化学科の教員

化学科は化学専攻および数理分子生命理学専攻の化学系の教員が併任している。化学科授業科目担当の教員（平成24年3月1日現在）および平成23年度の非常勤講師を次にあげる。

職	氏 名	所 属
教 授	相 田 美砂子	化学専攻分子反応化学講座
	安 倍 学	化学専攻分子反応化学講座
	泉 俊 輔	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	井 上 克 也	化学専攻分子構造化学講座
	江 幡 孝 之	化学専攻分子構造化学講座
	河 内 宣 之 (非常勤)	東京工業大学大学院理工学研究科
	齋 藤 健 一	自然科学研究支援開発センター
	楯 真 一	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	中 島 覚	自然科学研究支援開発センター
	中 田 聡	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	灰 野 岳 晴	化学専攻分子構造化学講座
	水 田 勉	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
	武 藤 裕	理化学研究所RNA生物学研究チーム
准教授	石 坂 昌 司	化学専攻分子構造化学講座
	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	化学専攻分子構造化学講座
	片 内 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
	西 原 禎 文	化学専攻分子構造化学講座
	平 賀 良 知	化学専攻分子反応化学講座
助 教	藤 原 好 恒	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	芦 田 嘉 之	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	池 田 俊 明	化学専攻分子構造化学講座
	岩 倉 いづみ	化学専攻分子反応化学講座
	大 前 英 司	数理分子生命理学専攻生命理学講座
	岡 本 泰 明	化学専攻分子構造化学講座
	勝 本 之 晶	化学専攻分子反応化学講座
	久 保 和 幸	化学専攻分子構造化学講座
	高 木 隆 吉	化学専攻分子反応化学講座
	高 橋 修	化学専攻分子反応化学講座
	仲 一 成	化学専攻分子反応化学講座
	福 原 幸 一	化学専攻分子構造化学講座
	藤 原 昌 夫	数理分子生命理学専攻生命理学講座

【2】化学科の運営

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

平成23年度 化学科長 中田 聡
 副化学科長 泉 俊輔
 化学科長補佐 井口 佳哉

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23年度の各種委員会の委員一覧を次にあげる。

図書委員	井上			
化学実験委員	○高口 勝本	久保 平賀	西原 大前	藤原(昌)
教務問題検討委員	○中田	山崎	楯	岡田
情報処理委員	○相田 高橋	岡本 芦田	久保	安倍
野外研修企画委員 および 担当研究グループ	○田林 藤原(照) 反応有機化学 反応物理化学 構造物理化学 分子生物物理 固体物性化学			
当番研究グループ	固体化学グループ			
安全衛生委員	○灰野 平賀 大前	福原 高木 勝本	岡本 高橋 藤原(好)	久保 河内 芦田
危険薬品庫管理者	河内			
シリンダーキャビネット室管理者	久保			
就職担当	安倍 山崎		H22年10月～H23年9月末 H23年10月～H24年9月末	

○は委員長

2-3 学科の学士課程教育

2-3-1 アドミッション・ポリシーとその目標

化学科では次のような入学者受け入れ方針を掲げている。

- 1) 真理を探究することの好きな人。
- 2) 好奇心の旺盛な人。
- 3) 化学の好きな人。
- 4) 新しいことに挑戦したいと思っている人。

2-3-2 学士課程教育の理念と達成のための具体策

化学は、物質科学の中心を占める基幹学問として、また、生命科学の複雑で精緻な世界を、分子及びその集合体レベルで解明するための基盤として、自然科学の中でますますその重要性を増しています。化学科ではこのような時代に対応するため、化学の基盤を体系的に身につけさせた上で、応用を含めた幅広く深い知識と問題解決能力を習得させることを教育目標とします。特に、基礎実験技術の習得を含めた体系化した教育を行います。また、環境問題や情報化時代に対応した化学教育の充実を図り、生命科学分野の基礎教育を充実させ、多様な科学の発展に適応できる広い視野をもった人材を育成することも目標とします。

一方、学生の学習意欲や能力の多様化の問題を、個性の発現の好機ととらえ、各学生の指向や個性を考慮した教育指導を行い、学生の顔の見える教育というスローガンを掲げます。

