

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24年度
(2012年度)

平成25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	33
構造有機化学研究グループ	38
分子反応化学講座	42
反応物理化学研究グループ	42
有機典型元素化学研究グループ	47
反応有機化学研究グループ	53
量子化学研究グループ	57
1-4-3 各種研究員と外国人留学生の受け入れ状況	62
1-4-4 研究助成金の受け入れ状況	62

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	70
1-5-1	量子生命科学プロジェクト研究センター	70
2.	化 学 科	74
2-1	学科の理念と目標	74
2-2	学科の組織	74
2-3	学科の学士課程教育	76
2-3-1	アドミッション・ポリシーとその目標	76
2-3-2	学士課程教育の理念と達成のための具体策	76
2-3-3	学士課程教育の成果とその検証	77
2-3-4	卒業論文発表実績	85
2-4	その他特記事項	88
2-4-1	Chemサロン	88
2-4-2	学生の表彰	89
	報告書作成ワーキンググループ	90

はじめに

平成 24 年度化学専攻長
灰野 岳晴

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 24 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24年度	化学専攻長	灰野 岳晴
	化学副専攻長	水田 勉
	化学専攻長補佐	井口 佳哉

また、化学専攻の円滑な運営のために各種委員会等が活動している。平成24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	久保	河内	岡田
障害防止委員	高木	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	山崎 灰野
人事交流委員会	灰野
教務委員	片柳
評価委員	山崎 灰野
安全衛生委員	◎●水田
広報委員	池田
大学院委員	山崎 灰野
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	高木
地区防災対策委員	灰野
教育交流委員	石坂

◎は委員長 ●全学委員

化学専攻教員の全学または理学研究科での活動

教育研究評議会（オブザーバー）	相 田 美砂子	平成22年 4月 1日～
経営協議会（オブザーバー）	相 田 美砂子	平成22年 4月 1日～
大学院リーディングプログラム機構運営会議	相 田 美砂子	平成23年10月 1日～
研究推進機構会議	相 田 美砂子	平成23年10月30日～
広報企画戦略会議	相 田 美砂子	平成23年 8月 2日～
理系女性研究者活躍推進プロジェクト会議	相 田 美砂子	平成21年11月17日～
本学の機能強化に向けた行動計画策定のためのWG （財務強化検討WG）	相 田 美砂子	平成24年 4月 1日 ～平成24年10月31日
本学の機能強化に向けた行動計画策定のためのWG （研究活動検討WG）	山 本 陽 介	平成24年 4月 1日 ～平成24年10月31日
行動計画2010WG （VII柔軟な教育研究体制の構築）	山 本 陽 介	平成24年10月 1日～
大学院課程会議	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～
外国語教育研究センター運営委員会	小 島 聡 志	平成24年 4月 1日～
テニユアトラック審査委員会	江 幡 孝 之	平成22年 6月15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～
自然科学研究支援開発センター運営委員会 （低温・機器分析部門）	井 上 克 也	平成24年 7月 1日～

先進機能物質研究センター運営委員会	山本陽介	平成23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～
	西原禎文	平成24年4月1日～
ものづくりプラザ管理運営委員会	山本陽介	平成24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～
研究人材養成委員会	相田美砂子	平成21年7月15日～
	江幡孝之	平成23年7月15日～
図書館資料選定会議 自然科学系専門部会	井上克也	平成23年6月1日～
図書館リポジトリア・アドバイザー	山崎勝義	平成23年6月1日～
北京研究センター運営委員会	山崎勝義	平成22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～
環境安全センター運営委員会	安倍学	平成22年4月1日～
安全衛生管理委員会 作業環境測定専門委員会 薬品管理システム専門委員会 東広島地区事業場安全衛生委員会	灰野岳晴	平成23年4月1日～
	小島聡志	平成16年4月1日～
	灰野岳晴	平成16年4月1日～
	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23年4月1日～
若手研究人材養成センター副センター長	相田美砂子	平成21年7月15日～
量子生命科学プロジェクト研究センター長	相田美砂子	平成15年4月1日～
技術センター センター長	山本陽介	平成20年4月1日～
大学経営企画室室長	相田美砂子	平成23年12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～
入試科目検討WG	小島聡志	平成24年4月1日～
副研究科長	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～

1-2-1 教職員

平成25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 久米 晶子
准教授 関谷 亮
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 河内 敦
准教授 高口 博志
准教授 小島 聡志
助教 勝本 之晶
助教 高木 隆吉
助教 高橋 修
助教 仲 一成
助教 波多野 さや佳

化学専攻事務

契約一般職員 竹村 夕子
契約一般職員 松浦 真子
契約一般職員 宮本 曜子

平成24年度の非常勤講師

酒井 章吾 (岐阜大学工学部／教授)
授業科目名：電子状態理論と化学反応への応用
担当：量子化学研究グループ

永目 諭一郎 (日本原子力研究開発機構先端基礎研究センター／副センター長)
授業科目名：超重元素化学
担当：放射線反応化学研究グループ

西川 俊夫 (名古屋大学大学院生命農学研究科／教授)
授業科目名：生物有機化学特論
担当：構造有機化学研究グループ

1-2-2 教職員の異動

平成24年4月1日	久米 晶子	(錯体化学講座准教授) 東京大学大学院理学系研究科助手より採用
8月31日	石橋 孝章	(量子化学講座准教授) 筑波大学数理物質系化学域(教授)へ転出
11月1日	関谷 亮	(構造有機化学講座准教授) 立命館大学大学院より採用
3月1日	波多野 さや佳	(反応有機化学講座助教) 青山学院大学理工学部化学・生命科学科研究支援者より採用

1-3 専攻の大学院教育

1-3-1 大学院教育の目標とアドミッション・ポリシー

【1】教育目標

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

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

【2】アドミッション・ポリシー

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

1-3-2 大学院教育の成果とその検証

・平成24年度化学専攻在籍学生数

(平成24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24年度	38 (12)	2
平成23年度	49 (7) {2}	9 (4) {3}
平成22年度	7 (1) {4}	3
平成21年度		
平成20年度	1	2
平成19年度以前		1
合 計	95 (20) {6}	17 (4) {3}

() 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24年度生	河内	山本
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24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							江幡, 相田, 山崎
	無機化学概論	2	2							水田, 西原, 石坂
	有機化学概論	2	2							灰野
	化学特別研究	2	6	2	6	2	6	2	6	各教員
選 択	現代英語			2	2					小島
	構造物理化学 I	2	2							開講しない
	構造物理化学 II			2	2					井口
	固体物性化学 I	2	2							井上, 西原
	固体物性化学 II			2	2					井上, 西原
	錯体化学 I	2	2							開講しない
	錯体化学 II			2	2					開講しない
	分析化学 I	2	2							開講しない
	分析化学 II			2	2					開講しない
	構造有機化学 I	2	2							灰野
	構造有機化学 II			2	2					灰野
	光機能化学			2	2					齋藤(自然科学研究支援開発センター)
	放射線反応化学	2	2							開講しない
	量子化学			2	2					開講しない
	反応物理化学 I	2	2							開講しない
	反応物理化学 II			2	2					開講しない
	反応有機化学 I	2	2							開講しない
	反応有機化学 II			2	2					開講しない
	有機典型元素化学 I	2	2							河内
	有機典型元素化学 II			2	2					山本
	有機合成化学	2	2							開講しない
	計算情報化学	2	2							開講しない
	計算化学演習			2						開講しない
	物質科学特論			2	2					開講しない
	量子情報科学	2	2							開講しない
	計算機活用特論	2								開講しない
	計算機活用演習	2								開講しない
	構造物理化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	江幡, 井口, 岡田, 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), 石坂, 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, 勝本	
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, 高木	
有機典型元素化学セミナー	1	2	1	2	1	2	1	2	山本, 河内, 小島	
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			水田	
特 別 講 義	電子状態理論と化学反応への応用 (1 単位, 後期集中)									酒井 章吾(岐阜大学)
	超重元素化学 (1 単位, 前期集中)									永目 諭一郎(日本原子力研究開発機構)
	生物有機化学特論 (1 単位, 前期集中)									西川 俊夫(名古屋大学)

・平成24年度化学専攻開講授業科目

	担当教員	授業のキーワード
現代英語	小島	英語、ヒアリング、リスニング、熟語
構造物理化学Ⅱ	井口	分子の構造、回転・振動・電子状態、分子分光
固体物性化学Ⅰ	井上、西原	固体物性、複合物性、分子磁性、分子伝導性、X線、回析現象
固体物性化学Ⅱ	井上、西原	固体複合物性、磁性、伝導性、誘電性、光学物性
構造有機化学Ⅰ	灰野	超分子化学、分子認識、機能材料化学
構造有機化学Ⅱ	灰野	構造有機化学、有機計算化学
光機能化学	齋藤	
有機典型元素化学Ⅰ	河内	典型元素の化学とそれに関連する多核NMR
有機典型元素化学Ⅱ	山本	15族、16族典型元素化学、超原子価化合物

・各研究グループの在籍学生数

(平成24年5月現在)

研究グループ名	M1	M2	D1	D2	D3	D4	D5
化学専攻分子構造化学講座							
構造物理化学研究グループ	4	6					
固体物性化学研究グループ	5	7	1	1			
錯体化学研究グループ	4	5					
分析化学研究グループ	2	4		1			
構造有機化学研究グループ	5	5	1				
光機能化学研究グループ	3	5		1			
化学専攻分子反応化学講座							
反応物理化学研究グループ	1	4		1			
有機典型元素化学研究グループ	6	6	2	1			
反応有機化学研究グループ	5	7		1			
量子化学研究グループ	4				3	2	1
放射線反応化学研究グループ	2	3		1			
計	41	52	4	7	3	2	1

・博士課程修了者の進路

(平成24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	47(5)	26(4)	3(0)	1(0)	30(4)	4(1)	0	4(1)	8(0)	1(0)	—	4(0)
後期修了*	3(0)	0	0	1(0)	1(0)	0	0	0	—	0	0	2(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⁾	96
博士課程後期 ⁽²⁾	11
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	2

(2012(H24)年度の発表について記載:2012(H24)年4月から2013(H25)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⁾	29
博士課程後期 ⁽²⁾	11
博士課程前期・後期共 ⁽³⁾	1

(2012(H24)年度の発表について記載:2012(H24)年4月から2013(H25)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

伊藤 朋香	プロリン骨格を有する新規不斉光触媒の合成とその利用	反応有機化学
井上 達也	7員環を2つ縮環した新規三座配位子の合成と超原子価化合物への展開	有機典型元素化学
今田 康公	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と超原子価16族元素ラジカル合成	有機典型元素化学
上田 祐子	フェニルイソオキサゾールで拡張した π 平面分子の自己集合	構造有機化学
大久保 泰裕	準古典的軌跡計算による $O_2(v=v')+N_2(v=0)$ 系の振動緩和過程の理論的研究	反応物理化学
岡本 一茂	1,3-ジラジカル骨格を持つテトララジカル発生と最安定スピン多重度の研究	反応有機化学
奥野 諒	ガラス表面における逆ミセルの吸着挙動とポリアミドのナノ構造体形成の顕微鏡観測	分析化学
小澤 周平	ラビングによる有機半導体ポリマーの配向と光物性研究	光機能化学
金子 政志	密度汎関数計算による1, 2-ビス(4-ピリジル)エタンで架橋した鉄(II)集積型錯体のスピントロニクス挙動の研究	放射線反応化学
北尾 大樹	メキシキ基を含むフェニルニトロニトロキシドラジカルを用いたキラルな遷移金属錯体の合成、構造及び磁気的性質	固体物性化学
木村 尚弘	大環状4座ホスフィン配位子を用いた11族金属2核錯体によるN複素環化合物の取り込み反応及び CO_2 の変換反応	錯体化学
國塩 和久	$[Ni(dmit)_2]$ 分子性スピンラダーへの化学的・物理的キャリアドーピング	固体物性化学
熊谷 将紀	オキサアルキル鎖を疎水基に持つ界面活性剤の構造と物性	構造物理化学
黄 博	神経学応用可能な新たな二光子吸収発色団設計に基づく水溶性グルタメートケージド化合物の合成と光反応性	反応有機化学
高下 慶典	複数の解離経路を有するニトロメタンの紫外光解離ダイナミクスに関する研究	反応物理化学
古賀 和樹	広島大学東広島キャンパス周辺における河川水中の環境放射能の変動	放射線反応化学
古城 大祐	芳香族アミンを用いた2次元ペロブスカイト型化合物の合成と物性	固体物性化学
今野 大輔	固体結晶内へのイオン・分子揺らぎ機構の導入と機能発現	固体物性化学
島田 大樹	Methyl-4-hydroxy cinnamateのトランス-シス光異性化に関する研究	構造物理化学
住田 聖太	散乱分布画像観測法を用いたヨウ化アリルの紫外光解離ダイナミクスの研究	反応物理化学
高橋 慎太郎	メカノケミカル法による可視光応答型 TiO_2 光触媒の創製とその触媒活性	光機能化学
梅野 英二郎	$X+CH_3X \rightarrow XCH_3+X^-$ S_N2 反応系における微視的溶媒効果の研究	構造物理化学

戸屋裕也	5配位および6配位リン化合物の研究	有機典型元素化学
豊川裕也	Aerosol OT/水/イソオクタン系における球状タンパク質の溶媒抽出と構造変化	分析化学
中野佑紀	新規Cu(II)-CO ₃ 系スピラダー錯体の構造と物性評価	固体物性化学
西尾一志	Si量子ドットを用いたハイブリッドLEDの作製とその電流電圧特性およびELスペクトル	光機能化学
能美耕太郎	キラルな構造を有するタングステン(V)を含む遷移金属シアノ架橋型錯体の合成と物性	固体物性化学
萩森公一	ピリジル基を導入した新規な三座配位型カルボジホスホラン配位子とその遷移金属錯体の合成	錯体化学
橋本佑介	液液界面への可視レーザー光照射による金ナノ粒子の生成挙動の <i>in situ</i> 顕微測定とその解析	分析化学
馬場美智子	ナフチレンで固定されたジホスフィン配位子を架橋とした金及び白金2核錯体の合成と配位子の立体効果	錯体化学
原田理	オルト位にホウ素またはケイ素原子を有するフェニルメタリル化合物の合成と応用	有機典型元素化学
平井裕子	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)ベンゼンの会合により誘起される刺激応答性高次超分子ナノ構造の制御	構造有機化学
平尾岳大	カリックス[5]アレンとフラレンの分子認識を利用した主鎖型超分子フラレンポリマーネットワークの構築	構造有機化学
松田卓也	逆ミセル系ルミノール化学発光へのイオン液体の影響と微量ロジウム定量法の開発	分析化学
三島愛	一重項2,2-ジアルコキシ-1,3-ジラジカルの反応性に及ぼす窒素原子の効果	反応有機化学
宮崎聡	Siナノ粒子とP3HTによるハイブリッド太陽電池の作製	光機能化学
宮崎康典	ピコ秒時間分析赤外-紫外ポンプ-プローブ分光法によるフェノール-水コンプレックスの振動エネルギー緩和についての研究	構造物理化学
森川慶樹	異常な電子配置を持つジラジカルの分子設計と化学的性質	反応有機化学
森島史弥	estrogenの構造とその水素結合様式に関する研究	構造物理化学
保田将吾	多座ホスフィン配位子を用いた白金ポリヒドリド錯体の合成とCO ₂ の還元	錯体化学
安原大樹	カルコゲンで分子内架橋した二核ルテニウム-フルバレン錯体の合成と反応	放射線反応化学
山下潤	S(¹ D)+OCS反応による振動励起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
湯浅隆寛	ホスファゼン骨格を有する鉄メタラサイクルの合成、構造及び反応性	錯体化学
吉水稔	ベンゼン誘導体のCH伸縮振動のFermi共鳴と分子内振動エネルギー再分配(IVR)に関する研究	構造物理化学

1-3-6 博士学位

授与年月日を〔 〕内に記す。

三枝 俊亮

〔平成25年3月23日〕(甲)

Quantum Chemical Study on Dipole Moments of Amino Acid Residues

(アミノ酸残基の双極子モーメントに関する量子化学的研究)

主査：相田 美砂子 教授

副査：江幡 孝之 教授, 山崎 勝義 教授, 楯 真一 教授

1-3-7 TA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（TA）のシステムを適用している。教員による教育的配慮の下に化学科3年次必修の化学実験の教育補助業務を行わせることによって、大学院生の教育能力や教育方法の向上を図り、指導者としてのトレーニングの機会を提供する。

平成24年度のTA

氏名	担当授業科目	所属研究グループ	学年
今田 康公	化学実験	有機典型元素化学	M1
岸川 明生	化学実験	分子生物物理学	M2
小坂 有史	化学実験	反応有機化学	D2
今野 大輔	化学実験	固体物性化学	M2
菅原 峻	化学実験	有機典型元素化学	D1
石 遠	化学実験	有機典型元素化学	D1
張 笑	化学実験	固体物性化学	D1
土居 英男	化学実験・情報活用演習	量子化学	D3
土手 遙	化学実験	放射線反応化学	D2
橋本 佑介	化学実験	分析化学	M2
韓 晶	化学実験	固体物性化学	D2
平井 裕子	化学実験	構造有機化学	M2
平尾 岳大	化学実験	構造有機化学	M2
福圓 真一	化学実験	有機典型元素化学	D2
松田 唯	化学実験・情報活用演習	自己組織化学	M2
宮崎 康典	化学実験	構造物理化学	M2
安原 大樹	化学実験	放射線反応化学	M2
叶 建准	化学実験	反応有機化学	M2
吉岡 裕司	化学実験	分子生物物理学	M2
平松 尚吾	(国際センター) 日韓共同理工系学部 留学生予備教育化学	有機典型元素化学	M1