具体的には、以下の目標を設定します。

- (1) 学生と教員の交流を促進し、各学生の生活指導を含めた一貫教育を行う。
- (2) 主要な化学分野の基礎の体系化を図る。
- (3) 学生実験を重視し、幅広い分野で、最新の科学技術の発展に対応できる実験技術を習得させる。
- (4) 情報化・国際化に対応した教育を行う。

2-3-3 学士課程教育の成果とその検証

・平成23年度化学科在籍学生数

平成23年5月1日現在

入 学 年 度	在 籍 学 生 数
平成23年度	63(17)
平成22年度	63(16)
平成21年度	65(24)
平成20年度	63(23)
平成19年度	6(0)
平成18年度	7(0)
平成17年度	1(1)
平成16年度以前	1(0)
合 計	269(81)

() 内は女子で内数

・チューター

入学年度	チューター
平成23年度	中田，井口，平賀
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，片柳，井口
平成18年度	山本，塚原，石橋
平成17年度	谷本，泉
平成16年度	相田，水田
平成15年度	河内

・平成23年度化学科開講授業科目

科目区分	開設期	履修指定	開講科目名	担当教員名	授業のキーワード
教養	1 前	必修	教養ゼミ	中田	化学的情報の収集・整理・提供
基盤	1 前	他学科用	*化学概説A【理】	山崎	原子・分子，化学結合，量子化学，熱力学，反応速度と化学平衡
基盤	2 後	他学科用	*化学概説B【理】	安倍，中島	原子・分子，化学結合，量子化学，化学熱力学，化学平衡，化学反応，有機化学
情報	1 前	必修	情報活用演習〔1 理化〕	高木	コンピュータ，インターネット，電子メール，WWW，ワープロ，表計算，プレゼンテーション
基盤	3 前	必修	化学英語演習〔3 理化〕	井口，片柳，西原	化学英語，英文読解，英作文，英会話
基盤	3 前	必修	化学英語演習〔3 理化〕	井上，灰野，石橋	化学英語，英作文，英文和訳
専門	1 前	必修	基礎化学A	江幡	力学，エネルギー，波動，電気，物質の性質と構造
専門	1 前	必修	基礎化学B	山本	有機化学，命名法，官能基，立体化学，有機反応
専門	1 後	必修	基礎物理化学A	藤原(好)	化学熱力学，状態方程式，自由エネルギー，熱力学第零-第三法則，化学ポテンシャル
専門	1 後	必修	基礎物理化学B	井口	量子化，波動・粒子二重性，波動関数，シュレーディンガー方程式
専門	1 後	必修	基礎無機化学	井上	原子の基本的性質，電気陰性度と電気親和力，原子とイオンのサイズ，結合力 混成軌道とVSEPR則
専門	1 後	必修	基礎有機化学	小島	有機電子論，反応機構，付加反応，求核置換反応，脱離反応，アルケン，アルキン
専門	2 前	必修	物理化学ⅠA	石橋	熱力学，化学平衡，相平衡，相律
専門	2 前	必修	物理化学ⅠB	岡田	調和振動子，剛体回転子，オービタル，動径分布関数，スピン，パウリの原理
専門	2 後	必修	物理化学ⅡA	山崎	反応速度，素反応，ボルツマン分布，分配関数
専門	2 後	必修	物理化学ⅡB	高口	電子構造，分子軌道法，量子化学，群論
専門	2 前	必修	無機化学Ⅰ	西原	周期表・分子軌道法・量子化学・バンド理論・結合法
専門	2 前	必修	無機化学Ⅱ	塚原	化学量論，化学平衡，活量，酸塩基，酸化還元，錯形成，沈殿生成
専門	2 後	必修	無機化学Ⅲ	水田	遷移金属錯体，ルイス酸・塩基，結晶場分裂と結晶場安定化
専門	2 前	必修	有機化学Ⅰ	河内	アルコール，エーテル，フェノール，アミン
専門	2 前	必修	有機化学Ⅱ	灰野	カルボニル化合物・電子の流れ図・求核攻撃・求電子反応・共役付加・カルボニル縮合反応
専門	2 後	選択	生体物質化学	泉	糖質・立体化学・脂質・生理活性物質・生体膜・アミノ酸・等電点・蛋白質・構造階層性・蛋白質の精製・蛋白質の一次配列決定法
専門	2 後	選択	生物構造化学	片柳	蛋白質，核酸，分光法，回折法，X線構造解析，立体構造
専門	2 後	必修	無機化学Ⅲ	水田	遷移金属錯体，ルイス酸・塩基，結晶場分裂と結晶場安定化
専門	2 後	必修	無機化学演習	藤原(照)，水田，久保西原，岡本	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	芳香族求電子置換反応・芳香族求核置換反応・多核芳香族化合物・複素環式化合物・ペリ環状反応
専門	2 後		有機典型元素化学	山本	

専門	2 後	選択	有機分析化学	河内	構造解析, 機器分析, 核磁気共鳴法 (NMR), 赤外分光法 (IR)
専門	3 前	選択	システムバイオロジー	泉, 山本(卓)	DNA, 塩基 (プリン, ピリミジン), 遺伝, セントラルドグマ, 遺伝子組換え, iPS細胞, 酵素反応, 反応速度論, 阻害剤, フィードバック制御, シグナル伝達系
専門	3 前	選択	化学インターンシップ	中田	派遣研修, 職業倫理
専門	3 前	必修	化学実験	高口	基礎化学実験・無機・分析化学・物理化学・有機・生物化学
専門	3 前	選択	機器分析化学	藤原(照)	分配平衡, 溶媒抽出, イオン交換, クロマトグラフィー, 分光分析法, 電気化学分析法
専門	3 前	選択	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・超分子化学
専門	3 前	選択	反応動力学	山崎	気体分子運動論, 反応断面積, 反応速度, 反応速度定数, 遷移状態理論
専門	3 前	選択	反応有機化学	安倍	転位反応, 軌道相互作用, Woodward-Hoffmann 則
専門	3 前	必修	物理化学演習	井口, 齋藤, 福原, 勝本, 大前	熱力学, 化学平衡, 相平衡, 量子力学, 回転・振動分光法, 統計熱力学
専門	3 前	選択	分子構造化学	江幡	回転・振動・電子状態, 分光学, スペクトル
専門	3 前	選択	無機固体化学	井上	固体物性, 誘電・伝導・磁性体, 相転移
専門	3 前	選択	量子化学	相田	電子状態理論, 分子軌道法, 計算化学
専門	3 後	選択	バイオインフォマティクス	大前, 芦田	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	生体高分子化学	楯	蛋白質立体構造, 蛋白質機能制御機構, 蛋白質の分子認識機構, 蛋白質を対象とした計測技術
専門	3 後	選択	生物化学	泉	代謝, 同化・異化, 解糖系, TCAサイクル, 脂質生合成, 2次代謝, メバロン酸経路と非メバロン酸経路
専門	3 後	選択	先端化学	中田	先端化学, 卒業研究ガイダンス
専門	3 後	選択	分子光化学	中田	光化学反応, 電子の励起, 光の吸収, 電子スピン
専門	3 後	選択	放射化学	中島	放射線, 放射性同位元素, 化学状態, 放射線計測, 原子核反応
専門	3 後	必修	有機化学演習	小島, 平賀, 高木, 池田, 岩倉	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	典型元素および遷移金属の有機金属化学, 18電子則, 酸化付加, 還元的脱離, 挿入反応, 金属錯体触媒
専門	4 後		化学演習	相田, 岡田	統計熱力学, 化学平衡, 反応論, 量子論, 分子構造

集中講義 化学特別講義 河内 宣之 (東京工業大学大学院理工学研究科/教授)
 (反応と衝突の物理化学) 担当: 構造物理化学グループ
 化学特別講義 武藤 裕 (理化学研究所RNA生物学研究チーム/チームリーダー)
 (転写後修飾に関わる因子の構造生物学的研究) 担当: 分子生物物理化学グループ