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

・学生の受賞実績

菅原 峻	第10回ヘテロ原子化学国際会議 (ポスター賞)
住田聖太	第28回化学討論感応会 (ベストポスター賞)
河野七瀬	The Journal of Physical Chemistry (JPC Poster Awards)
時信智史	第49回アイソトープ・放射線研究発表会 (若手最優秀講演賞)
三島 愛	第23回基礎基礎有機化学討論会 (ポスター賞)
益本 修	第6回分子化学討論会 (優秀ポスター賞)
奥野 涼	第50回フローインジェクション分析講演会
赤瀬 大	The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (The Best Student Presentation Award)
森島史弥	The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (The Best Student Presentation Award)
三島 愛	The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Student Award)
山下 潤	The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Student Award)
馬 姜	The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Student Award)
辛 韵子	The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Student Award)

・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 (R A) 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24年度のR A

大学院生氏名	赤瀬 大	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	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	小坂 有史	所属研究グループ	反応有機化学
学年	D 2	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	石 遠	所属研究グループ	有機典型元素化学
学年	D 1	指導教員	山本 陽介 教授
研究プロジェクト名	新規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		

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 2	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	張 笑	所属研究グループ	固体物性化学
学年	D 1	指導教員	井上 克也 教授
研究プロジェクト名	新規分子スピンドラーの合成と物理制御		

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 3	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	有機分子、有機・無機ハイブリッド分子と水分子との相互作用に関する理論化学的研究		

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 2	指導教員	中島 覚 教授
研究プロジェクト名	集積型錯体のスピントロスオーバー挙動		

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ス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 3	指導教員	相田 美砂子 教授
研究プロジェクト名	蛋白質の双極子モーメントに関する理論的化学研究		

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。また, 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。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24年度の研究活動は次のとおりである。

- ① ホスト-ゲスト錯体の構造や分子認識の研究を精力的に行っている。極低温条件下で気相のホスト-ゲスト錯体を生成し, 種々のレーザー分光により錯体の電子スペクトルや分子種を選別した赤外スペクトルを観測し, 量子化学計算との比較から包接構造の決定や包接機構を明らかにしつつある。この研究は, スイス・ローザンヌ連邦工科大学とも共同研究を行っており, 数々の成果を挙げている。
- ② ホスト-ゲスト錯体イオンの構造研究のための, エレクトロスプレー/極低温イオントラップ・レーザー分光装置の立ち上げを開始した。
- ③ $[I-(CH_3I)(H_2O)_n]$ 錯体を気相中に生成し, S_N2 反応における溶媒効果の微視的な解明をパシフィックノースウエスト国立研究所との共同研究で行った。この研究成果は, アメリカ化学会広報誌C&ENに紹介された。[2013.2.25]
- ④ 金薄膜上にクラウンエーテルを化学吸着させ, 金属イオンとの包接錯体を形成する様子を赤外分光実験で観測することに成功した。
- ⑤ 電子衝撃法により内殻励起したアニリンの質量スペクトルデータを線形重回帰分析し, 解離イオン種の帰属を確定させ, 解裂メカニズムを考察した。このエネルギー領域においてもベンゼン環の七員環または五員環へのパーミュテーションが起こっていることが示唆された。
- ⑥ 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実施した。サイト特異的解離に関するさらなる知見を得るため, 炭素内殻領域でオーজে電子と解離イオンとの同時計測を行った。 σ_{CC} *共鳴励起で取得したオージェスペクトルに, 他のスペクトルと比べて特に増強したピークが観察された。これは σ_{CC} 電子がオージェ過程に関与する遷移に帰属されるピークで, このときに CF_2^+ や $C_2HF_3^+$ などの解離イオンと高い相関が見られた。この系では共鳴増強がサイト特異的解離に関係していると考えられる。
- ⑦ 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, Yoshiya Inokuchi, 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, T. Rizzo (2012)

◎“UV and IR Spectroscopy of Cold 1,2-Dimethoxybenzene Complexes with Alkali Metal Ions”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **14**, 4457-4462

Yoshiya Inokuchi, Oleg V. Boyarkin, Ryoji Kusaka, Takeharu Haino, Takayuki Ebata, Thomas R. Rizzo (2012)

◎ “Ion Selectivity of Crown Ethers Investigated by UV and IR Spectroscopy in a Cold Ion

Trap” *J. Phys. Chem. A*, **116**, 4057-4068

Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Takeharu Haino, Takayuki Ebata (2012)

- ◎ “Structures of (3*n*-crown-*n*)-Phenol (*n*=4, 5, 6, 8) Host-Guest Complexes: Formation of a Uniquely Stable Complex for *n*=6 via Collective Intermolecular Interaction”
J. Phys. Chem. Letters, **3**(10), 1414–1420

Daiki Shimada, Ryoji Kusaka, Yoshiya Inokuchi, Masahiro Ehara, Takayuki Ebata (2012)

- ◎ “Nonradiative decay dynamics of methyl-4-hydroxycinnamate and its hydrated complex revealed by picosecond pump–probe spectroscopy”
Phys. Chem. Chem. Phys., **14**, 8999–9005

Keiji Oshimo, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata, Koichi Ohno (2012)

- ◎ “Anionic Polymerization Mechanism of Acrylonitrile Trimer Anions: Key Branching Point between Cyclization and Chain Propagation”
J. Phys. Chem. A **116**, 7937-7942

Fumiya Morishima, Yoshiya Inokuchi, Takayuki Ebata (2012)

- ◎ “Laser Spectroscopic Study of β -Estradiol and Its Monohydrated Clusters in a Supersonic Jet”
J. Phys. Chem. A **116**, 8201-8208

K. Okada, T. Terashima, A. Suemitsu, I. H. Suzuki, S. Nagaoka, K. Tabayashi, and Y. Tamenori (2012)

- “Photofragmentation of the K-shell excited perfluorocyclobutane probed by a multiple-ion coincidence technique”
J. Phys. Conf. Ser., **388**, 022030

○著書

Takayuki Ebata, Ryoji Kusaka and Yoshiya Inokuchi (2012)

- ◎“Vibrational Spectroscopy of Gas Phase Functional Molecules and Their Complexes Cooled in Supersonic Beams”, *Vibrational Spectroscopy* Chap. 3, (ed. by Dominique de Caro) InTech, pp. 79-114

○総説

江幡孝之, 井口佳哉 (2012)

- ◎「包接錯体のレーザー分光 –ホスト–ゲスト錯体の包接機構の分子レベルでの解明を目指して –」*Molecular Science* **6**, 総ページ数 16 頁

○国際会議

T. Ebata: Structure and photo-physics of host-guest complexes and bio-related molecules in the gas phase, 1st symposium on weak molecular interactions (March 5- 6, 2013, University of Pécs, Hungary) (招待講演)

T. Ebata: Structure and photo-physics of host-guest complexes and biorelated molecules in the gas phase, Core-to-core International Symposium on Ionization Induced Switching (March 15, 2013, University of Marseille, France) (招待講演)

T. Ebata, D. Shimada, R. Kusaka, Y. Inokuchi : Nonradiative decay dynamics of methyl-4-hydroxycinnamate and its monohydrated complex revealed by picosecond pump-probe spectroscopy, 67th Ohio state university international symposium on molecular spectroscopy (June 21-25, 2012, Columbus, Ohio, USA) (一般講演)

T. Ebata: Effect of hydrogen-bonding on the trans to cis isomerization of methyl-4-hydroxycinnamate studied by picosecond pump-probe spectroscopy, Gordon Research Conference on atomic and molecular interactions (July 15-20, 2012, Stonehill college, MA, USA) (ポスター)

Y. Inokuchi, O. V. Boyarkin, R. Kusaka, T. Haino, T. Ebata, T. R. Rizzo: UV and IR spectroscopic studies of cold alkali metal ion-benzocrown ether complexes in the gas phase, 67th Ohio state university international symposium on molecular spectroscopy (June 21-25, 2012, Columbus, Ohio, USA) (一般講演)

Y. Miyazaki, Y. Inokuchi, T. Ebata : Deuteration effect study on the vibrational dynamics of

- phenol-water complex by picosecond time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopy in a supersonic molecular beam, 67th Ohio state university international symposium on molecular spectroscopy (June 21-25, 2012, Columbus, Ohio, USA) (一般講演)
- R. Kusaka, Y. Inokuchi, T. Ebata : Picosecond time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopic study on vibrational energy relaxation of benzene dimer and trimer in the CH stretching region, 67th Ohio state university international symposium on molecular spectroscopy (June 21-25, 2012, Columbus, Ohio, USA) (一般講演)
- F. Morishima, Y. Inokuchi, T. Ebata : The spectroscopic study on estrogen and its hydrated clusters in a supersonic jet, 67th Ohio state university international symposium on molecular spectroscopy (June 21-25, 2012, Columbus, Ohio, USA) (一般講演)
- F. Morishima, Y. Inokuchi, T. Ebata : The spectroscopic study of estrogen and its hydrogen bonding abilities, The 9th Nano Bio Info chemistry symposium and 6th Japanese-Russian seminar, (Dec. 8-9, 2012, Hiroshima, Japan) (一般講演)
- D. Shimada, Y. Inokuchi, M. Ehara, T. Ebata : Effect of hydrogen-bonding in the trans to cis photoisomerization of methyl-4-hydroxycinnamate, The 9th Nano Bio Info chemistry symposium and 6th Japanese-Russian seminar, (Dec. 8-9, 2012, Hiroshima, Japan) (一般講演)
- K. Soga, T. Ebata, Y. Inokuchi : Fluorescence observations of tryptophan ions generated by ESI and study of electrosprayed droplets, The 9th Nano Bio Info chemistry symposium and 6th Japanese-Russian seminar, (Dec. 8-9, 2012, Hiroshima, Japan) (一般講演)
- Y. Miyazaki, Y. Inokuchi, T. Ebata, M. Petković : Vibrational energy relaxation of phenol-water complex studied by picosecond time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopy, The 9th Nano Bio Info chemistry symposium and 6th Japanese-Russian seminar, (Dec. 8-9, 2012, Hiroshima, Japan) (一般講演)
- K. Okada, T. Terashima, A. Suemitsu, I. H. Suzuki, S. Nagaoka, K. Tabayashi, and Y. Tamenori: Photofragmentation of perfluorocyclobutane at the C and F K-edges. The 12th International Conference on Electronic Spectroscopy and Structure (16–21 September 2012, Saint-Malo, France) (ポスター)

○国内学会

- 宮崎泰典, 井口佳哉, 江幡孝之 : ピコ秒赤外-紫外ポンププローブ法によるフェノール-水クラスターの振動エネルギー緩和過程の解析. 第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (一般講演)
- 島田大樹, 井口佳哉, 江幡孝之, 江原正博 : Methyl-4-hydroxycinnamate のトランス-シス光異性化におよぼす水素結合効果. 第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (一般講演)
- 森島史哉, 井口佳哉, 江幡孝之 : 超音速ジェット中でのレーザー分光を用いたestrogenの水素結合構造に関する研究. 第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (一般講演)
- 曾我和毅, 井口佳哉, 江幡孝之 : エレクトロスプレー法を用いたイオンクラスターの蛍光検出およびイオン検出分光の試み. 第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (ポスター)
- 水内喬裕, 池田俊明, 灰野岳晴, Guo Hao, 木村哲就, 古谷祐詞, 江幡孝之, 井口佳哉 : 金薄膜上に化学吸着させたクラウンエーテル金属錯体の赤外分光. 第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (ポスター)
- 梶野英二郎, 土井啓右, 井口佳哉, 江幡孝之 : Br⁻(CH₃Br) 錯体およびI⁻(CH₃I) 錯体の構造におよぼす水分子溶媒和効果の研究. 第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (ポスター)
- 吉水稔, 井口佳哉, 江幡孝之 : 赤外-紫外二重共鳴分光法によるフルオロベンゼンのCH伸縮振動状態のFermi共鳴の解析. 第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (ポスター)
- Y. Miyazaki, Y. Inokuchi, T. Ebata : Study on the vibrational dynamics of phenol and its monohydrated complex by picosecond time-resolved IR-UV pump-probe spectroscopy, 第28回化学反応討論会 (2012年6月, 福岡) (ポスター)
- K. Okada, T. Nakashima, H. Katayanagi, A. Suemitsu, and K. Mitsuke: Dissociative photoionization of perfluorocyclobutane studied by mass-resolved photoion imaging. 第28回化学反応討論会 (2012年6月, 福岡) (ポスター)

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部4年生 ⁽¹⁾	0	1
博士課程前期 ⁽²⁾	6	7
博士課程後期 ⁽³⁾	1	0
博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾	0	0

○セミナー・講演会開催実績

江幡孝之, Sandor Kunsagi-Mate 教授(University of Pecs)による講演会開催(2012/9/13)

○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 (2007-2010)

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 (2009-)

江幡孝之, 分子科学会運営委員 (2012-)

・高大連携事業

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, 第26回化学反応討論会実行委員会委員 (2009-2010)

岡田和正, 第27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 (2013-)

・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

江幡孝之, 井口佳哉: 共同研究「長半減期核種の質量分析技術開発に向けた選択的イオン化法に関する研究」独立行政法人日本原子力研究開発機構(2012-)

○特許公報

福原幸一, 特許取得, 抑泡剤および可塑剤の製造方法、ならびに抑泡剤、および可塑剤, 特許第5223087

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内)

井口佳哉, 「金薄膜上に化学吸着させたクラウンエーテル-金属イオン包接錯体の赤外分光」自然科学研究機構分子科学研究所(2012)

○研究助成の受け入れ状況

井口佳哉, 「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」, 基盤研究(B), 科学研究費補助金, 日本学術振興会 (H21-H24)

井口佳哉, 「エレクトロスプレー法と光散乱を利用した, イオンのための簡便な分光システムの開発」, 挑戦的萌芽研究, 科学研究費補助金, 日本学術振興会 (H24-H25)

井口佳哉, 「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」, 倉田奨励金, 倉田記念日立科学技術財団 (H23-H24)

井口佳哉, 「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」, 基礎科学研究助成, 住友財団 (H23-H24)

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)

○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, H23-25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

○受賞状況 (学生)

森島史哉 (M2) : The Best Student Presentation Award, "The spectroscopic study of estrogen and its hydrogen bonding abilities" (第9回ナノ・バイオ・インフォ化学シンポジウム, 東広島, 2012)

○座長を行った学会・討論会の名称

江幡孝之, Gordon Research Conference on Atomic and Molecular Interactions (July 15-20, 2012, Stonehill College, MA, USA)

江幡孝之, 1st symposium on weak molecular interactions (March 5-6, 2013, Peés, Hungary)

岡田和正, 第28回化学反応討論会 (2012年6月, 福岡)

岡田和正, The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Higashi-Hiroshima, December 2012.

○その他特記事項

江幡孝之: 平成12年4月に大学間協定を締結したロシアオレンブルグ国立大学を訪問し, 広島大学の代表として桜の苗木を贈呈した。

井口佳哉, 江幡孝之: アメリカ化学会広報誌C&ENに研究成果 (SN2反応が阻害される理由の分子レベルでの解明) が紹介された[2013.2.25]

井口佳哉: 「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」により, 2012年9月~2013年1月までスイス・ローザンヌ連邦工科大学に客員研究員として滞在し, 超分子化合物の分光研究を行った。

岡田和正, 広島大学若手研究人材育成センター 研究科連絡WG (2009年度-)

福原幸一: 広島大学大学院理学研究科サイエンスカフェ代表として, 4件 (第18回「リズムや模様の化学」 [2012.6.23]、第19回「計算するアメーバの不思議」 [2012.7.28]、第20回「ヒッグス粒子ってなに？」 [2012.9.22]、第21回「地熱発電のしくみは? その可能性は？」 [2013.3.2]) のサイエンスカフェ事業を主催した。これに関連してNHKから取材を受け, NHKラジオ「ここはふるさと旅するラジオ」でサイエンスカフェ活動を紹介した [2012.5.9]

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した。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が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、新種の分子性スピラダー超伝導体の構築を目指した。

○発表原著論文

M. Mito, K. Iriguchi, H. Deguchi, J. Kishine, Y. Yoshida, and K. Inoue (2012) "Magnetic diagnostics using the third-harmonic magnetic response for a molecule-based magnet networked by a single chiral ligand", *J. Appl. Phys.*, **111** (10), 103914

T. Koyama, S. -I. Yano, Y. Togawa, Y. Kousaka, S. Mori, K. Inoue, J. -I. Kishine, J. Akimitsu (2012) "Unconventional Magnetic Domain Structure in the Ferromagnetic Phase of MnP Single Crystals", *J. Phy. Soc. Jpn.*, **81** (4), 043701

A. S. Ovchinnikov, V. E. Sinitsyn, I. G. Bostrem, Y. Hosokoshi and K. Inoue (2012) "Magnetization and spin gap in two-dimensional organic ferrimagnet BIPNNBNO", *J. Phy.:Condens. Matter*, **24** (30), 306003

Y. Togawa, T. Koyama, K. Takayanagi, S. Mori, Y. Kousaka, J. Akimitsu, S. Nishihara, K. Inoue, A. S. Ovchinnikov, and J. Kishine (2012) "Chiral Magnetic Soliton Lattice on a Chiral Helimagnet", *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 107202

新聞掲載: 日経産業新聞2/28朝刊 (9面)

Selected as APS's very best papers and APS Spotighting Exceptional Research on March 5, 2012.