・担当授業科目一覧

平成23年度担当授業科目						
職	氏 名	講 義	演 習	化学 実験	卒業 研究	
教 授	相田美砂子	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，			◎	
	泉 俊輔	生体物質化学，生物化学，システムバイオロ ジー	化学英語演習		◎	
	井上 克也	基礎無機化学，無機固体化学，教養ゼミ，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			◎	
	齋藤 健一	光機能化学		○	◎	
	楯 真一	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	教養ゼミ，機器分析化学	無機化学演習		◎	
	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	○	◎	
	山崎 勝義	物理化学Ⅱ A，反応動力学			◎	
	山本 卓	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Ⅰ A，	物理化学演習	○	◎	
	井口 佳哉	基礎物理化学B，化学実験A		◎	◎	
	岡田 和正	集積化学，物理化学Ⅰ B	化学演習，化学英語演習	○	◎	
	片柳 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	教養ゼミ，物理化学Ⅱ B	化学英語演習，物理化学演習	○	◎	
	小島 聡志	基礎有機化学		○	◎	
	西原 禎文	無機化学Ⅰ		○	◎	
	藤原 好恒	基礎物理化学A	物理化学演習	○	◎	
助 教	芦田 嘉之	バイオインフォマティクス		○	○	
	池田 俊明		有機化学演習	○	○	
	岩倉いづみ		有機化学演習	○	○	
	大前 英司	バイオインフォマティクス		○	○	
	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					
	平賀 良知		有機化学演習	○	○	
	福原 幸一	教養ゼミ	総合演習（化学科）	○	○	
	藤原 昌夫		物理化学演習	○	○	

化学プログラム履修要領

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

- 1 必修の授業科目は、授業科目履修表に定められた年次に修得しておくことが望ましい。未修得科目が生じた場合には、次年次の授業科目と開講時間が重なるために受講できない場合があり、留年の原因となる。
重なった場合には、未修得科目を優先して履修することが望ましい。
- 2 受講基準1により化学実験を履修することができない場合には、卒業が遅れることになる。
この場合でも、化学実験以外の授業科目は履修することができるが、未修得の必修科目の履修を優先させなければならない。
- 3 教養教育科目は3年次後期(6セメスター)までに修得しておかないと、受講基準2により卒業研究が履修できない場合がある。
- 4 教養教育科目「領域科目」で卒業の要件として修得すべき単位(以下、卒業要件単位)にできるのは、自然科学領域以外の科目に限る。
- 5 教養教育科目「基盤科目」のうち数学・理科系の「概説」科目として「物理学概説A」及び「物理学概説B」を選択必修としているが、両方履修することが望ましい。「概説」科目の修得単位は、専門科目(選択)の単位に振り替えることができないが、『科目区分を問わない』科目の単位にすることができる。
ただし、「化学概説A」及び「化学概説B」は卒業要件単位に算入することができない。
- 6 授業担当教員の下承が得られれば、化学プログラムで開講する上位セメスターの専門教育科目を履修することができる。
- 7 特別講義は、一定期間に集中的に開講される講義である。
化学プログラムでは、「化学特別講義」及び「理学部他プログラムの特別講義」から、合計で最大2単位まで専門科目(選択)として認めることができる。
- 8 理学部他プログラムの専門基礎及び専門科目の授業科目、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」は、8単位まで専門科目(選択)の要修得単位にできる。
なお、「理学部他プログラムの特別講義」の単位を卒業要件単位とする場合、理学部他プログラムの単位で専門科目(選択)の卒業要件単位とできる単位数は、8単位からその「理学部他プログラムの特別講義」の単位数を引いた数が上限となる。
- 9 「科目区分を問わない」科目として4単位必要である。この4単位は、以下の科目の単位から振り替えることができる。詳細についてはチューターと相談のこと。
 - ・『コミュニケーション基礎』の「コミュニケーション基礎Ⅰ」及び「コミュニケーションⅡ」
 - ・自然科学領域以外の「領域科目」
 - ・「基盤科目」の数学・理科系の「概説」科目(「化学概説A、B」を除く)
 - ・理学部他プログラムの「専門基礎科目」及び「専門科目(「特別講義」を除く)」
 - ・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」

10 「教職に関する科目」は、卒業要件単位に算入することができない。

化学プログラム専門教育科目受講基準

1 化学実験(5, 6セメスター)を履修するためには、各科目群において次に示す単位数以上(合計62単位)を修得していなければならない(括弧内の数字は、4セメスターまでに修得することになっている卒業に必要な単位数を表す。)

また、「学生教育研究災害傷害保険」及び「学生教育研究賠償責任保険」等に参加していることが必要である(平成22年度以降の1年次入学生は、大学負担により「学生教育研究災害傷害保険」のみ4年分加入済)。

教養ゼミ	2単位(2)	健康スポーツ科目	2単位(2)
パッケージ別科目	4単位(6)	基盤科目	12単位 ^{*1} (16)
外国語科目	9単位(10)	専門基礎科目	27単位(33)
情報科目	2単位(2)	科目区分を問わない科目	2単位(4)
領域科目	2単位(2)		

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

2 卒業研究(7, 8セメスター)を履修するためには、各科目群において次に示す単位数以上(合計110単位)を修得していなければならない(括弧内の数字は、卒業研究を除いた卒業に必要な単位数を表す。)

また、「学生教育研究災害傷害保険」及び「学生教育研究賠償責任保険」等に参加していることが必要である(平成22年度以降の1年次入学生は、大学負担により「学生教育研究災害傷害保険」のみ4年分加入済)。

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

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

付記 この履修要領は、平成23年度入学生から適用する。

平成23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『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 等		単 位 数	履修区分	標準履修セメスター（下段の数字はセメスターを示す）（注1）									
									1年次		2年次		3年次		4年次			
									前期	後期	前期	後期	前期	後期	前期	後期		
									1	2	3	4	5	6	7	8		
教 養 教 育 科 目	教 養 コ ア 課 目	教 養 ゼ ミ			2	教養ゼミ	2	必 修	②									
		平 和 科 目			2	「平和科目」から	各2	選択必修	○	○								
		パッケージ別科目			6	「パッケージ別科目」の1パッケージから	各2	選択必修		○	○							
		総 合 科 目			2	「総合科目」から	各2	選択必修			○	○						
	共 通 科 目	外 国 語 科 目	英 語 （注2）	コミュニケーション基礎 （注3）	(0)	コミュニケーション基礎Ⅰ	1	自由選択	○									
						コミュニケーション基礎Ⅱ	1			○								
			コミュニケーションⅠ	2	2	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	2	2	コミュニケーションⅡA	1	必 修		①								
						コミュニケーションⅡB	1			①								
			コミュニケーションⅢ	2	2	コミュニケーションⅢA	1	選択必修			○	○						
						コミュニケーションⅢB	1				○	○						
						コミュニケーションⅢC	1				○	○						
						上記3科目から2科目2単位												
		初修外国語 （ドイツ語、フランス語、スペイン語、 ロシア語、中国語、韓国語、アラビ ア語のうちから1言語選択）			4	「ベーシック外国語Ⅰ」から2単位	各1	選択必修	○									
						「ベーシック外国語Ⅱ」から2単位	各1			○								
						Ⅰ及び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									
		領 域 科 目			2	「自然科学領域」以外から（注4）	1又は2	選択必修	○	○	○	○						
		健康スポーツ科目			2	「健康スポーツ科目」から	1又は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	1	選択必修			○							
						地学実験	1				○							
						上記2科目から1科目1単位												
					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科目から「物理学概説A」又は「物理学概説B」を含む2科目4単位												
					2	化学英語演習（同一名称2科目）	各1	必 修						①	①			
教養教育科目小計				46														

(注1) 記載しているセメスターは標準履修セメスターを表している。当該セメスター以降の同じ開設期(前期又は後期)に履修することも可能であるが、授業科目により開設期が異なる場合があるので、履修年度のシラバス等により確認すること。

(注2) 短期語学留学等による「英語圏フィールドリサーチ」又は自学自習による「マルチメディア英語演習」の履修により修得した単位を『コミュニケーションⅠ・Ⅱ・Ⅲ』の要修得単位として算入することができる。
外国語技能検定試験による単位認定制度もある。詳細については、学生便覧に記載の教養教育の英語に関する項及び「外国語技能検定試験等による単位認定の取扱いについて」を参照すること。

(注3) 修得した「コミュニケーション基礎Ⅰ」及び「コミュニケーション基礎Ⅱ」の単位については、『科目区分を問わない』に算入することができる。

(注4) 『自然科学領域』以外の科目に限り、卒業要件単位として算入することができる。教育職員免許状の取得を希望する場合は、『社会科学領域』の「日本国憲法」が必修であることに留意すること。

(専門教育)