T. Naito, T. Karasudani, S. Mori, K. Ohara, K. Konishi, T. Takano, Y. Takahashi, T. Inabe, S. Nishihara, K. Inoue (2012) "Molecular Photoconductor with Simultaneously Photocontrollable Localized Spins", *J. Am. Chem. Soc.*, **134**(45), 18656

JACS Spotlight

表紙に掲載

新聞掲載: 日経産業新聞2012年9月24日 夕刊

新聞掲載: 愛媛新聞2012年9月26日 朝刊

G. X. Liu, H. Zhou, X. C. Zha, S. Nishihara, X. M. Ren (2012) "Syntheses, crystal structures and physical properties of two unusual 4d-4f heterometallic coordination polymers", *Inorg.*

Chim. Acta, **387**, 308

- R. Y. Huang, G. X. Liu, H. M. Xu, S. Nishihara, X. M. Ren (2012) “Syntheses, Structures and Luminescent Properties of Zinc(II) and Cadmium(II) Complexes With the Ditopic Ligand 1,3-Bis(imidazol-1-ylmethyl)benzene”, *J. Chem. Cryst.*, **42(4)**, 416
- G. X. Liu, W. Guo, S. Nishihara, X. M. Ren (2012) “A Coordination Polymer With a (3,4)-Connected (62.8)2(62.84) 3D Network: Synthesis, Crystal Structure and Luminescent Properties” *Synth. React. Inorg. Met. -Org. Chem.*, **42(9)**, 1222
- X. J. Kong, C. Guo, G. X. Liu, Y. Wang, S. Nishihara (2012) “Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Properties of a 3d-3d Mixed Heterometallic Coordination Polymer” *Russ. J. Coord. Chem.*, **38(2)**, 134
- G. X. Liu, X. C. Zha, Y. Wang, S. Nishihara, X. M. Ren (2012) “Synthesis, Crystal Structure and Magnetic Properties of a Nickel(II) Coordination Polymer Based the V-Shaped Ligands”, *J. Inorg. Org. Polym. Mat.*, **22(1)**, 258
- G. X. Liu, H. Xu, H. Zhou, S. Nishihara, X. M. Ren (2012) “Temperature-induced assembly of MOF polymorphs: Syntheses, structures and physical properties”, *Crys. Eng. Commun.*, **14(5)**, 1856

○著書

Multifunctional Molecular Materials, Katsuya Inoue and Jun-ichiro Kishine, Chapter 4: Magnetism and Chirality, pp133-149, Pan Stanford Pub. 分担

○国内学会

北尾大樹, 秋田素子, 西原禎文, 井上克也: ニトロニルニトロキシドラジカルを用いたキラルな遷移金属錯体の合成、構造及び磁気的性質 錯体化学討論会 (2012年9月21~23日, 富山大学 五福キャンパス) (口頭発表)

張笑, 中野佑紀, 西原禎文, 井上克也: 新規分子性スピンドラダー化合物Cu₂(ClO₄)₂(CO₃)(H₂O)₆の合成と物性 錯体化学討論会 (2012年9月21~23日, 富山大学 五福キャンパス) (ポスター発表)

藤岡知徳, 西原禎文, 井上克也: 強誘電体プロピオン酸二カルシウム鉛をモデルとした新規マルチフェロイック物質合成の試み 錯体化学討論会 (2012年9月21~23日, 富山大学 五福キャンパス) (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: Fe₂Ge₃の単結晶育成と物性評価 日本物理学会 2012年秋季大会 (2012年9月18~21日, 横浜国立大学 (神奈川県)) (ポスター発表)

中野佑紀, 張笑, 西原禎文, 秋田素子, 井上克也: Cu(II)-CO₃スピンドラダー錯体の物性評価 第6回分子科学討論会 (2012年9月18~21日, 東京大学 本郷キャンパス) (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Polyoxometalateの構造と物性 第6回分子科学討論会 (2012年9月18~21日, 東京大学 本郷キャンパス) (口頭発表)

佐古渚, 西原禎文, 井上克也: [Ca₄Cl₂(H₂O)₈(CB[6])]₂Cl₆ · x(H₂O)塩内の水分子揺らぎの観測と機能発現 第6回分子科学討論会 (2012年9月18~21日, 東京大学 本郷キャンパス) (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: キラルな超分子カチオン[(pn)([18]crown-6)₂]を含む[Ni(dmit)₂]導電性錯体の合成と物性評価 第6回分子科学討論会 (2012年9月18~21日, 東京大学 本郷キャンパス) (ポスター発表)

能美耕太郎, 西原禎文, 秋田素子, 井上克也: W-Cuシアノ架橋型錯体を骨格としたキラル磁性体の合成と物性 第6回分子科学討論会 (2012年9月18~21日, 東京大学 本郷キャンパス) (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[Ni(dmit)₂]塩の構造と物性 第6回分子科学討論会 (2012年9月18~21日, 東京大学 本郷キャンパス) (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: 化学輸送法によるFeGe系化合物の単結晶作製と物性評価 「超低速ミュオン顕微鏡」領域会議 (2012年8月30、31日、9月1日, 北海道大学 理学部) (ポスター発表)

西原禎文, 中野佑紀, 張笑, 井上克也: 新規Cu-CO₃系スピンドラーの合成と磁気物性評価
「物質・デバイス領域共同研究拠点」研究会 (2012年6月18日, 北海道大学 電子化学
研究所) (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包接したPreyssler
型POMの合成と機能発現 「物質・デバイス領域共同研究拠点」研究会 (2012年6月18
日, 北海道大学 電子化学研究所) (口頭発表)

佐古渚, 西原禎文, 井上克也: cucurbit[n]urilに含まれた水分子の結晶内揺らぎの発現と物性
評価 「物質・デバイス領域共同研究拠点」研究会 (2012年6月18日, 北海道大学 電
子化学研究所) (口頭発表)

○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

講演会開催

井上克也、高輝度放射光研究施設利用者懇談会、「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

井上克也、高輝度放射光研究施設利用者懇談会、Spring8シンポジウム、磁性体への放射
光利用、(2012年1月28日) 一般

○社会活動・学外委員

学協会役員, 委員

井上克也、日本学術振興会特別研究員審査委員

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ス磁性研究会、
会長

井上克也、スペイン、Zaragoza大学、博士号審査委員長 (Cristina S. de Pipaon)

井上克也、インド、The MS University of Baroda、博士号審査委員

西原禎文、化学教育協議会広島支部幹事 (2011年～)

○国際共同研究・国際会議開催実績

井上克也、7th, Russia-Japan Workshop “Molecular Magnetism”, 組織委員, ロストフ・
ナ・ドヌ, 2012.9.8-11

○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

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内)

井上克也, 磁性領域共同研究「キラル磁性」(2004-)

西原禎文: 物質・デバイス領域共同研究拠点 (ナノシステム科学研究領域) 「ランタノイド
イオンを包接したPreyssler型POMの低温磁気物性評価」(2010-)

西原禎文: 物質・デバイス領域共同研究拠点 (物質創製開発研究領域) 「Cucurbituril
を含む機能分子材料の開発」(2012-)

○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-

西原禎文：University of Glasgow, Visiting Senior Researcher, 2012年10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

西原禎文，科学研究費補助金 基盤研究(B) (2011-2013)「イオン移動型ポリオキソメタレートを用いた新規機能創出」(代表)

西原禎文，平成24年度 産学連携若手研究者支援プログラム (2012)「多価金属イオン輸送を利用した次世代電極の創出」(代表)

西原禎文，藤井研究助成基金 (2010-2012)「超分子化学的手法による分子性スピンドラダー構造へのキャリアドーピング」(代表)

西原禎文，村田学術振興財団 (2012-2013)「分子性スピンドラダー構造へのキャリアドーピングとバンドフィリング制御」(代表)

西原禎文：物質・デバイス領域共同研究費(ナノシステム科学研究領域) (2010-)「ランタノイドイオンを包接したPreyssler型POMの低温磁気物性評価」(代表)

西原禎文：物質・デバイス領域共同研究費(物質創製開発研究領域) (2012-)「Cucurbiturilを含む機能分子材料の開発」(代表)

錯体化学研究グループ

スタッフ 水田 勉 (教授), 久米 晶子 (准教授), 久保 和幸 (助教)

○研究活動の概要

1. リン架橋多核錯体の反応

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。

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。この大環状金属錯体を二酸化炭素の還元に応用した。その結果、銅(I)および白金(II)のヒドリドフラグメントを内包した錯体が二酸化炭素をギ酸に還元できることを確認した。

ホスフィド架橋2核鉄錯体によるプロトン還元を目的として、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に用いて、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済む金属錯体触媒を開発することにも成功した。ナフタレン部位をフェロセンとした類縁体についても合成を行い、ナフタレンよりも立体的に優れた架橋配位子であることが示唆された。

2. 電気化学的刺激応答性錯体を用いた触媒反応制御

金属中心の酸化還元反応は、安定分子の活性化と結合形成に大きな役割を果たすと同時に、人間社会の基盤である電気エネルギーを、化学エネルギーと相互変換するための反応中心となる。しかし、これら金属錯体の合成的な価値と、エネルギー変換の側面は同時に論じられることはなかった。本研究では、金属錯体の合成的な有用性と、電極応答で化学結合を生成するリンクし、①錯体触媒を電気信号で刺激することで異なる別の反応を選択的に進行させることができるか②電気信号のパターンが反応効率・選択性を向上するパラメータとなるか、という点について研究を進めている。

3. 反応性リン配位子をもつ錯体

不飽和高周期典型元素化合物は極めて活性であり、不活性分子の変換反応に利用できると期待されている。本研究では、このような化合物を反応性配位子として遷移金属錯体に導入し、新規な金属-配位子間協奏反応の開発を目指している。現在、P=B, P=C, P=N, P=O結合等を有する有機リン化合物に注目し、これらの反応性配位子を導入した後周期遷移金属錯体 (Fe, Ru, Rh, Au, Ag, Pt等) の合成を検討している。さらにこれらの遷移金属錯体を用いた不活性小分子の変換反応を検討中である。

○発表原著論文

○発表原著論文

K. Kubo, T. Kawanaka, M. Tomioka, T. Mizuta, (2012) ©Synthesis and Crystal Structures of P-Iron-Substituted Phosphinoborane Monomers. *Organometallics*, **31**(5), 2026-2034.

Y. Tanimoto, Y. Ishizu, K. Kubo, K. Miyoshi, T. Mizuta, (2012) © Synthesis of [2]ferrocenophanes containing trivalent diphosphine units. *J. Organomet. Chem.*, **713**, 80-88.

T. Kusamoto, K. Takada, R. Sakamoto, S. Kume, H. Nishihara, (2012) Ferrocene-Dithiolene Hybrids: Control of Strong Donor-Acceptor Electronic Communication to Reverse the Charge Transfer Direction. *Inorg. Chem.*, **51**(22) 12102-12113

M. Nishikawa, K. Nomoto, S. Kume, H. Nishihara, (2012) Reversible Copper(II)/(I) Electrochemical Potential Switching Driven by Visible Light-Induced Coordinated Ring Rotation. *J. Am. Chem. Soc.*, **134**(25) 10543-10553

K. Takahashi, Y. Hasegawa, R. Sakamoto, M. Nishikawa, S. Kume, E. Nishibori, H. Nishihara, (2012) Solid-State Ligand-Driven Light-Induced Spin Change at Ambient Temperatures in

○著書

巽 和行, 西原 寛, 穂田宗隆, 酒井 健, 石井洋一, 石田 斉, 上野圭司, 尾関智二, 加藤昌子, 棚瀬知明, 坪村太郎, 長谷川美貴, 水田 勉, ハウスクロフト無機化学 (上) (下) 東京化学同人 2012.

○国際会議

T. Mizuta, Y. Teramoto, K. Kubo: PhP—PPh Group Bound to 1,8-Positions of Naphthalene: Preparation of Cis Isomer and Synthesis of Binuclear Complex. The XXV International Conference on Organometallic Chemistry (Sep. 2012, Lisbon, Portugal) (一般講演)

M. Baba, Y. Teramoto, K. Kubo, T. Mizuta: P-P Group Bound to 1,8-Positions of Naphthalene: Preparation of Cis Isomer and Synthesis of Binuclear Complex The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2012年12月, Higashi-Hiroshima) (一般講演)

S. Yasuda, T. Mizuta: Synthesis of tetrahydridoplatinum complex bound in enlarged tetraphosphamacrocycle and its reaction with CO₂. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2012年12月, Higashi-Hiroshima) (一般講演)

T. Mizuta: Syntheses of Tetrahydridodiplatinum and Dihydridodicopper Complexes Bound in Enlarged Tetraphosphamacrocycle and Their Reaction with CO₂, 2nd International Symposium on Molecular Activation, (Nov. 2012, Nara, Japan) (ポスター)

S. Kume, Y. Yusuke, Takara, H. Nishihara: Electron Transfer of Copper(I) Center Triggered by Rotational Mechanical Ligand, The "40 International Conference on Coordination Chemistry (Sep. 2012, Valencia, Spain) (ポスター)

M. Nishikawa, K. Nomoto, S. Kume, H. Nishihara: Cu(II)/(I) Redox Potential Switching Driven by Light-Induced Coordinated Ring Rotation, The "40 International Conference on Coordination Chemistry (Sep. 2012, Valencia, Spain) (ポスター)

○国内学会

水田 勉: 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CO₂との反応 新学術領域研究「分子活性化」第2回公開シンポジウム, 2012年5月, 金沢歌劇座 (石川県金沢市) (一般講演)

萩森公一, 久保和幸, 水田 勉: リン上に配位性置換基を導入した新規なカルボジホスホラン配位子とその遷移金属錯体の合成 第62回錯体化学討論会 (2012年9月, 富山市) (一般講演)

西川道弘, 野元邦治, 久米晶子, 西原 寛: 配位環反転を介した可視光一銅(II)/(I)レドックス特性変換の条件依存性 第62回錯体化学討論会 (2012年9月, 富山市) (一般講演)

興津寛幸, 久保和幸, 水田 勉: 0価炭素で架橋されたヘテロ多核錯体の合成と反応性 日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

山田仁美, 池田俊明, 水田 勉, 灰野岳晴: ビスカリックス[4]レゾルシンアレーンの改良合成と超分子ポリマーの開発 日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

大野 晃, 川中伴弘, 久保和幸, 水田 勉: メタラホスフィンボラン Cp*(CO)₂M[P(Ph)=B(Mes)₂] (M = Fe, Ru) の合成, 構造ならびに反応性 日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (ポスター)

木村尚弘, 小澤賢伯, 久保和幸, 水田 勉: 大環状4座ホスフィン2核白金及び銅ヒドリド錯体の合成 第59回有機金属化学討論会 (2012年9月, 吹田市) (ポスター)

木村尚弘, 小澤賢伯, 水田 勉: 大環状リ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9回ホスト・ゲストシンポジウム (2012年5月, 札幌市) (ポスター)

馬場美智子, 久保和幸, 久米晶子, 水田 勉: 二つのナフタレンでP-P間を強固に固定したジホスフィン配位させた金及び白金二核錯体の合成とその性質 第62回錯体

- 化学討論会 (2012年9月, 富山市) (ポスター)
- 湯浅隆寛, 久保和幸, 水田 勉: ホスファゼンを基本骨格とする鉄メタラサイクルの構造と反応性 第62回錯体化学討論会 (2012年9月, 富山市) (ポスター)
- 岩知道優香, 寺本裕一, 久保和幸, 久米晶子, 水田 勉: 1,1'-フェロセニ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 第62回錯体化学討論会 (2012年9月, 富山市) (ポスター)
- 服部陽平, 西川道弘, 久米晶子, 西原 寛: 4,4'-ジメチル-2,2'-ビピリミジンで架橋された銅二核錯体の配位異性と物性 第62回錯体化学討論会 (2012年9月, 富山市) (ポスター)
- 萩森公一, 久保和幸, 水田 勉: 新規な NCN ピンサー型カルボジホスホラン配位子とその遷移金属錯体の合成 第2回 CSJ 化学フェスタ 2012 (2012年10月, 東京都) (ポスター)
- 保田将吾, 小澤賢伯, 久保和幸, 久米晶子, 水田 勉: 大環状四座ホスフィン配位子を用いた白金ポリヒドリド錯体による二酸化炭素—メタノール変換反応 第2回 CSJ 化学フェスタ 2012 (2012年10月, 東京都) (ポスター)
- 興津寛幸, 久保和幸, 水田 勉: 0 価炭素で架橋されたヘテロ多核金属錯体の合成 第2回 CSJ 化学フェスタ 2012 (2012年10月, 東京都) (ポスター)
- 大野 晃, 川中伴祐, 久保和幸, 水田 勉: メタラホスフィノボラン (C₅Me₅)(CO)₂FeP(Ph)B(Mes)₂ による小分子活性化反応 第2回 CSJ 化学フェスタ 2012 (2012年10月, 東京都) (ポスター)
- 久米晶子: 配位子間相互作用で保護された銅—ハロゲン化物クラスターの発光挙動 日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (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	0
博士課程前期	3	13
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, 久枝良雄教授 (九州大学大学院工学研究院) 講演会
「酵素に学ぶ触媒設計: バイオインスパイアード触媒—物質変換と環境浄化への挑戦—」
日時: 2012年6月19日 (火) 14:00-
場所: 理学部E002講義室
- 水田 勉, Prof. Eduardo N. dos Santos (Federal University of Minas Gerais, Brazil)
講演会
「Adding value to naturally occurring monoterpenes and phenylpropenoids employing transition-metal catalyzed reactions」
日時: 2012年10月5日 (金) 15:00-
場所: 広島大学理学部B棟3階, B305教室

○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 (2006-2010)
- 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)
- 水田 勉, 日本化学会 CSJ化学フェスタ実行委員会委員 (2012-)

久米晶子, 錯体化学会 錯体化学会将来計画員会委員 (2010-2011)

• 高大連携事業

- 水田 勉, SPP 鳥取県立鳥取東高等学校 (2002年9月, 鳥取)
- 水田 勉, SSH 鳥取県立鳥取東高等学校自然科学実験 (2003-2010年9月, 広島大学)
- 水田 勉, SSH 鳥取県立鳥取東高等学校自然科学特別講義 (2003-2005年9月, 鳥取)
- 水田 勉, 理数科学夏季セミナー (2003年8月, 広島大学)
- 水田 勉, SANbeスーパーサイエンスセミナー (2005年12月, 島根)
- 水田 勉, 広島県立神辺旭高等学校 模擬授業 (2009年10月)
- 水田 勉, 自然科学実験セミナー鳥取県立鳥取東高等学校 (2011-2012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11月, 鳥取)
- 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 (2011-2012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CO₂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

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, 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ける著しい発展とともに, 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での化学種の相互作用に関する情報を得る方法論および計測技術が重要となっている。また, ナノ・マイクロ微小域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。一方, 微小域の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や液滴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24年度の研究成果を以下に掲げる。

1. ナノ微小域における特異な反応性と新規なフロー微量計測法の開発に関する研究

(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とルミノールの逆ミセルメディアCL検出をオンラインで組み合わせたロジウムフローインジェクション(FI)定量法を開発し, 実試料への適用を検討した。また, 当研究グループにて確立したローダミンB-セリウム系の逆ミセルメディアCL法についても, 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FI-CL分析システムのオンライン化を達成し, アンチモンの酸化数別定量に適用した。

(b) 逆ミセルの吸着挙動を利用したガラス表面でのポリアミドのナノ構造体の調製法に関する研究: 自作したフローセルのガラス窓板表面へ逆ミセルを吸着させる方法を確立し, 吸着逆ミセルを反応場としてポリアミドのナノ構造体を調製するフローシステムを開発した。さらに, 光学顕微鏡を用いた位相差観察および顕微散乱法による観測により, ポリアミドの形成を確認し, AFM測定を行って, そのナノ構造体の形状の特徴を明らかにした。

2. エアロゾル微粒子系のレーザー捕捉・顕微分光

雲は, ミクロな水滴または氷の粒の集合体である。光ピンセットの手法を使うと, 『大気中に浮遊するミクロな水滴を非接触で操る』ことが出来る。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。固体表面に接すると直ちに凍ってしまうため安定に保持することが極めて困難であった過冷却微小水滴を, レーザー光の放射圧を用いて空中の一点に非接触で静止させ, 水滴が凍結する様子を世界で初めて観測することに成功した。また, 自然界の雲粒には硫酸アンモニウムが溶解していることが知られている。本実験手法を駆使し, 過冷却水滴の凝固温度の硫酸アンモニウム濃度依存性を精密に計測したところ, 凝固温度は従来の予想よりも低いことが示唆された。

3. 電気加熱気化-誘導結合プラズマ原子スペクトル分析

近年注目されている新材料の一つである銀ナノ粒子は, その表面に付着したケイ素やイオウなどの不純物が有機リン系分散剤の吸着を阻害することで溶媒中での分散安定性において悪影響を受ける。銀ナノ粒子中の不純物を分析する場合の前処理には, ケイ素がケイ酸として沈殿するため溶解されない, リンやイオウも揮散により損失する, という問題点がある。そこで, タングステン炉を用いた加熱気化装置を併用するICP発光分析法により, 測定前の前処理を一切行わずにナノ粒子粉末のまま超微量のケイ素, リン, イオウの濃度を直接測定できる定量法を開発した。

○発表原著論文

Y. Suzuki, S. Ishizaka, and N. Kitamura (2012) Spectroscopic studies on the photochemical

decarboxylation mechanisms of synthetic pyrethroids. *Photochem. Photobiol. Sci.*, **11**(12), 1897-1904.

- S. Akatsu, Y. Kanematsu, T. Kurihara, S. Sueyoshi, Y. Arikawa, M. Onishi, S. Ishizaka, N. Kitamura, Y. Nakao, S. Sakaki, and K. Umakoshi (2012) Syntheses and Luminescent Properties of 3,5-Diphenylpyrazolato-Bridged Heteropolynuclear Platinum Complexes. The Influence of Chloride Ligands on the Emission Energy Revealed by the Systematic Replacement of Chloride Ligands by 3,5-Dimethylpyrazolate. *Inorg. Chem.*, **51**, 7977-7992.
- T. Shinoda, N. Miyamoto, T. Kuromoto, K. Ito, H. Morikawa, Y. Okamoto, T. Fujiwara, and T. Hirokawa (2012) © Pyrohydrolysis Coupled to Ion Chromatography for Sensitive Determination of Iodine in Food-Related Materials. *Anal. Lett.*, **45**(8), 862-871.
- S. Tsukahara, Y. Matsumoto, S. Urasaki, M. Muramatsu and, T. Fujiwara (2012) Charge Simulation Method Calculation of the Inhomogeneous Electric Field near the Dodecane/Water Interface Generated by Two Needle Electrodes. *Solv. Extr. Res. Develop. Jpn.*, **19**, 29-39.

○著書

藤原照文 (分担執筆) : 錯体化学会選書 8 錯体の溶液化学 (横山晴彦・田端正明編著), 三共出版, 2012

○総説

石坂昌司 (2012) レーザー捕捉法を用いた単一エアロゾル水滴の分光分析。ふんせき, **11**, 628-633.

石坂昌司 (2012) 単一エアロゾル水滴のレーザー捕捉・顕微分光。光化学, **43**(3), 152-155.

石坂昌司 (2012) 単一エアロゾル微小水滴のレーザー捕捉・顕微分光。エアロゾル研究, **27**(4), 365-370.

○国際会議

J. Ma, S. Ishizaka, and T. Fujiwara: A Laser Trapping-Spectroscopy Study on Mass Transfer Processes Across a Single Micro-Droplet/Air Interface, The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 6th Japanese-Russian Seminar (Dec., 2012, Hiroshima University Higashi-Hiroshima Campus, Higashi-Hiroshima, Japan) (一般講演)

K. Katayama, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: *In Situ* Fluorescence Microscope Measurements of Conformations and Phase Transfers of Single DNA Molecules in Aqueous Two-Phase System, International Association of Colloid and Interface Scientists Conference (May, 2012, Sendai International Center, Sendai, Japan) (ポスター発表)

N. Shinomori, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Microscopic Measurements of Lateral Diffusion of Rhodamine B at Liquid/Liquid Interfaces by Total Internal Reflection-Fluorescence Recovery after Photobleaching, International Association of Colloid and Interface Scientists Conference (May, 2012, Sendai International Center, Sendai, Japan) (ポスター発表)

E. Tatsumoto, S. Tsukahara, Y. Okamoto, and T. Fujiwara: Aggregation of Gold Nanoparticles with Cysteine in Aqueous Solutions Measured by Absorption Spectroscopy, The 6th International Conference on Gold Science, Technology and Its Applications (Sep., 2012, Keio Plaza Hotel Tokyo, Tokyo, Japan) (ポスター発表)

S. Ishizaka, T. Wada, N. Kitamura and T. Fujiwara: Laser Trapping and Raman Spectroscopy of Single Supercooled Water Droplets in Air. RSC Tokyo International Conference: JASIS Conference, International Session (Sep., 2012, Makuhari Messe, Chiba, Japan) (ポスター発表)

○国内学会

石坂昌司: 光ピンセットを用いた単一エアロゾル水滴の顕微分光計測—雲や雨の発生機構解明を目指して—。日本分析化学会中国四国支部第49回分析化学講習会(2012年8月, 徳島大学常三島キャンパス, 徳島) (招待講演)

藤原照文: 化学発光法を用いた新規フローインジェクション微量分析法の開発。第176回周南コンビナート分析研究会周南地区講演会(2012年12月, 徳山積水工業株式会社大会議室, 周南) (招待講演)

石坂昌司: 単一エアロゾル微小水滴のレーザー捕捉・顕微分光。レーザー学会学術講演会

- 第33回年次大会 (2013年1月, 姫路商工会議所, 姫路) (招待講演)
- 山本智之, 常峰裕介, 早川不男, 岡本泰明, 石坂昌司, 藤原照文: ローダミン B を用いた溶媒抽出-逆ミセル系化学発光検出による微量アンチモン(III,V)の定量法。第 72 回分析化学討論会 (2012 年 5 月, 鹿児島大学郡元キャンパス・工学部, 鹿児島) (一般講演)
- 石坂昌司, 山内邦裕, 馬 姜, 喜多村 昇, 藤原照文: レーザー捕捉・顕微分光法を用いたエアロゾル液滴の物理化学特性の計測。第 72 回分析化学討論会 (2012 年 5 月, 鹿児島大学郡元キャンパス・工学部, 鹿児島) (一般講演)
- 松島孝侑, 西村拓哉, 延下悟志, 篠田哲宏, 伊藤一明, 森川 久, 岡本泰明, 藤原照文, 廣川 健: アルカリ添加乾式灰化法によるヨウ素定量の検討。第 72 回分析化学討論会 (2012 年 5 月, 鹿児島大学郡元キャンパス・工学部, 鹿児島) (一般講演)
- 石坂昌司, 馬 姜, 藤原照文: 単一微小液滴/空気界面における物質移動過程の速度論的解析。2012 年光化学討論会 (2012 年 9 月, 東京工業大学) (一般講演)
- 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トリプシンの溶媒抽出挙動。日本分析化学会第 61 年会 (2012 年 9 月, 金沢大学角間キャンパス, 金沢) (一般講演)
- 橋本佑介, 塚原 聡, 岡本泰明, 石坂昌司, 藤原照文: 液液界面へのレーザー照射による金ナノ粒子の生成挙動の *in situ* 顕微測定とその解析。日本分析化学会第 61 年会 (2012 年 9 月, 金沢大学角間キャンパス, 金沢) (一般講演)
- 山内邦裕, 石坂昌司, 藤原照文, 喜多村 昇: 気相中における過冷却水滴のレーザー捕捉・顕微ラマン分光 (2)。日本分析化学会第 61 年会 (2012 年 9 月, 金沢大学角間キャンパス, 金沢) (一般講演)
- 馬 姜, 石坂昌司, 藤原照文: 気相/エアロゾル液滴界面における物質移動過程の速度論的解析。日本分析化学会第 61 年会 (2012 年 9 月, 金沢大学角間キャンパス, 金沢) (一般講演)
- 中田健一, 岡本泰明, 岩崎邦祐, 石坂昌司, 藤原照文: 加熱気化-高周波誘導結合プラズマ発光分析法による銀ナノ粒子中不純物の直接定量。日本分析化学会第 61 年会 (2012 年 9 月, 金沢大学角間キャンパス, 金沢) (一般講演)
- 山本智之, 常峰裕介, 早川不男, 岡本泰明, 石坂昌司, 藤原照文: ローダミン B を用いたオンライン抽出-逆ミセルメディア化学発光検出による微量アンチモン(III,V)の定量法。2012 年日本化学会西日本大会 (2012 年 11 月, 佐賀大学本庄キャンパス, 佐賀) (一般講演)
- 奥野 諒, 石坂昌司, 岡本泰明, 藤原照文: フロー法を用いた逆ミセル吸着界面におけるポリアミドナノ構造体形成と顕微観測。第 50 回フローインジェクション分析講演会 (2012 年 11 月, 徳島大学蔵本キャンパス, 徳島) (一般講演)
- 松田卓也, 岡本泰明, 石坂昌司, 藤原照文: 逆ミセル反応場におけるロジウム-ルミノール化学発光に対するイオン液体の影響。第 50 回フローインジェクション分析講演会 (2012 年 11 月, 徳島大学蔵本キャンパス, 徳島) (一般講演)
- 石坂昌司: 光ピンセットを用いた単一エアロゾル水滴の顕微分光計測。平成 24 年度 低温科学研究所萌芽研究「氷の物理と化学研究の新展開」共同研究集会「H₂O を科学する・2012」(2012 年 12 月, 北海道大学低温科学研究所, 札幌) (一般講演)
- 立本絵里, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: システインによって凝集する金ナノ粒子の吸収分光測定。関西分析研究会平成 24 年度第二回例会 (2013 年 1 月, 京都大学, 宇治) (一般講演)
- 奥野 諒, 石坂昌司, 岡本泰明, 藤原照文: 逆ミセル吸着界面反応場を用いたガラス表面におけるポリアミドのナノ構造体形成の顕微観測。平成 24 年度広島地区分析技術講演会 (2013 年 2 月, 広島大学学士会館, 東広島) (一般講演)
- 片山和也, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: *In Situ* Fluorescence Microscope Measurements of Conformations and Phase Transfers of Single DNA Molecules in Aqueous Two-Phase System, 日本分析化学会近畿支部第 6 回夏期セミナー ぶんせき秘帖~巻ノ六~ (2012 年 8 月, グリーンビレッジ交野, 交野) (ポスター発表)
- 篠森直樹, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: Microscopic Measurements of Lateral Diffusion of Rhodamine B at Liquid/Liquid Interfaces by Total Internal Reflection-Fluorescence

Recovery after Photobleaching, 日本分析化学会近畿支部第6回夏期セミナー ぶんせき秘帖～巻ノ六～ (2012年8月, グリーンビレッジ交野, 交野) (ポスター発表)

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と水相の塩濃度の関係, 日本分析化学会近畿支部第6回夏期セミナー ぶんせき秘帖～巻ノ六～ (2012年8月, グリーンビレッジ交野, 交野) (ポスター発表)

立本絵里, 塚原 聡, 岡本泰明, 藤原照文: 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, 日本分析化学会近畿支部第6回夏期セミナー ぶんせき秘帖～巻ノ六～ (2012年8月, グリーンビレッジ交野, 交野) (ポスター発表)

山内邦裕, 石坂昌司, 喜多村昇: 気相中における過冷却水滴のレーザー捕捉・顕微ラマン分光. 2012年光化学討論会 (2012年9月, 東京工業大学) (ポスター発表)

岩崎邦祐, 岡本泰明, 石坂昌司, 藤原照文: プラスチック試料の直接加熱気化導入-ICP発光分析法による水銀の定量. 日本分析化学会第61年会 (2012年9月, 金沢大学角間キャンパス, 金沢) (ポスター発表)

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トリプシンの溶媒抽出と構造変化. 第31回日本溶媒抽出討論会 (2012年11月, 石川県文教会館, 金沢) (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5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 (2013年1月, 日本科学未来館) (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	0	1
博士課程前期	1	12
博士課程後期	0	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

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, 中国四国支部長 (2012)

石坂昌司, 日本化学会, 北海道支部庶務幹事 (2011)

石坂昌司, 日本化学会, 中国四国支部庶務幹事 (2012)

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)

石坂昌司, 日本分析化学会, 中国四国支部庶務幹事 (2012-)

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

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)

石坂昌司, 広島国泰寺高等学校SSH事業 (2012年6月, 広島大学)

・論文誌編集委員

石坂昌司, Analytical Sciences (Special Issue: Young Generation in Analytical Sciences) 29(1), 2013, ゲストエディター (2013)

・ 討論会の組織委員

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)

石坂昌司, 2013年日本化学会中国四国支部大会実行委員 (2012-2013)

・ その他の委員

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)

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)

○ 共同プロジェクトへの参加状況 (国内)

石坂昌司, 大気エアロゾルの環境影響プロジェクト研究センター (広島大学) (2012-2013)

○ 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)

奥野 諒 (M2), 第50回フローインジェクション分析講演会 (口頭発表) 若手優秀講演賞「フロー法を用いた逆ミセル吸着界面におけるポリアミドナノ構造体形成と顕微観測」(2012)

馬 姜 (M2), The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium and the 6th Japanese-Russian Seminar, Student Award, "A laser trapping-spectroscopy study on mass transfer processes across a single micro-droplet/air interface", (2012).

○ 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61年会 (2012年9月, 金沢)

石坂昌司, 日本分析化学会第61年会 (2012年9月, 金沢)

石坂昌司, 2012年光化学討論会 (2012年9月, 東京工業大学)

岡本泰明, 平成24年度広島地区分析技術講演会 (2013年2月, 東広島)

スタッフ 灰野 岳晴 (教授), 関谷 亮 (准教授), 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。

平成 24 年度の研究成果の概要を以下に示す。

1. フェニルイソ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、白金錯体を導入した場合、金属間相互作用による集合体を形成することを明らかにした。さらに、アゾベンゼン部位を導入することで光異性化により集合状態を変化させることに成功した。
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. カリックス[4]レゾルシンアレーンからなる超分子カプセルをグラフトした超分子グラフト共重合体の開発に成功した。
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。
5. 新しい炭素材料であるグラフェンおよびグラフェン量子ドットの化学修飾に成功した。

○発表原著論文

H. Yamada, T. Ikeda, T. Mizuta, T. Haino (2012) ©Modified Synthesis and Supramolecular Polymerization of Rim-to-Rim Connected Bisresorcinarenes, *Organic Letters* **14**, 4510-4513.

T. Ikeda, T. Masuda, T. Hirao, J. Yuasa, H. Tsumatori, T. Kawai, T. Haino (2012) ©Circular Dichroism and Circularly Polarized Luminescence Triggered by Self-assembly of Tris(phenylisoxazolyl) Benzenes Possessing a Perylenebisimide Moiety, *Chemical Communications* **48**, 6025-6027.

T. Haino, A. Watanabe, T. Hirao, T. Ikeda (2012) ©Supramolecular Polymerization Triggered by Molecular Recognition between Bisporphyrin and Trinitrofluorenone, *Angewandte Chemie International Edition* **51**, 1473-1476.