区分	科 目 区 分	要修得 単位数	授 業 科 目 等	単 位 数	履修区分	標準履修セメスター（下段の数字はセメスターを示す）（注1）										
						1年次		2年次		3年次		4年次				
						前期	後期	前期	後期	前期	後期	前期	後期			
						1	2	3	4	5	6	7	8			
専 門 教 育 科 目	専門基礎科目	35	基礎化学A	2	必 修	②										
			基礎化学B	2		②										
			基礎物理化学A	2			②									
			基礎物理化学B	2			②									
			基礎無機化学	2			②									
			基礎有機化学	2			②									
			物理化学Ⅰ A	2				②								
			物理化学Ⅰ B	2				②								
			物理化学Ⅱ A	2					②							
			物理化学Ⅱ B	2					②							
			無機化学Ⅰ	2				②								
			無機化学Ⅱ	2				②								
			無機化学Ⅲ	2					②							
			有機化学Ⅰ	2				②								
			有機化学Ⅱ	2				②								
			有機化学Ⅲ	2					②							
			無機化学演習	1					①							
			物理化学演習	1						①						
			有機化学演習	1							①					
	専門科目	(注5)	43 15以上	先端数学	2	選択必修					○					
				先端物理科学	2							○				
				先端化学	2							○				
				先端生物学	2						○					
				先端地球惑星科学	2							○				
				上記5科目の「先端理学科目」から1科目2単位												
				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							○				
				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6）								○	○	○	○			
		上記23科目から8科目15単位以上														
		0 5 8	18	化学実験	10	必 修						← ⑩ →				
				卒業研究	各4								④	④		
				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7）		自由選択	○	○	○	○	○	○	○			
		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												
		科目区分を問わない		4	(注8)		制限付選択	○	○	○	○	○	○	○	○	
		合計		128												

- (注5) 「専門科目」の要修得単位数43を充たすためには、必修科目計18単位及び選択必修科目計2単位に加えて、選択必修科目及び自由選択科目から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6) 「化学特別講義」は、一定期間(5セメスター以降)に集中形式で開講される。履修については化学プログラム履修要領を参照すること。
- (注7) その他化学プログラム担当教員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談のこと。
- (注8) 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46単位、専門教育科目78単位 合計124単位)に加えて、教養教育科目及び専門教育科目の科目区分を問わず、さらに4単位以上修得することが必要である。
- ただし、6単位を超えて修得した「パッケージ別科目」は含まれず、以下の科目の単位に限定される。詳細についてはチューターと相談のこと。
- ・『コミュニケーション基礎』の「コミュニケーション基礎Ⅰ」及び「コミュニケーション基礎Ⅱ」
 - ・「自然科学領域」以外の『領域科目』
 - ・『基礎科目』の数学・理科系の「概説」科目（「化学概説A」及び「化学概説B」を除く）
 - ・理学部他プログラムの『専門基礎科目』及び『専門科目』（「特別講義」を除く）
 - ・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23年度化学科卒業生進路状況

(平成24年5月1日現在)

() 内は女子で内数

卒業生 総数	就 職 者											進 学	その他	
	一 般 職									教 職			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			
61 (22)	1 (0)	1 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	1 (0)	3 (0)	1 (0)	1 (0)	55 (21)	0 (0)	2 (1)

2-3-4 卒業論文発表実績

【1】平成23年度卒業研究生の各研究グループ配属者数

研究グループ名	卒研究生数	スタッフ名
化学専攻分子構造化学講座 構造物理化学研究グループ	6	江幡, 井口, 岡田, 福原
固体物性化学研究グループ	5	井上, 西原
錯体化学研究グループ	4	水田, 久保
分析化学研究グループ	5	藤原(照), 石坂, 岡本
構造有機化学研究グループ	5	灰野, 池田
化学専攻分子反応化学講座 反応物理化学研究グループ	5	山崎, 高口, 高橋
有機典型元素化学研究グループ	5	山本, 河内, 小島
反応有機化学研究グループ	5	安倍, 平賀, 岩倉, 高木
量子化学研究グループ	5	相田, 石橋, 勝本
数理分子生命理学専攻 物理環境化学研究グループ	3	中田, 藤原(好), 藤原(昌)
生物化学研究グループ	5	泉, 芦田
分子生物物理化学研究グループ	5	楯, 片柳, 大前
自然科学研究支援センター 光機能化学研究グループ	1	齋藤
放射線反応化学研究グループ	2	中島
計	61	