R. Kusaka, Y. Inokuchi, T. Haino, T. Ebata (2011) ©Structures of (3n-Crown-n)-Phenol (n=4, 5, 6, 8) Host-Guest Complexes: Formation of a Uniquely Stable Complex for n=6 via Collective Intermolecular Interaction, *Journal of Physical Chemistry Letters*, **3**, 1414-1420.

S. Aoki, S. Suzuki, M. Kitamura, T. Haino, M. Shiro, M. Zulkefeli, E. Kimura (2012) Molecular Recognition of Hydrocarbon Guests by a Supramolecular Capsule Formed by the 4:4 Self-Assembly of Tris(Zn²⁺-Cyclen) and Trithiocyanurate in Aqueous Solution, *Chemistry—an Asian Journal* **7**, 944-956.

Y. Inokuchi, O. V. Boyarkin, R. Kusaka, T. Haino, T. Ebata, T. R. Rizzo (2012) ©Ion Selectivity of Crown Ethers Investigated by UV and IR Spectroscopy in a Cold Ion Trap, *Journal of Physical Chemistry A* **116**, 4057-4068.

R. Sekiya, M. Fukuda, R. Kuroda (2012) Anion-Directed Formation and Degradation of an Interlocked Metallohelicate, *Journal of the American Chemical Society*, **134**, 10987-10997.

R. Sekiya, S. Nishikiori (2012) Adsorption and Separation of Poly-Aromatic Hydrocarbons by a Hydrogen-Bonded Coordination Polymer, *Chemical Communications*, **48**, 5022-5024.

○総説

池田俊明, 灰野岳晴 (2012) ©スライドするグラフト共重合体-超分子ポリマーの新展開. *化学*, **67**, 64-65.

○国際会議

T. Haino: Supramolecular Polymerization Driven by Unique Host-Guest Interaction. Japan-India Bilateral Seminar on Supramolecular Nanomaterials for Energy Innovation (Oct. 2012, Kagawa, Japan) (招待講演)

T. Haino: Supramolecular Assembly of Trisphenylisoxazolyl Benzene. 7th Japan-Taiwan Bilateral Symposium (Oct. 2012, Hsinchu, Taiwan) (招待講演)

T. Haino: Polymeric Porphyrin Assemblies Driven by Molecular Recognition. 221st ECS Meeting (May. 2012, Seattle, WA, USA) (招待講演)

H. Yamada, T. Ikeda, T. Mizuta, T. Haino: Synthesis and Supramolecular Polymerization of Rim-to-Rim Connected Biscalix[4]resorcinarene Bridged by Alkyl Chains. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2012, Hiroshima, Japan) (一般講演)

M. Takayama, T. Ikeda, T. Haino: Helical self-assembly of platinum(II) complexes possessing bis(phenylisoxazolyl)benzenes. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2012, Hiroshima, Japan) (一般講演)

○国内学会

灰野岳晴: 超分子ポリマーの創製。第 61 回高分子学会年次大会 (2012 年 5 月, 神奈川) (招待講演)

灰野岳晴: 多様な分子間相互作用が織りなす超分子構造と革新的機能。近畿化学協会有機金属部会「第 3 回例会」(2012 年 10 月, 広島) (招待講演)

灰野岳晴・増田哲也・平尾岳大・池田俊明・湯浅順平・妻鳥紘之・河合壯: 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)ベンゼンのらせん集積とキロプティカル物性。第 61 回高分子討論会 (2012 年 9 月, 愛知) (依頼講演)

灰野岳晴・平尾岳大・平井恵梨・池田俊明: カリックス[5]アレーンとフラーレンのホスト-ゲスト相互作用を基盤とした超分子ポリマー。第 61 回高分子討論会 (2012 年 9 月, 愛知) (依頼講演)

金城可愛志・渡辺亮英・池田俊明・灰野岳晴: ビスピリジン配位子による head-to-tail 型亜鉛ポルフィリン超分子ポリマーの架橋。日本化学会第 93 春季年会 (2013 年 3 月, 滋賀) (一般講演)

高山みどり・池田俊明・灰野岳晴: 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 Pt 錯体のらせん集積挙動。日本化学会第 93 春季年会 (2013 年 3 月, 滋賀) (一般講演)

山田仁美・池田俊明・水田勉・灰野岳晴: ビスカリックス[4]レゾルシンアレーンの改良合成と超分子ポリマーの開発。日本化学会第 93 春季年会 (2013 年 3 月, 滋賀) (一般講演)

黒田玲子・関谷亮: 結晶化におけるキラル増幅 I 溶液からの結晶化。第 21 回有機結晶部会シンポジウム (2012 年 11 月, 東京) (一般講演)

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(フェニルイソオキサゾリル)ベンゼンの集合挙動とキロプティカル物性。第 9 回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2012 年 5 月, 北海道) (一般講演)

平尾岳大・池田俊明・灰野岳晴: カリックス[5]アレーンホストとフラーレンゲストによる超分子フラーレンネットワークの構築とキラル部位がネットワークに及ぼす影響。第 6 回有機 π 電子系シンポジウム (2012 年 12 月, 愛媛) (ポスター)

高山みどり・池田俊明・灰野岳晴: 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 Pt 錯体のらせん集積。第 6 回有機 π 電子系シンポジウム (2012 年 12 月, 愛媛) (ポスター)

金城可愛志・渡辺亮英・灰野岳晴: head-to-tail 型超分子亜鉛ポルフィリンポリマーとビスピリジン配位子による超分子ネットワークの構築。第 6 回有機 π 電子系シンポジウム (2012 年 12 月, 愛媛) (ポスター)

高山みどり・池田俊明・灰野岳晴: 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 Pt 錯体の自己集合。第 23 回基礎有機化学討論会 (2012 年 9 月, 京都) (ポスター)

平尾岳大・池田俊明・灰野岳晴: 2 つのカリックス[5]アレーンにより形成されるフラーレン包接部位をもつホモトリトピックホスト分子とダンベル型フラーレンからなる主鎖形フラーレンポリマーネットワークの構築。第 23 回基礎有機化学討論会 (2012 年 9 月,

京都) (ポスター)

山田仁美・池田俊明・水田勉・灰野岳晴：アルキル鎖で架橋されたカリックス[4]アレーン二量体の合成。第23回基礎有機化学討論会(2012年9月, 京都) (ポスター)

関谷亮・山田純平・錦織紳一：配位高分子の細孔を利用した芳香族化合物の方法依存的分子認識。第62回錯体化学討論会(2012年9月, 富山) (ポスター)

高山みどり・池田俊明・灰野岳晴：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Pt(II)錯体の合成と自己集合。第28回若手化学者のための化学道場(2012年9月, 島根) (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)ベンゼンの会合により誘起されるフォトクロミックな超分子ゲル。第61回高分子学会年次大会(2012年5月, 神奈川) (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ネットワーク。第61回高分子学会年次大会(2012年5月, 神奈川) (ポスター)

関谷亮・錦織紳一：配位高分子[Ni(SCN)₂(isoH)₂]_nによる多環芳香族化合物の吸着と形状認識。第9回ホスト・ゲスト化学シンポジウム(2012年5月, 北海道) (ポスター)

平尾岳大・池田俊明・灰野岳晴：カリックス[5]アレーンとフラーレンのホスト-ゲスト相互作用を駆動力としたホモトリトピックホスト分子とダンベル型フラーレンによる超分子ネットワークの構築。第9回ホスト・ゲスト化学シンポジウム(2012年5月, 北海道) (ポスター)

上田祐子・田中正洋・池田俊明・灰野岳晴：6つのフェニルイソオキサゾリルベンゼンを導入した平面π共役分子の自己集合。第9回ホスト・ゲスト化学シンポジウム(2012年5月, 北海道) (ポスター)

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部4年生 ⁽¹⁾	0	0
博士課程前期 ⁽²⁾	2	16
博士課程後期 ⁽³⁾	0	1
博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾	0	1

○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：第18回シクロファン研究会実行委員(2003)

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：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)

○社会活動・学外委員

灰野岳晴：新規素材探索研究会幹事(2001-)

灰野岳晴：生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事(2004-2005)

灰野岳晴：ホスト・ゲスト化学研究会幹事(2006-)

灰野岳晴：有機合成化学協会中国四国支部幹事(2007-)

灰野岳晴：日本化学会中国四国支部庶務幹事(2008)

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-)

○共同プロジェクトへの参加状況(国内)

京都大学化学研究所共同利用・共同研究拠点、シクロパラフェニレンの包接機構の解明、
灰野岳晴（代表者）

○他研究機関での講義・客員

新潟大学大学院自然科学研究科数理物理化学専攻，非常勤講師

○研究助成の受け入れ状況

科学研究費補助金 基盤研究（B），特異的分子認識により配列制御された超分子ブロック共重合体の創製，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）

岩谷直治記念財団研究助成，高次ナノ分子配列空間の精密制御と機能，灰野岳晴（代表者）

江野科学振興財団研究助成，自己修復能を有する超分子機能性高分子材料の開発，灰野岳晴（代表者）

高橋産業経済研究財団研究助成，超分子化学を用いる高度分子集積化技術と光機能制御，灰野岳晴（代表者）

三菱財団自然科学研究助成，自己組織化を利用した分子配列空間の高度制御による機能性超分子ポリマーの開発，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）

○座長を行った学会・討論会の名称

灰野岳晴：日本化学会第93春季年会（2013年3月，滋賀）

灰野岳晴：The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2012, Hiroshima, Japan)

灰野岳晴：第9回ホスト・ゲスト化学シンポジウム（2012年5月，北海道）

灰野岳晴：7th Japan-Taiwan Bilateral Symposium (Oct. 2012, Hsinchu, Taiwan)

灰野岳晴：第61回高分子討論会（2012年9月，愛知）

関谷亮：The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2012, Hiroshima, Japan)

○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）

灰野岳晴：理学研究科安全衛生委員（2011年4月～2013年3月）

灰野岳晴：理学研究科化学専攻長（2012年4月～2013年3月）

灰野岳晴：理学研究科人事交流委員会（2012年4月～2013年3月）

灰野岳晴：理学研究科施設活用委員（2012年4月～2014年3月）

灰野岳晴：理学研究科評価委員（2012年4月～2014年3月）

灰野岳晴：理学研究科大学院委員（2012年4月～2014年3月）

灰野岳晴：理学研究科地区防災対策委員（2012年4月～2013年3月）

灰野岳晴：理学部化学科教務問題検討委員（2012年4月～2013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、速度論的アプローチと動力学アプローチを融合した化学反応研究を推進している。独自に開発した Integrated profile method (IPM)を用いて、振動励起 $O_2(X^3\Sigma_g^-, v=6 \sim 8)$ の O_2 の衝突による緩和の速度定数を決定した成果を *J. Phys. Chem. A* 誌に投稿し掲載された。また、 $S(^1D)+OCS$ 反応において S_2 の 2 種の電子状態 ($a^1\Delta_g$ および $X^3\Sigma_g^-$) の高振動励起準位が生成していることを見出した研究と $NH_2+NO \rightarrow OH+H+N_2$ 反応が $NH_2(X^2B_1)$ の振動励起により加速されることを明らかにした成果を第 28 回化学反応討論会(福岡, 6 月)において発表した。後者の研究成果については、22nd International Symposium on Gas Kinetics (米国 Boulder, 6 月)においても発表し、発表学生が JPC Outstanding Poster Award を受賞した。実験装置に関しては、倍波発生システムを装備した YAG レーザ励起色素レーザー装置を新たに整備しつつあり、複数の分子種や複数の振動準位の同時検出あるいは 2 波長 2 光子励起実験など、2 つの波長可変レーザーを利用する高感度検出が近い将来実現する。

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、光化学反応と光イオン化反応を対象として、量子状態を選別した散乱実験を行っている。亜硝酸メチル(CH_3ONO)の光化学反応の研究では、NO 生成物の高い回転励起を観測し、その振動状態分布とともに微視的な反応機構の考察を行った。振動・回転状態を選別した散乱分布測定の可能性が十分に示され、厳密な反応機構決定のために研究を継続している。光イオン化過程の完全実験実現を目指して、プロトタイプ反応系である NO の光電子散乱画像観測実験を行っている。高分解の能散乱分布測定による実験的な部分波分解を目標としており、振動基底状態の NO からの光電子散乱分布を測定した。散乱分布は優勢な p 波に支配されており、より高い角度分解能の実現が必要であることを示しているとともに、振動・回転状態依存性の測定の可能性が十分あることを示していた。

3. 核運動を考慮したオージェ電子分光スペクトルの理論計算

内殻励起後の崩壊過程の 1 つとしてオージェ電子分光法がある。特にその量子収量は第 2 周期原子の内殻励起過程では競争する発光過程よりはるかに多く、崩壊過程を探る上で重要なプロセスである。我々は以前より多電子分子のオージェ崩壊過程に注目し、その理論計算手法の開発を行ってきた。この度 CI 行列要素の拡張を行い、また基底状態および内殻正孔状態のダイナミクスを考慮してスペクトルを作成する手法を開殻系、開殻系に対して開発した。テスト計算を H_2O , NH_3 , CH_4 に対して行い、以前の報告例と比べ実験値を精度よく再現することに成功した。

○発表原著論文

- S. Watanabe, H. Kohguchi, K. Yamasaki (2012) ©Vibrational Relaxation of $O_2(X^3\Sigma_g^-, v=6-8)$ by Collisions with $O_2(X^3\Sigma_g^-, v=0)$: Solution of the Problems in the Integrated Profiles Method. *J. Phys. Chem. A*, **116**(30), 7791-7796.
- T. Yamanaka, K. Tabayashi, O. Takahashi, K. Tanaka, H. Namatame, M. Taniguchi (2012) Core-to-Rydberg band-shift and -broadening of hydrogen bonded ammonia clusters studied with nitrogen K-edge excitation spectroscopy. *J. Chem. Phys.*, **136**(1), 014308-11.
- T. Tokushima, Y. Horikawa, H. Arai, Y. Harada, O. Takahashi, L. G. M. Pettersson, A. Nilsson, S. Shin (2012) Polarization dependent resonant x-ray emission spectroscopy of D_2O and H_2O water: Assignment of the local molecular orbital symmetry. *J. Chem. Phys.*, **136**(4), 044517-7.

- K. Ueda, O. Takahashi (2012) Extracting chemical information of free molecules from K-shell double core-hole spectroscopy. *J. Elec. Spectrosc. Rel. Phenom.*, **185**, 301–311.
- O. Takahashi, K. Yamasaki, Y. Kohno, K. Ueda, M. Nishio (2012) ©Importance of the CH/ π hydrogen bond in the enhancement of CD amplitude of exomethylene steroids. *RSC advances*, **2**(29), 10891–10898.

○著書

- 山崎 勝義 (2012) 量子論におけるブラ・ケット表記。漁火書店 (総頁数33ページ)

○国際会議

- H. Kohguchi: Photodissociation of Nitro-Compounds Studied by Ion-Imaging. The 16th East Asian Workshop on Chemical Dynamics (April 16–19, 2012, National Tsing Hua University, Shinchu, Taiwan) (招待講演)
- H. Kohguchi: Photodissociation of Nitro-Compounds Studied by Ion-Imaging. 10th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics (AISAMP10) (October 2012, National Taiwan University, Taipei, Taiwan) (招待講演)
- O. Takahashi, K. Ueda: Extracting chemical information of free molecules from K-shell double core-hole spectroscopy. 12th International Conference on Electron Spectroscopy and Structure (Sep. 2012, Saint-Malo, France) (ポスター)
- N. Kohno, M. Izumi, H. Kobayashi, H. Kohguchi, K. Yamasaki: Enhancement of the $\text{NH}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{N}_2$ Reaction. 22nd International Symposium on Gas Kinetics (June. 2012, Boulder, USA) (ポスター)
- J. Yamashita, H. Takahashi, K. Orimi, T. Hashimoto, H. Kohguchi, K. Yamasaki: Kinetics and Dynamics on the Formation of $\text{S}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-, a^1\Delta_g)$ in the $\text{S}(^1\text{D}) + \text{OCS}$ Reaction. 22nd International Symposium on Gas Kinetics (June. 2012, Boulder, USA) (ポスター)
- N. Kohno, M. Izumi, H. Kobayashi, H. Kohguchi, K. Yamasaki: Acceleration of the Reaction $\text{NH}_2 + \text{NO} \rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{N}_2$ by Vibrational Excitation of NH_2 . 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (June. 2012, Fukuoka, Jpn) (ポスター)
- J. Yamashita, H. Takahashi, K. Orimi, T. Hashimoto, H. Kohguchi, K. Yamasaki: Kinetics and Dynamics on the Formation of Vibrationally Excited $\text{S}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-, a^1\Delta_g)$ in the $\text{S}(^1\text{D}) + \text{OCS}$ Reaction. 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (June. 2012, Fukuoka, Jpn) (ポスター)
- M. Sumida, T. Hanada, K. Yamasaki, H. Kohguchi: Spin-orbit branching in UV photodissociation of allyl iodide. 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (June. 2012, Fukuoka, Jpn) (ポスター)
- Y. Kohge, S. Masumoto, K. Yamasaki, H. Kohguchi: Determination of electronic excited states of NO_2 generated in photodissociation of CH_3NO_2 . 28th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics (June. 2012, Fukuoka, Jpn) (ポスター)

○国内学会

- 高口博志: イオン化学の反応ダイナミクス研究。分子研シンポジウム (2012年4月, 岡崎、愛知) (依頼講演)
- 高口博志: イオン・イメージング法で探る光化学反応の初期過程と二次過程日本分光学会講演会 (2013年1月15日, 東広島、広島) (依頼講演)
- J. Yamashita, K. Fujihara, H. Takahashi, H. Kohguchi, K. Yamasaki: Generation of Vibrationally Excited $\text{S}_2(\text{X}^3\Sigma_g^-$ and $a^1\Delta_g)$ in the $\text{S}(^1\text{D}) + \text{OCS}$ Reaction. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2012年12月, 東広島) (一般講演)
- 高下慶典, 益本修, 山崎勝義, 高口博志: ニトロメタンの紫外光解離反応における三体解離経路の検証。第6回分子科学討論会 (2012年9月, 東京) (一般講演)
- 高橋修, 谷哲龍, 山崎勝義, 上田潔: 内殻二重正孔状態におけるダイナミクス。 (2013年1月, 名古屋) (一般講演)
- 高橋修, 上田潔: 分子の二重内殻正孔状態の理論的研究。第35回情報化学討論会 (2012年10月, 東広島) (一般講演)

住田聖太, 花田拓也, 山崎勝義, 高口博志, ヨウ化アリの紫外光解離におけるスピン軌道状態分岐機構の解明。第6回分子科学討論会(2012年9月, 東京)(ポスター)
 益本修, 高下慶典, 山崎勝義, 高口博志: 散乱分布測定によるCH₃ONOの光解離反応経路の探索。第6回分子科学討論会(2012年9月, 東京)(ポスター)
高橋修, T. Arion, U. Hergenahn: Theoretical study of photoelectron-Auger electron coincidence spectroscopy of CF₄。第27回化学反応討論会(2012年6月, 福岡)(ポスター)
 大久保康裕, 河野明男, 高橋修, 山崎勝義: QCT法を用いたN₂+O₂系の振動緩和過程の理論計算。日本コンピュータ化学会2012秋季年会(2012年10月, 山形)(ポスター)

○学生の学会発表実績

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

○セミナー・講演会開催実績

・組織委員, 実行委員

山崎勝義, Christa Fittschen教授講演会(2012年, 4月), 学術講演会世話人

○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, 日本化学会役員候補者選考委員(2011)

山崎勝義, 日本化学会代議員(2012-2013)

山崎勝義, 日本分光学会代議員(2004, 2006-)

山崎勝義, 日本分光学会中国四国支部監査(2006-)

山崎勝義, 日本分光学会中国四国支部幹事(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)

高口博志, 日本分光学会編集委員(2012-2013)

・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)
- 高口博志, 神戸大学化学セミナー「光化学過程における実効的反応座標の決定」2012年12月13日神戸大学六甲キャンパス
- 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「大学の化学と物理化学の楽しみ方」(2006年9月, 広島県立広島中・高等学校)
- 山崎勝義, 大学模擬講義「分子に光をあてると化学結合の長さや強さがわかる」(2008年7月, 広島県立広島皆実高等学校)
- 山崎勝義, 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)
- 山崎勝義, 大学模擬講義「サイエンス=科学=理学の楽しみ方」(2012年7月, 広島県立広島皆実高等学校)

・ 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(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)

河野七瀬, JPC Outstanding Poster Award, 22nd International Symposium on Gas Kinetics (2012年6月, Boulder, USA)

住田聖太, ベストポスター賞, 第28回化学反応討論会 (2012年6月, 福岡)

益本修, 優秀ポスター賞, 第6回分子科学会 (2012年9月, 東京)

○座長を行った学会・討論会の名称

山崎勝義, 第28回化学反応討論会, 福岡, 2012年6月

高口博志, 第6回分子科学会2012, 札幌, 2012年9月

○その他の特記事項

広島大学学術情報リポジトリで公開されている「物理化学Monographシリーズ」のファイルダウンロード総数が17万件を超えた。また, 同シリーズが広島大学出版会電子書籍出版システム(EBM)により製本・販売されることが決定した。

○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

我々は近年、独自の方法で生成させた三重項カルベンの安定化という非常に難しいテーマに取り組んでいるが、その研究の際に、本来の目的物である三重項カルベンの合成には至らなかったものの、予想に反し、脱メチル化と二量化を経由して、基底状態に中程度の一重項ビラジカル性を有する化合物が偶然生成することをX線構造解析により見出した。中野先生(阪大基礎工)と鎌田先生(産総研)との共同研究で二光子吸収特性を測定し、この化合物が非常に大きな二光子吸収断面積を示すことがわかった。中野先生によって予言され、久保先生(阪大理)によって実験的に検証されていたビラジカル性に起因する特異な二光子吸収特性について、単一系で検証できたことは予期せぬ成果であった。(山本)

ジベンゾシラボリンのケイ素原子上の官能基変換に成功した。これらの分子軌道計算、紫外可視吸収スペクトル・蛍光スペクトル測定をおこない、官能基と電子状態および光物性との相関関係を明らかにした。(河内)

新規アンチアピコフィリックホスホランを合成し、その性質を明らかにした。また、アンチアピコフィリックホスホランを用いないと合成できない新規6配位リン化合物の合成に成功した。(小島)

○発表原著論文

L. Könczöl, A. Kawachi, D. Szieberth (2012) Mechanism of Dehydrogenative Condensation of (*o*-Borylphenyl)hydrosilanes with Methanol, *Organometallics* **31**(1), 120–126.

S. Sugawara, Y. Hirata, S. Kojima, Y. Yamamoto, E. Miyazaki, K. Takimiya, S. Matsukawa, D. Hashizume, J. Mack, N. Kobayashi, Z. Fu, K. M. Kadish, Y. M. Sung, K. S. Kim, D. Kim (2012) © Synthesis, Characterization and Spectroscopic Analysis of Antiaromatic Benzofused Metalloporphyrin Species, *Chemistry – A European Journal*, **18**(12), 3566–3581.

A. Kawachi, H. Morisaki, N. Nishioka, Y. Yamamoto (2012) ©Intramolecular H–Ar Ligand Exchange between Silicon and Boron: Functionality Transfer of Si–H to B–H, *Chemistry – An Asian Journal*, **7**(3), 546–553.

S. Sugawara, S. Kojima, Y. Yamamoto (2012) ©Synthesis of New Cyclic Aromatic Carbene Ligands Bearing Remote Amino Groups and Their Palladium (II) Complexes, *Chem. Commun.*, **48**(78), 9735–9737.

J. Ohshita, R. Fujita, D. Tanaka, Y. Ooyama, N. Kobayashi, H. Higashimura, Y. Yamamoto (2012) © Synthesis and Optical Properties of Dithienostiboles, *Chem. Lett.*, **41**(9), 1002–1003.

X.-D. Jiang, S. Matsukawa, S. Kojima, Y. Yamamoto (2012) ©Synthesis and Characterization of Antiapicophilic Arsoranones and Related Compounds, *Inorg. Chem.*, **51**(20), 10996–11006.

A. Iwamoto, A. Katori, Y. Sashihara, S. Kojima (2012) ©Mild Synthesis of Furans with a Quaternary Carbon Substituent at the 2-Position., *Chemistry Letters*, **41**(12), 1586–1587.

○国際会議

Y. Yamamoto: The Chemistry of Hypervalent Second Row Main Group Element Compounds and Recent Developments. The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (May, 2012, Uji, Japan) (招待講演)

Y. Yamamoto: Synthesis and Properties of 16 π -Electron Porphyrins. 17th Malaysian Chemical Congress (17MCC) (Oct., 2012, Kuala Lumpur, Malaysia) (招待講演)

A. Kawachi, H. Morisaki, T. Hirofujii, Y. Ueki, Y. Yamamoto: Formation, Structures, and Reactions of Dibenzosilaborins. The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (May, 2012, Uji, Japan) (一般講演)

- Y. Yamamoto, S. Sugawara, T. Kakui, Y. Hirata, M. Kodama, S. Kojima: Anti-aromatic 16 π Porphyrins: Relationship between Planarity and Anti-aromaticity. The 7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-7) (Jul, 2012, Jeju, Korea) (一般講演)
- Y. Yamamoto, Y. Shi, T. Suguri, S. Kojima: Highly Active Catalysts for the Transfer Dehydrogenation of Alkanes; Synthesis and Application of Novel 7-6-7 Rings Based Pincer Iridium Complexes. The 19th International Congress on Phosphorus Chemistry (ICPC-19) (Jul., 2012, Rotterdam, The Netherlands) (一般講演)
- Y. Yamamoto, X.-D. Jiang, S. Kojima: Preparation of Alcohols Bearing Two Identical Perfluoroalkyl Groups by a Cannizzaro-type Reaction and Application of the Alcohols as a Bulky Martin Ligand Variant for New Anti-apicophilic Phosphoranes. 20th International Symposium on Fluorine Chemistry (Jul, 2012, Kyoto, Japan) (一般講演)
- Y. Yamamoto, S. Sahara, A. Katori: Development of the New Ligand With Benzothiophene Framework. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec., 2012, Higashi-Hiroshima) (一般講演)
- K. Sato, H. Yasuda, T. Yamaguchi, Y. Yamamoto, D. Kinoshita, K.-y. Akiba: Attempts at the Synthesis of Hypervalent Carbon and Boron Compounds with Two van Koten Ligands. The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (May, 2012, Uji, Japan) (ポスター)
- S. Fuku-en, Y. Yamamoto: Toward the Synthesis of Stable Triplet Carbenes. The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (May, 2012, Uji, Japan) (ポスター)
- S. Sugawara, Y. Yamamoto: Synthesis of New Carbene Ligands and Their Metal Complexes. The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (May, 2012, Uji, Japan) (ポスター)
- T. Inoue, T. Masui, D. Saito, Y. Yamamoto: Hypervalent Pentacoordinate Boron Compounds with a Novel Tridentate Ligand System Bearing a Benzene Ring Condensed with Two Seven Membered Rings. The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (May, 2012, Uji, Japan) (ポスター)
- S. Hiramatsu, S. Sugawara, S. Kojima, Y. Yamamoto: Synthesis and Properties of Highly Planar 16 π Porphyrins. The 7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-7) (Jul, 2012, Jeju, Korea) (ポスター)
- S. Sugawara, S. Kojima, Y. Yamamoto, J. Mack, N. Kobayashi, Z. Fu, K. M. Kadish, Y. M. Sung, K. S. Kim, D. Kim: Synthesis, Characterization, and Spectroscopic Analysis of Anti-aromatic 16 π Benzofused Metalloporphyrins. The 7th International Conference on Porphyrins and Phthalocyanines (ICPP-7) (Jul, 2012, Jeju, Korea) (ポスター)
- S. Kojima, Y. Toya, X.-D. Jiang, Y. Yamamoto: Hexacoordinate Phosphates Bearing Either Martin Ligands or Extended Martin Ligands. The 19th International Congress on Phosphorus Chemistry (ICPC-19) (Jul., 2012, Rotterdam, The Netherlands) (ポスター)
- Y. Imada, H. Yamamichi, S. Matsukawa, S. Kojima, K. Ando, Y. Yamamoto: Study of the Isomerization of Pentacoordinate Antimony Compounds Bearing a Rigid Tridentate and a Bidentate Ligand by Turnstile Rotation. The 19th International Congress on Phosphorus Chemistry (ICPC-19) (Jul., 2012, Rotterdam, The Netherlands) (ポスター)
- Y. Toya, S. Kojima, Y. Yamamoto: Synthesis and Characterization of Phosphoranes Bearing a Hydrazine or a Diazene Substituent. The 19th International Congress on Phosphorus Chemistry (ICPC-19) (Jul., 2012, Rotterdam, The Netherlands) (ポスター)
- Y. Shi, T. Suguri, S. Kojima, Y. Yamamoto: Highly Active Catalysts for the Transfer Dehydrogenation of Alkanes; Newly Developed 7-6-7 Rings Based Pincer Iridium/Rhodium Complexes. The 19th International Congress on Phosphorus Chemistry (ICPC-19) (Jul., 2012, Rotterdam, The Netherlands) (ポスター)
- T. Hirofuji, H. Morisaki, A. Kawachi, Y. Yamamoto: Formation, Structures and

Reactions of Silicon-Functionalized Dibenzosilaborins. 4th Asian Silicon Symposium (ASiS-4) (Oct., 2012, Tsukuba, Japan) (ポスター)

Y. Imada, S. Kojima, Y. Yamamoto: Development of a New Tridentate Ligand and Application to the Synthesis of an Isolable Hypervalent Sulfur Radicals. The 1st International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules (Mar., 2013, Hiroshima, Japan) (ポスター)

○国内学会

河内 敦: ケイ素-水素結合およびケイ素-フッ素結合の反応性制御と新規 14 族元素化合物の合成。有機合成化学協会中国四国支部第 67 パネル討論会「有機ケイ素化学の進化」(2012 年 5 月, 広島) (依頼講演)

河内 敦: H-Ar 交換反応および B-H/C-H 脱水素化によるジベンゾシラボリンの合成と反応。第 28 回若手研究者のための化学道場 (2012 年 9 月, 出雲) (師範講演)

山本陽介: 高配位および低配位典型元素の実験研究と計算化学。計算分子科学研究拠点 第 2 回実験科学との交流シンポジウム (2012 年 11 月, 京都) (招待講演)

菅原峻・山本陽介: 7 新規な環状芳香族カルベン配位子の合成と遷移金属触媒への応用。第 23 回基礎有機化学討論会 (2012 年 9 月, 京都) (一般講演)

山本陽介・中野雅由: 感性高配位典型元素化合物の創製と反応。文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究「感性化学種が拓く新物質科学」第 1 回公開シンポジウム (2012 年 9 月, 宇治) (一般講演)

福圓真一・藤原好恒・安倍 学・古川 貢・山本陽介: 二つのアクリデン部位を有するアレン化合物のハロゲン化と光分解。第 39 回有機典型元素化学討論会 (2012 年 12 月, 盛岡) (一般講演)

山本陽介: 典型元素化学・有機金属化学の研究動向と将来展望。分子研研究会「無機化学の現状と未来:若い世代が切り開く新しいサイエンス」(2013 年 1 月, 岡崎) (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と反応。日本化学会第 93 春季年会 (2013 年 3 月, 草津) (一般講演)

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。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

平松尚悟: 完全平面 16π ポルフィリンの合成と性質。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

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。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

香取亜希: ベンゾチオフェノン骨格を有する新規配位子系の展開。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

桑名祐里: 溶解度の高い新しいスフェランドの開発と超原子価化合物合成の試み。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

福圓真一: 塩素原子を有するピリジンが縮環した N-ヘテロサイクリックカルベン配位子の合成。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

佐藤香央子: 2 つの van Koten 配位子を持つ超原子価炭素およびホウ素。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

森迫祥吾: 立体障害のある sp^3 塩基の合成と性質の検討。第 47 回有機反応若手の会 (2012 年 8 月, 美作) (ポスター)

井上達也・舛井喬・齊藤大悟・山本陽介: 7 員環を 2 つ縮環した新規ベンゼン誘導体骨格を有する配位子の合成とその応用。第 28 回若手研究者のための化学道場 (2012 年 9 月, 出雲) (ポスター)

今田康公・山道秀映・松川史郎・小島聡志・安藤香織・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 28 回若手研究者のための化学道場 (2012 年 9 月, 出雲) (ポスター)

平松尚悟・菅原峻・山本陽介: ビス-アントラセン縮環 16π ポルフィリンの合成の試み。第 23 回基礎有機化学討論会 (2012 年 9 月, 京都) (ポスター)

香取亜希・指原慶彰・小島聡志・山本陽介: ジアステレオ選択的フラン合成反応の条件

- 検討と立体化学の解明。第2回 CSJ 化学フェスタ 2012 (2012年10月, 東京) (ポスター)
- 香取亜希・指原慶彰・小島聡志・山本陽介: 8-フェニルメンチル基をキラル補助基に用いた高ジアステレオ選択的フラン化反応。第38回反応と合成の進歩シンポジウム 2012 (2012年11月, 東京) (ポスター)
- 福圓真一・山本陽介・古川 貢: 新規三重項カルベンの合成の試みと ESR 測定。計算分子科学研究拠点 第2回実験科学との交流シンポジウム (2012年11月, 京都) (ポスター)
- 井上達也・舛井 喬・齊藤大悟・山本陽介: 7員環を縮環した三座配位子の誘導体化と超原子価ホウ素化合物の構造制御。第39回有機典型元素化学討論会 (2012年12月, 盛岡) (ポスター)
- 今田康公・山本陽介: 新規三座配位子の開発と超原子価硫黄ラジカルの合成検討。第39回有機典型元素化学討論会 (2012年12月, 盛岡) (ポスター)

○学生の学会発表実績

	国際学会 件数	国内学会 件数
学部4年生 ⁽¹⁾	0	2
博士課程前期 ⁽²⁾	5	11
博士課程後期 ⁽³⁾	5	4
博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾	1	1

○セミナー・講演会開催実績

山本 陽介, Konrad Seppelt教授講演会

日時: 平成24年7月25日(水) 15:30-

場所: 理学研究科 B301号室

講師: Konrad Seppelt教授 (ベルリン自由大学)

演題: Unusual Cations in Super Acidic Solutions

山本 陽介, Drabowicz教授講演会

日時: 平成24年10月30日(火) 10:00-

場所: 先端物質科学研究科 402N号室

講師: Drabowicz教授 (ポーランド化学アカデミー)

演題: Selected Synthetic and Structural Aspects in the Chemistry of Compounds Containing a Stereogenic Sulfur or Phosphorus Atom

山本 陽介, Dr. E. Lacote博士講演会

日時: 平成25年1月9日(水) 13:30-

場所: 理学研究科 E002号室

講師: Dr. E. Lacote (CPE Lyon, University of Lyon)

演題: NHC-Borane Complexes: from Stabi-Lized Reactive Intermediates to Polymer Synthesis