【2】平成23年度の卒業生と研究題目

浅野 浩 史	疎水性ペプチド解析を志向した新規MALDIマトリックス添加剤の開発	生物化学
壹岐 蓉 子	ビスボルフィリンクレフトとトリニトロフルオレノンで両端を修飾したポリエチレングリコールと水素添加型ポリブタジエンポリマーの合成研究	構造有機化学
出射早希子	グルコースアノマーの異性化反応についての理論化学的研究	量子化学
稲本 直 晃	質量分析を用いた蛋白質のフォールディング過程の解明 — 蛋白質の電荷数変化は何に由来するか？	生物化学
岩知道優香	ジホスファナフトシクロファンを用いた新規大環状4座リン配位子合成の試み	錯体化学
植木 幸 広	分子内 B-H/C-H 脱水素化による含ホウ素環状化合物の合成	有機典型元素化学
大浦 孟 士	パターン認識受容体 LOX-1 と細胞内因子 HSP70 との相互作用解析	分子生物物理学
大野 晃	P-B間に二重結合性を有するメタラホスフィノボランと水素との反応	錯体化学
興津 寛 幸	0 価炭素架橋Pt-Ruヘテロ二核錯体の合成	錯体化学
小原 大 翼	固体試料の直接加熱気化導入ー ICP 発光分析法によるプラスチック中の水銀の定量のための基礎検討	分析化学
重川 泰 之	ニトロキシドラジカルを持つシクロペンタン-1, 3-ビラジカルの閉環反応に伴うスピン多重度変化	反応有機化学
加藤智佐都	磁性イオンを含むドーナツ型 polyoxometalate の物性評価	固体物性化学
香取 亜 希	フラン化反応の検討と立体化学の解明	有機典型元素化学
川本 晃 裕	植物の炭素-炭素二重結合還元酵素の構造と機能ーカルボン還元酵素の一次構造解析	生物化学
北迫 拓 史	可視・近赤外領域に大きな吸光係数を持つSi 量子ドットの生成	光機能化学
桐山 慧 大	放射線被ばくに特異的な尿中バイオマーカーの探索ー被ばく特異的な糖鎖切断	生物化学
金城可愛志	配位結合による架橋形成を目指した亜鉛ビスボルフィリンクレフトとトリニトロフルオレノン部位をもつ head-to-tail型超分子ポリマーの合成研究	構造有機化学
國武 尚 登	新規オージェ遷移確率の理論計算手法の開発	反応物理化学
後藤 樹	硫黄架橋二核ルテニウムフルバレン錯体合成に及ぼす架橋配位子の効果	放射線反応化学
坂井雄一郎	強酸性部位が隣接したブレンステッド酸の創製とその反応性に関する研究	反応有機化学
佐古 渚	Cucurbiturilを含む機能分子材料の開発	固体物性化学
佐藤香央子	2つのvan Koten 型配位子を有する超原子価5配位ホウ素化合物の合成と性質	有機典型元素化学
背山 信	トリアザビシクロオクター1, 3-ジオン-4, 6-ジイル型一重項ビラジカルの時間分解赤外分光	量子化学
曾我 和 毅	エレクトロスプレーイオン化法を用いたトリプトファンの蛍光観測	構造物理化学
高山みどり	ビス(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼン誘導体を導入したプラチナ錯体の合成	構造有機化学
武井 将 志	シソカ基板上へのアミノ化合物の固定と振動SFGスペクトルの測定	量子化学
竹内 彩	新規NMR法を利用したDNA結合に伴うタンパク質の分子形態変化観測	分子生物物理学
立本 絵 里	チオール基を有する化合物によって凝集した金ナノ粒子の吸収分光測定	分析化学
田中 真 実	水溶液中における単一金ナノ粒子の散乱光の顕微測定	分析化学
谷本 晃 一	新しいリチウムイオンキャパシタ正極材料の合成と物性評価	固体物性化学
玉利 佑	アミノ酸変異導入によるタンパク質の分子配向制御と応用	分子生物物理学
時信 智 史	集積型鉄錯体Fe(NCX) ₂ (b p p) ₂ (X = S, Se, B	放射線反応化学