○社会活動・学外委員

山本 陽介, 第22期日本学術会議連携会員 (2011-)

山本 陽介, 基礎有機化学会副会長 (2012-)

山本 陽介, 日本化学会中国四国支部副支部長 (2013.3-)

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-)

・外部評価委員など

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, 2013年1月, 理学融合教育研究センター第7回ランチタイムセミナー講師, 附属理学融合教育研究センター, 題目: エキゾチックな分子の合成

・高大連携事業

山本 陽介, 2012年6月, 広島県立国泰寺高等学校SSH事業 (理学研究科)

山本 陽介, 2012年7月, 広島県立安古市高等学校, 模擬授業 (安古市高等学校)

山本 陽介, 2012年7月, 広島大学附属高等学校SSH事業 (理学研究科)

・論文誌編集委員

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

・討論会の組織委員

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

山本 陽介, The 1st International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules主催者

・その他の委員

山本 陽介, 中国四国・化学と工業懇話会常任運営委員 (2007-)

○共同プロジェクトへの参加状況 (国内)

山本 陽介: 先進機能物質研究センタープロジェクト 2010 一般課題 (2010-)一重項ビラジカル性を有する化合物の合成と非線形光学材料への展開

○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) 感応性化学種が拓く新物質科学,
代表者 山本 陽介

新学術領域研究 (研究領域提案型) 感応性高配位典型元素化合物の創製と反応,
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

科学研究費補助金基盤研究(C), 環境調和的で穏やかな新規フラン合成法の開発, 代表者 小島 聡志

○受賞状況 (学生)

菅原 峻 (D1), The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) “Poster Award”受賞, “Synthesis of New Carbene Ligands and Their Metal Complexes” (2012年5月)

晩田 成美 (B4), 理学部長賞受賞 (2013年3月)

晩田 成美 (B4), 日本化学会中国四国支部支部長賞受賞 (2013年3月)

○座長を行った学会・討論会の名称

山本 陽介: The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (2012年5月, 宇治)

山本 陽介: The 19th International Congress on Phosphorus Chemistry (ICPC-19) (2012年7月, ロッテルダム)

山本 陽介: 分子研研究会 「無機化学の現状と未来:若い世代が切り開く新しいサイエンス」 (2013年1月, 岡崎)

河内 敦, The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2012年12月, 東広島)

河内 敦, 日本化学会第 93 春季年会 (2013 年 3 月, 南草津)

○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)
(2010.2-2013.3)

河内 敦, 理学研究科衛生管理者 (2012)

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-)

小島 聡志, 外国語教育研究センター運営委員会委員 (2012-)

小島 聡志, 理学融合教育研究センター運営委員会委員 (2012-)

小島 聡志, 高等学校「化学」(第一学習社) 編集委員 (2008-)

反応有機化学研究グループ

スタッフ 安倍 学 (教授), 高木 隆吉 (助教)

○研究活動の概要

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。

三重項励起状態アゾ化合物の反応性の及ぼす置換基効果を見いだした。 π 単結合生化合物の長寿命化に及ぼすストレッチ効果を見いだした。

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。

新規な強酸性のキラルプレンステッド酸や C-H 結合の直接的官能基化が期待される新規な有機分子触媒の開発を行った。

○発表原著論文

R. Takagi, K. Yamamoto, Y. Hiraga, S. Kojima, M. Abe (2013) ©A Novel Non-metathetic Behavior of Grubbs Catalyst: Ruthenium-mediated Intramolecular [3 + 2] cycloaddition of bis-1,3-dienes, *J. Organomet. Chem.*, **723**, 171-175.

M. Abe, S. Watanabe, H. Tamura, S. Boinapally, K. Kanahara, Y. Fujiwara (2013) ©Stereochemical Substituent Effect on Reactivity of Triplet Excited State of 2,3-Diazabicyclo[2.2.1]hept-2-enes, DBH Derivatives: C-N Bond Cleavage versus C-C Bond Cleavage, *J. Org. Chem.*, **78**, 1940-1948.

M. Abe, H. Furunaga, D. Ma, L. Gagliardi, G. Bodwell (2012) ©Stretch Effects Induced by Molecular Strain on Weakening σ -Bonds: Molecular Design of Long-Lived Diradicals (Biradicals), *J. Org. Chem.*, **77**, 7612-7619.

○著書

安倍 学, 炭素-炭素 π 単結合の創製による新規 π 電子系の構築, 新材料・新素材シリーズ, 高次 π 空間の創発と機能開発, シーエムシー出版, 16-22, 2013.

安倍 学, 新しい π 電子系の化学, CSJ カレントレビュー, 未来材料を創出する π 電子系の科学: 新しい合成・構造・機能かに向けて, 化学同人, Chapter 10, 112-119, 2013.

○総説

Abe, M.; Ye, J.; Mishima, M. (2012) The Chemistry of Localized Singlet 1,3-Diradicals (Biradicals): from Putative Intermediates to Persistent Species and Unusual Molecules with a π -Singlet Bonded Character, *Chem. Soc. Rev.*, **41**, 3808-3820.

藤井良美, 安倍 学 (2013) 光[2+2]付加環化反応(Paternò-Büchi)反応によるオキセタンの選択的合成, 光化学協会誌, **44**, 2-10.

○国際会議

M. Abe: Regio- and Stereoselective Formation of Oxetanes Using Radical Ion Pairs and Triplet 1,4-Diradicals. International Symposium on Chemistry and Chemical Biology of Natural Products (August, 2012, Hyderabad, India) (招待講演)

M. Abe: Stretch Effects Induced by Molecular Strain on Weakening σ -Bonds: Molecular Design of Long-lived Diradicals (Biradicals). The 7th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules (October, 2012, Hsincyu, Taiwan) (招待講演)

Y. Morikawa, M. Abe: The Chemistry of 2-Silyl-substituted 1,3-biradicals. The 4th Asian Silicon Symposium (October, 2012, Tsukuba, Japan) (ポスター)

M. Abe: Generation of Long-lived Singlet Diradicaloids with π Single-bonded Species. 1st

○国内学会

安倍 学, 古永遥香, Donxia Ma, Laura Gagliardi, Graham Bodwell: ストレッチ効果を利用したマルチラジカルの長寿命化。高次 π 空間の創発と機能開発 第8回公開シンポジウム (2012年7月, 加賀市) (ポスター)

安倍 学, 三島 愛, 藤原好恒, 石橋孝章, 背山 信: レーザーフラッシュフォトリシス法を用いた長寿命一重項ビラジカルの発生とその反応挙動に関する研究。2012年光化学討論会 (2012年10月, 東京都) (一般講演)

Yuya Sakamoto, Huang Bo, Manabu Abe: Synthesis and Photochemical Reactivity of Novel Coumarin-based Caged Compounds. (2012年10月, 東京都) (ポスター)

尾下隆英, 藤原好恒, 安倍 学: 一重項 1,3-ジアリール-2,2-ジメトキシ-1,3-ビラジカルの寿命に及ぼすアリール基の効果: π 単結合性との相関。第23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (一般講演)

叶 建准, 藤原好恒, 安倍 学: 一重項 1,3-ビラジカルの速度論的安定化。第23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (ポスター)

三島 愛, 藤原好恒, 石橋孝章, 背山 信, 安倍 学: レーザーフラッシュフォトリシス法を用いた長寿命一重項ビラジカルの発生とその反応挙動に関する研究。第23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (ポスター)

重川泰之・安倍 学: 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の変化。第23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (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 Paternò-Büchi 反応における位置及び立体選択性に関する研究。第23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (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。第23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (ポスター)

岡本一茂, 中村岳史, 古川 貢, 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23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (ポスター)

渡辺新治, 田村大志, 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23回基礎有機化学討論会 (2012年9月, 京都市) (ポスター)

中垣知幸, 安倍 学: 一重項ビラジカルの寿命に及ぼすアルコキシ基の効果。2012年日本化学会西日本大会 (2012年11月, 佐賀市) (一般講演)

安倍 学: π 単結合生化合物の長寿命化。高次 π 空間の創発と機能開発 第9回公開シンポジウム (2013年3月, 神戸市) (一般講演)

水野武見, 安倍 学: 三重項増感反応による 2,2-ジアルコキシシクロプロパン-1,3-ジラジカルの発生とその反応挙動に関する研究。日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

中垣知幸, 坂井智子, 藤原好恒, 安倍 学: π 単結合性を持つ一重項ジラジカルの寿命に及ぼすアルコキシ基の効果。日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

重川泰之, 安倍 学: ニトロキシドラジカルを持つシクロペンタン-1,3-ジラジカルの閉環反応に伴うスピン多重度の変化。日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

Srikanth Bonapally, 安倍 学: 新規ケージドグルタミン酸の合成とその光反応性。日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

藤井良美, 安倍 学: フルフリルアルコール誘導体の Paterno-Büchi 反応。日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

小坂有史, 安倍 学: アリルアミン類とベンゾフェノンとの Paterno-Büchi 反応における位置選択性に及ぼす置換基効果。日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 草津市) (一般講演)

坂井雄一郎, 高木隆吉, 安倍 学: 強酸性部位が隣接したキラルブレンステッド酸を用いた不斉分子内ヒドロアミノ化反応。日本化学会第 93 春季年会 (2013 年 3 月, 草津市) (一般講演)

元石流星, 安倍 学: 2 光子吸収に優れた光解離性保護基の合成。日本化学会第 93 春季年会 (2013 年 3 月, 草津市) (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	1
博士課程前期	1	17
博士課程後期	0	1
博士課程前期・後期共	0	0

○セミナー・講演会開催実績

安倍 学, Professor Jye-Shane Yang 講演会

日時: 平成 24 年 7 月 24 日(火) 15:30-17:00

会場: 広島大学理学部 E-002 教室

演題: Isotruxene-Cored π -Systems: Toward 2D π -Conjugation

安倍 学, Professor Norbert Hoffmann 講演会

日時: 平成 24 年 10 月 2 日(火) 15:30-17:00

会場: 広島大学理学部 B-301 教室

演題: Electron and Hydrogen Transfer in Organic Photochemical Reactions

安倍 学, Professor Maria Cristiano 講演会

日時: 平成 24 年 11 月 12 日(月) 15:45-16:45

会場: 広島大学理学部 B-301 教室

演題: New Insights into the Photochemistry of Tetrazoles

安倍 学, Professor Wes Borden 講演会

日時: 平成 24 年 11 月 12 日(月) 16:50-17:50

会場: 広島大学理学部 B-301 教室

演題: Why Does Cyclobutane-1,2,3,4-tetraone Have a Triplet Ground State?

○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 (2010-12)

基礎有機化学会・事務局(2012-)

・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 (2009-2012)

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-)

○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) (2012)

Graham Bodwell 博士 (カナダ, Memorial Univ.) (2012)

Laura Gagliardi 博士 (米国, Minnesota Univ.) (2012)

Wes Borden 博士 (米国, North Texas Univ.) (2012)

Claudine Katan 博士 (仏国 CNRS Universite de Rennes) (2012)

・国際会議組織委員

International Symposium on Reactive Intermediates and Unusual Molecules (2005-)

○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, 新学術領域計画研究, 光感应性 π 単結合化合物の創製と機能, 安倍 学
JST-CREST 分担研究, 光制御用分子の合成, 安倍 学

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

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)

三島 愛 (M2), 第23回基礎有機化学討論会ポスター賞「レーザーフラッシュフォトリス法を用いた長寿命一重項ピラジカルの発生とその反応挙動に関する研究」(2012)

三島 愛 (M2), The 9th Nabit Symposium, The Best Student Presentation Award「Nitrogen-atom effect on the reactivity of cyclopentane-1,3-diyls」(2012)

○座長を行った学会・討論会の名称

安倍 学, The 7th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules (October, 2012, Hsincyu, Taiwan) 2012年10月

安倍 学, 第23回基礎有機化学討論会, 京都市, 2012年9月

安倍 学, 光化学討論会, 東京都, 2012年9月

安倍 学, 日本化学会第93春季年会, 草津, 2013年3月

安倍 学, 1st International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules (March, 2013, Hiroshima, Japan)

○その他特記事項

おもしろワクワク化学の世界-'12 広島化学展ミニ版 (平成24年8月1日, 広島市こども文化科学館)

スタッフ 相田 美砂子 (教授), 石橋 孝章 (准教授) (8月まで), 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アミノ酸残基の双極子モーメント: アミノ酸残基はタンパク質構成成分として、その高次構造に依存した双極子モーメントをもつ。高次構造によるアミノ酸残基の双極子モーメントをあらかじめ知っておけば、蛋白質全体あるいは部分構造の双極子モーメントを予測することができ、反応性や機能の予測に有用である。そこで、まず、最小単位であるグリシン残基について、 α ヘリックスおよび β シートの高次構造をとっているときの双極子モーメントを計算した。さらに、実際に、そのベクトル和として、ポリペプチドのマクロ双極子モーメントを予測できることを明らかにした。

②アダマンタン及びそのハロゲン置換体の水和構造: アダマンタンにハロゲン置換を導入すると、水和構造がどのように変わるのかをモンテカルロ計算により明らかにした。親水性の置換基の導入が、必ずしも常に水分子の分布の増大につながらないことを見出した。

③時間分解赤外分光によるシクロペンタン-1,3-ジイル型ビラジカルの振動スペクトルの観測: ラジカル炭素に置換したパラシアノフェニル基のシアノ基をもつ基底状態のスピン多重度が異なる二種 (一重項ビラジカル: 1,3-di(4-cyanophenyl)-2,2-dimethoxyoctahydropentalene-1,3-diyl, 三重項ビラジカル 1,3-di(4-cyanophenyl)-2,2-dimethyloctahydropentalene-1,3-diyl) のビラジカルを測定対象とした。両ビラジカル種の CN 伸縮振動数は、対応する構造を持つ閉殻種に対して大きな低波数シフトを示すことがわかった。スピン多重度に依存して異なるシフト量を、ラジカル性の大小と関連させ議論した。

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。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

Shunsuke Mieda and Misako Aida (2012) Dipole Moments of Amino Acid Residues, Gly and Ala, in α -Helix: Quantum Chemical Building Blocks for Macrodipole Moment of α -Helical Polypeptide. *Chemistry Letters*, **41** (12), 1579-1580.

Adchara Padermshoke, Shouta Konishi, Masato Ara, Hirokazu Tada, and Taka-aki Ishibashi (2012) Novel SiO₂-deposited CaF₂ Substrate for Vibrational SFG Measurements of Chemisorbed Monolayers under Aqueous Environment. *Applied Spectroscopy*, **66**, 711-717.

K. Nishi, M. Chijiishi, Y. Katsumoto, T. Nakao, K. Fujii, U. Chung, H. Noguchi, T. Sakai, and M. Shibayama (2012) Rubber elasticity for incomplete polymer networks. *J. Chem. Phys.* **137**, 224903.

T. Shimoaka, T. Hasegawa, K. Ohno, and Y. Katsumoto (2012) Correlation between the Local OH Stretching Vibration Wavenumber and the Hydrogen Bonding Pattern of Water in a Condensed Phase: Quantum Chemical Approach to Analyze the Broad OH Band. *J.Mol. Struct.* **1029**, 209-216.

T. Fujiwara, Y. Taniguchi, Y. Katsumoto, T. Tanaka, M. Ozeki, H. Iwasaki, M. Node, M. Yamashita, and S. Hosoi (2012) Novel approach to determining the absolute configurations at the C3-positions of various types of sterols based on an induced circular dichroism *Steroids* **77**, 1198-1204.

T. Hirano, T. Anmoto, N. Umezawa, H. Momose, Y. Katsumoto, M. Oshimura, and K. Ute (2012)

- Application of multivariate analysis of NMR spectra of poly(*N*-isopropylacrylamide) to assignment of stereostructures and prediction of tacticity distribution. *Polym. J.* **44**, 815–820.
- T. Fujiwara, Y. Taniguchi, Y. Katsumoto, T. Tanaka, M. Node, M. Ozeki, M. Yamashita, and S. Hosoi (2012) Induced Circular Dichroism in a Chiral *N*-Methylamide Possessing an Achiral Binaphthyl Chromophore and Its Application to Determining Absolute Configuration of the Aliphatic Chiral Amines. *Tetrahedron: Asymmetry* **23**, 981-991.
- Y. Katsumoto, A. Tsuchiizu, X. Qiu, and F. Winnik (2012) Dissecting the Mechanism of the Heat-Induced Phase Separation and Crystallization of Poly(2-isopropyl-2-oxazoline) in Water through Vibrational Spectroscopy and Molecular Orbital Calculations *Macromolecules* **45**, 3531-3541.
- K. Nishi, K. Fujii, M. Chijiishi, Y. Katsumoto, U. Chung, T. Sakai, and M. Shibayama (2012) Kinetic Study for AB-Type Coupling Reaction of Tetra-Arm Polymers *Macromolecules* **45**, 1031-1036.
- 相田 美砂子, 吉田 智喜 (2012) 論文分析からみる広島大学の研究動向 —主として自然科学分野について—. 大学論集, **43**, 285-299.
- 勝本之晶 (2012) 高分子の溶媒和と量子化学計算によるスペクトルシミュレーション。分光研究 **61**, 108-118.

○著書

Misako Aida, Dai Akase, Hideo Doi, Tomoki Yoshida: Digraphs in Chemistry: All Possible Structures and Temperature-Dependent Distribution of Water Clusters. In Practical Aspects of Computational Chemistry II: An Overview of the Last Two Decades and Current Trends (eds. Jerzy Leszczynski, Manoj K. Shukla) Springer, Netherlands, pp.49-68, 2012.