	H_3 ; b p p = 1, 3-ビス (4-ピリジル) プロパン) の電子状態	
中 克 仁	トビイロケアリ (<i>Lasius japonicus</i>) のフェロモン類の解明 – 長鎖アルキルケトン類の道しるべフェロモンとしての可能性	生物化学
中 岡 拓 馬	不揮発性分子の新規レーザー蒸発法の開発	構造物理化学
中 川 真 依	強磁場・微小重力環境が銀ナノ粒子生成に及ぼす効果	物理環境化学
奈 須 遼 渡	オキサアルカノール・オキサアルカン酸モノエステルの構造と熱物性	構造物理化学
新 田 裕 也	OPPh ₂ が3重に架橋した Zr-Pd錯体の合成法の改良	錯体化学
橋 本 翼	S(¹ D) + OCS反応系での S ₂ (X ³ Σ _g ⁻ , a ¹ Δ _g)生成に関する速度論および動力学的研究	反応物理化学
長谷川真保	ギ酸・酢酸およびそれらの水和物に対する軟X線分光における理論的研究	反応物理化学
畑 美 里	ポルフィリンナノロッドの磁気配向に対する微小重力の効果	物理環境化学
平 石 徹 郎	エレクトロスプレーを用いた大気圧下での色素分子イオンの蛍光検出	構造物理化学
平 松 尚 悟	新規な16π電子系を有するポルフィリン誘導体の合成と性質	有機典型元素化学
廣 藤 龍 哉	ケイ素官能性ジベンゾシラボリンの合成, 構造および反応	有機典型元素化学
福 岡 康 則	電子衝撃法による3-メチルピロールのサイト特異的解離	構造物理化学
藤 井 良 美	フルフリルアルコール誘導体のPaternó-Büchi反応の位置選択性とそれを利用した大環状化合物の合成	反応有機化学
藤 岡 知 徳	原子変位型強誘電体を利用した Multiferroics の設計と合成	固体物性化学
藤田奈津美	カリックス[5]アレーン誘導体とルテニウム(II)トリスビピリジン錯体の会合挙動の研究	構造有機化学
古田美由紀	立体制御されたアクリルアミド系高分子による界面作製の試み	量子化学
古 永 遥 香	平面環状分子によるストレッチ効果を利用したマルチラジカル of 長寿命化	反応有機化学
堀 内 輔	Poly (N-isopropylacrylamide) ハイドロゲルの膨潤挙動に対する架橋方法の影響	量子化学
堀 田 貴 仁	オキサアルキル鎖によるアルカン酸エステルの融点低下能	構造物理化学
益 本 修	生成物散乱分布測定による CH ₃ ONO の光解離反応経路の探索	反応物理化学
宮川真里奈	化学輸送法による新規マルチフェロイクスの合成と物性評価	固体物性化学
宮 地 達 也	N字型単分子膜上における樟脳円板のシャトル運動	物理環境化学
宮下由里奈	ジヒドロ葉酸還元酵素の酵素機能に対する塩の効果	分子生物物理学
元 石 流 生	ニトロジベンゾフラン骨格を有するカルシウムケージド化合物のAMエステル合成	反応有機化学
山 口 雄 大	原生動物の単一生細胞中に存在する小器官の in situ 顕微分光測定	分析化学
山 田 仁 美	四本のアルキル鎖で架橋されたビスレゾルシンアレーンの新規合成法の開発と超分子ポリマーを指向したアップタームの修飾	構造有機化学
山 田 真 由	ヒト由来DNA修復酵素NTH1の構造解析にむけた発現系の構築	分子生物物理学
山 本 智 之	溶媒抽出-逆ミセル系ローダミンB化学発光検出を用いた微量アンチモン(III, V)の定量法	分析化学
渡 部 裕 也	O(¹ D)+H ₂ 反応で生成するOH(<i>v</i> 4)の初期振動状態分布とArによる緩和速度の決定	反応物理化学

2-4 その他特記事項

2-4-1 Chemサロン

Chemサロンは、いろいろな研究室の研究活動の紹介や化学関係教員・学生の交流の場を提供するために平成3年度より開始された。数理分子生命理科学研究科（化学系）と共催で開催している。平成23年度の世話人は齋藤健一教授である。

平成23年度の講師と題目を次にあげる。

『遷移状態をみたいと思いませんか?』 2011年8月1日
岩倉 いずみ（化学専攻分子反応化学講座）

『光ピンセットで単一微小水滴を気相中に浮遊させる』 2011年12月19日
石坂 昌司（化学専攻分子構造化学講座）

2-4-2 学生の表彰

理学部長賞表彰者2名

日本化学会中国四国支部長賞受賞者1名

報告書作成ワーキンググループ

山崎	勝義	(平成23年度化学科自己点検・評価委員)
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)