○国際会議

- Yukiteru Katsumoto, Bojana Ginovska-Pangovska, Aida Misako, and Michel Dupuis: How the intermolecular interaction affects the solubility of the acryl amide polymers. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium The 6th Japanese-Russian Seminar (December 2012, Hiroshima) (一般講演)
- Dai Akase, Misako Aida, and Sotiris S. Xantheas' Aqueous solvation of α -, β -, and γ -Cyclodextrins: from first principles to classical force fields. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium / The 6th Japanese-Russian Seminar (December 2012, Hiroshima) (一般講演)
- Sakiko Idei, Misako Aida: A theoretical study of structures and stabilities of hexopyranose anomers in vacuo and in aqueous solution. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 6th Japanese-Russian Seminar (December 2012, Hiroshima) (一般講演)
- Yudai Watanabe, Hideo Doi, Misako Aida: A theoretical study on TMAO hydration structure. The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium and The 6th Japanese-Russian Seminar (December 2012, Hiroshima) (一般講演)
- Y. Katsumoto, A. Tsuchiizu, T. Hasegawa: Water sorption on a thin film of stereocontrolled acrylamide polymers. *14th International Conference on Organized Molecular Films*, Paris (July 2012, Paris France) (ポスター)
- Shunsuke Mieda, Misako Aida: Dipole Moments of Amino Acid Residues in α -Helix. The 14th International Congress of Quantum Chemistry (June 2012, Colorado, United States) (ポスター)
- Dai Akase, Misako Aida: Quantum Chemical Studies of α -, β -, and γ -Cyclodextrin Monomers and Dimers. The 14th International Congress of Quantum Chemistry (June 2012, Colorado, United States) (ポスター)

○国内学会

- 勝本 之晶: アクリルアミド系高分子の微細構造と巨視的溶液物性の相関。アジア連携分子研究会 (2012年6月, 岡崎) (招待講演)
- 相田美砂子: QM/MM法による生理活性分子の構造と水和エネルギー。CACフォーラム (2012年10月, 広島) (依頼講演)
- 勝本 之晶: 水溶性高分子の近接相互作用と感熱応答性。第二回次世代の物質科学・ナノサイエンスを探る (2013年1月, 札幌) (依頼講演)
- 赤木 友紀, 片島 拓弥, 勝本 之晶, 藤井 健太, 柴山 充弘, 鄭 雄一, 酒井 崇匡: Tetra-PEG gel の延伸挙動に及ぼす網目構造の効果。第61回高分子学会年次大会 (2012年5月, 横浜) (一般講演)

西 健吾, 千々石 雅志, 勝本 之晶, 藤井 健太, 鄭 雄一, 酒井 崇匡, 柴山 充弘 : 高度に制御された高分子網目の形成機構と構造の相関。第 61 回高分子学会年次大会 (2012 年 5 月, 横浜) (一般講演)

勝本 之晶 : アクリルアミド系高分子の溶媒和～分子動力学計算の試み。高分子基礎研究会 2013 (2013 年 1 月, 広島) (一般講演)

出射早希子, 相田美砂子 : 気相中および水溶液中におけるグルコースピラノースの構造と安定性についての理論化学的研究。第15回理論化学討論会 (2012年5月, 仙台) (一般講演)

背山 信, 三島 愛, 前田 晃宏, 安部 学, 石橋 孝章 : カルボニル基を持つシクロペンタン-1,3-ジイル型一重項ピラジカル種の時間分解赤外分光。第 6 回分子科学討論会 (2012 年 9 月, 東京) (一般講演)

出射早希子, 相田美砂子 : 気相中および水溶液中におけるヘキソピラノースアノマーの安定性についての理論化学的研究。第 35 回情報化学討論会 (2012 年 10 月, 広島) (一般講演)

渡部雄大, 土居英男, 相田美砂子 : オスマライトの水和構造に関する理論化学的研究。2012 年 日本化学会西日本大会 (2012年11月, 佐賀) (一般講演)

田中 文彦, 勝本 之晶, 中野 慎也, 喜多 理王 : 立体規則性ポリイソプロピルアクリルアミド水溶液の LCST 相分離と高温ゲル化の競合現象。第 61 回高分子学会年次大会 (2012 年 5 月, 横浜) (ポスター)

勝本 之晶, 山本 美恵 : 立体規則性がアクリルアミド系高分子の溶媒和に与える影響—蛍光プローブ法と赤外分光法によるアプローチ。第 61 回高分子学会年次大会 (2012 年 5 月, 横浜) (ポスター)

三枝俊亮, 相田美砂子 : α ヘリックスにおける L-と D-アミノ酸残基の双極子モーメント。第 6 回分子科学討論会 (2012 年 9 月, 東京) (ポスター)

杉本廣之, 吉田智喜, 相田美砂子 : 核内受容体リガンド機能を有する天然物化合物についての計算化学からの検討。第 35 回情報化学討論会 (2012 年 10 月, 広島) (ポスター)

赤瀬大, 相田美砂子, 寺前裕之 : プロトン化水クラスターの安定構造の網羅的探索。第 35 回情報化学討論会 (2012 年 10 月, 広島) (ポスター)

土居英男, 相田美砂子 : アダマンタン誘導体と水分子における水和の解析。第35回情報化学討論会 (2012年10月, 広島) (ポスター)

三枝俊亮, 相田美砂子, 阿部幸浩 : γ -PGAの構造および物性に関する計算化学的研究。第35回情報化学討論会 (2012年10月, 広島) (ポスター)

渡部雄大, 相田美砂子 : 浸透圧調整物質の特異な水素結合形成能に関する理論化学的研究。第 35 回情報化学討論会 (2012 年 10 月, 広島) (ポスター)

堀内輔, 勝本之晶 : 立体規則性を制御したPNiPAmハイドロゲル作製の試み。高分子基礎研究会2013 (2013年1月, 広島) (ポスター)

力山和晃, 勝本之晶 : 高分子表面へのタンパク質吸着のATR法による解析。高分子基礎研究会2013 (2013年1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⁾	0	2
博士課程前期 ⁽²⁾	1	4
博士課程後期 ⁽³⁾	3	4
博士課程前期・後期共 ⁽⁴⁾	0	0
学部 4 年生・博士課程後期共 ⁽⁵⁾	1	1

○セミナー・講演会開催実績

相田 美砂子, 「第 138 回 量子生命科学セミナー」 (2012 年 10 月 3 日)

相田 美砂子, 「第 139 回 量子生命科学セミナー」 (2012 年 12 月 12 日)

相田 美砂子, 「第 140 回 量子生命科学セミナー」 (2012 年 12 月 19 日)

相田 美砂子, 企業人材セミナー (第 29 回～第 33 回) (2012 年 5 月～8 月)

相田 美砂子, 企業人材セミナー (第 34 回～第 40 回) (2012 年 10 月～2013 年 3 月)

相田 美砂子, 第6回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会 (2012年9月14日)
相田 美砂子, 第7回広島大学若手研究人材養成センター成果報告会 (2013年3月11日)
相田 美砂子, 第4回広島大学若手研究人材養成シンポジウム (2013年3月11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, 2012-)
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, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2011)
石橋 孝章, 分光イノベーション研究会実行委員 (2012-)
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

相田 美砂子, 「第4回担当者会議 (ポストドクター・キャリア開発事業)」コーディネータ (2012年7月6日・7日, 広島市)

・高大連携事業

相田 美砂子, 勝本 之晶, 広島県科学オリンピックセミナー講師 (2012年8月20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 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium 実行委員長 (2012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)
相田 美砂子, 2013年 日本化学会中国四国支部大会 実行委員長 (2013年11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

○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, 新学術領域研究(研究領域提案型) 公募研究
「生理活性分子の分子設計のための理論化学的研究」(代表:相田 美砂子)

文部科学省科学研究費補助金, 基盤研究B
「高感度振動SFG分光による水溶液中の生体分子膜の研究」(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SFG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 基盤研究C
「ピナフチル型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)

赤瀬 大 (博士課程後期3年)

The Best Student Presentation Award, The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2012, Higashi-Hiroshima, Japan)

○座長を行った学会・討論会の名称

勝本 之晶, アジア連携分子研研究会 (2012年6月, 岡崎)

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24年度は、博士課程前期に0名、後期に1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24年度（2012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	4
	基盤研究(A)	1
	基盤研究(B)	4
	基盤研究(C)	7
	挑戦萌芽研究	4
	若手研究(A)	0
	若手研究(B)	1
	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（2007-2010）
- 江幡孝之，分子科学会運営委員（2012-）
- 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-）
- 西原禎文，化学教育協議会広島支部幹事（2011年～）
- 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-）
- 藤原照文，日本分析化学会，中国四国支部長（2012）
- 石坂昌司，日本化学会北海道支部庶務幹事（2011）
- 石坂昌司，日本化学会，中国四国支部庶務幹事（2012）
- 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）
- 石坂昌司，日本分析化学会，中国四国支部庶務幹事（2012-）
- 岡本泰明，日本分析化学会中国四国支部庶務幹事（2011-）
- 灰野岳晴，新規素材探索研究会幹事（2001-）
- 灰野岳晴：生体機能関連化学部会・中国四国支部若手幹事（2004-2005）
- 灰野岳晴，ホスト・ゲスト化学研究会幹事（2006-）

灰野岳晴, 有機合成化学協会中国四国支部幹事 (2007-)
灰野岳晴, 日本化学会中国四国支部庶務幹事 (2008)
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-)
山本陽介, 基礎有機化学会副会長 (2012-)
山本陽介, 日本化学会中国四国支部副支部長 (2013. 3-)
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 (2010-12)
安倍 学, 基礎有機化学会・事務局 (2012-)
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 (2009-)
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 産学連携コー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)

山本陽介, 2013年1月, 理学融合教育研究センター第7回ランチタイムセミナー講師, 附属理学融合教育研究センター, 題目: エキゾチックな分子の合成

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), 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」モンリオール大学化学科セミナー, 講師, 2011年9月, Montréal (Canada)

福原幸一他, サイエンスカフェ「サイエンススコープ ～科学者が見ている世界～」(2012年3月, 広島大学)

・ 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)

石坂昌司, 広島国泰寺高等学校SSH事業 (2012年6月, 広島大学)

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

山本陽介, 2012年6月, 広島県立国泰寺高等学校SSH事業 (理学研究科)

山本陽介, 2012年7月, 広島県立安古市高等学校, 模擬授業 (安古市高等学校)

山本陽介, 2012年7月, 広島大学附属高等学校SSH事業 (理学研究科)

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)

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-)

石坂昌司, Analytical Sciences (Special Issue: Young Generation in Analytical Sciences) 29(1), 2013, ゲストエディター (2013)

・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)

岡田和正, 第27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 (2013-)

水田 勉, 錯体化学会, 錯体化学討論会運営委員 (2006-)

水田 勉, 日本化学会 CSJ化学フェスタ実行委員会委員 (2012-)

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)
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)
石坂昌司, 日本分析化学会第58年会実行委員会委員 (2008-2009)
石坂昌司, 2013年日本化学会中国四国支部大会実行委員 (2012-2013)
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)
山本陽介, The 1st International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules主催者
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」代表 (2012-)
福原幸一, 理学研究科附属理学融合教育研究センターアウトリーチ部門委員 (2012-)
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)
久米晶子, 錯体化学会 錯体化学会将来計画員会委員 (2010-2011)
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)
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)
灰野岳晴: 理学研究科安全衛生委委員 (2011年4月~2013年3月)
灰野岳晴: 理学研究科化学専攻長 (2012年4月~2013年3月)
灰野岳晴: 理学研究科人事交流委員会 (2012年4月~2013年3月)
灰野岳晴: 理学研究科施設活用委員 (2012年4月~2014年3月)
灰野岳晴: 理学研究科評価委員 (2012年4月~2014年3月)
灰野岳晴: 理学研究科大学院委員 (2012年4月~2014年3月)
灰野岳晴: 理学研究科地区防災対策委員 (2012年4月~2013年3月)
灰野岳晴: 理学部化学科教務問題検討委員 (2012年4月~2013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 (2012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-
 西原禎文: University of Glasgow, Visiting Senior Researcher, 2012年10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 (2012年度)

江幡孝之, Gordon research Conference on Atomic and Molecular Interactions (July 15-20, 2012, Stonehill college, MA, USA)
 江幡孝之, 1st symposium on weak molecular interactions (March 5-6, 2013, Pećs Hungary)
 井口佳哉, 第5回分子科学討論会 (2011年9月, 札幌)
 岡田和正, 第28回化学反応討論会 (2012年6月, 福岡)
 岡田和正, The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium, Higashi-Hiroshima, December 2012.
 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)
灰野岳晴: 日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 滋賀)
灰野岳晴: The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2012, Hiroshima, Japan)
灰野岳晴: 第9回ホスト・ゲスト化学シンポジウム (2012年5月, 北海道)
灰野岳晴: 7th Japan-Taiwan Bilateral Symposium (Oct. 2012, Hsinchu, Taiwan)
灰野岳晴: 第61回高分子討論会 (2012年9月, 愛知)
関谷亮: The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (Dec. 2012, Hiroshima, Japan)
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)
山本陽介: The 10th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-10) (2012年5月, 宇治)
山本陽介: The 19th International Congress on Phosphorus Chemistry (ICPC-19) (2011年7月, ロッテルダム)
山本陽介: 分子研研究会 「無機化学の現状と未来: 若い世代か “切り開く新しいサイエンス” (2013年1月, 岡崎)
河内 敦, The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium (2012年12月, 東広島)
河内 敦, 日本化学会第93春季年会 (2013年3月, 南草津)
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
安倍 学, The 7th Taiwan-Japan Bilateral Symposium on Architecture of Functional Organic Molecules (October, 2012, Hsinchu, Taiwan) 2012年10月
安倍 学, 第23回基礎有機討論会, 京都市, 2012年9月
安倍 学, 光化学討論会, 東京都, 2012年9月
安倍 学, 日本化学会第93春季年会, 草津, 2013年3月
安倍 学, 1st International Symposium on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules (March, 2013, Hiroshima, Japan)
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 (2012年度)

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

山本陽介, Konrad Seppelt教授 (ベルリン自由大学) 講演会「Unusual cations in super acidic solutions」(平成24年7月25日(水) 15:30-, 理学研究科 B301号室)

山本陽介, Drabowicz教授 (ポーランド化学アカデミー) 講演会「Selected Synthetic and Structural Aspects in the Chemistry of Compounds Containing a Stereogenic Sulfur or Phosphorus Atom」(平成24年10月30日(火) 10:00-, 先端物質科学研究科 402N号室)

山本陽介, E. Lacote (CPE Lyon, University of Lyon) 博士講演会「NHC-Borane complexes: from stabilized reactive intermediates to polymer synthesis」(平成25年1月9日(水) 13:30-, 理学研究科 E002号室)

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)

安倍 学, Professor Jye-Shane Yang 講演会「Isotruxene-Cored π -Systems: Toward 2D π -Conjugation」(平成24年7月24日(火) 15:30-17:00, 広島大学理学部 E-002教室)

安倍 学, Professor Norbert Hoffmann 講演会「Electron and Hydrogen Transfer in Organic Photochemical Reactions」(平成24年10月2日(火) 15:30-17:00, 広島大学理学部 B-301教室)

安倍 学, Professor Maria Cristiano 講演会「New Insights into the Photochemistry of Tetrazoles」(平成24年11月12日(月) 15:45-16:45, 広島大学理学部 B-301教室)

安倍 学, Professor Wes Borden 講演会「Why Does Cyclobutane-1, 2, 3, 4-tetraone Have a Triplet Ground State?」(平成24年11月12日(月) 16:50-17:50, 広島大学理学部 B-301教室)

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 (2012年度)

江幡孝之, 井口佳哉: 共同研究「長半減期核種の質量分析技術開発に向けた選択的イオン化法に関する研究」独立行政法人日本原子力研究開発機構(2012-)

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 (2012)

福原幸一, 特許取得, 抑泡剤および可塑剤の製造方法、ならびに抑泡剤、および可塑剤, 特許第5223087 (2012)

・国際共同研究・国際会議開催実績 (2012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-

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

安倍 学, カナダ Memorial Univ.との国際共同研究 (2012-)

安倍 学, 米国 Minnesota Univ.との国際共同研究 (2012-)

安倍 学, 米国 North Texas Univ.との国際共同研究 (2012-)

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

1-5 その他特記事項

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 (8月まで),
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

医歯薬保健学研究院

小澤 孝一郎, 古武 弥一郎, 原田 隆範

工学研究院

森本 康彦, 大倉 和博

研究員

Adchara Padermshoke, 杉本 廣之, 吉田 智喜

○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 24 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

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29回	新コスモス電機(株)	平成24年5月11日
第30回	バブコック日立(株)	平成24年5月25日
第31回	博士の生き方	平成24年6月8日
第32回	旭化成ケミカルズ(株)	平成24年6月22日
第33回	トヨタ紡織(株)	平成24年8月3日
第34回	(株)日立製作所	平成24年10月15日
第35回	(株)トクヤマ	平成24年11月9日
第36回	(株)ジェイ・エム・エス	平成24年11月22日
第37回	東洋紡(株)	平成24年12月14日
第38回	(株)日本製鋼所	平成25年1月11日
第39回	塩野義製薬(株)	平成25年1月24日
第40回	日亜化学工業(株)	平成25年2月7日

②「量子生命科学セミナー」の開催

第138回 2012年10月3日(水) 16:20~17:50 理学部 B305 室
講演題目: トポロジカル・インデックスは如何に生まれ、育って来たか
講演者: 細矢 治夫 先生 (お茶の水女子大学 名誉教授)

第139回 2012年12月12日(水) 12:50~16:00 理学部 C104 室
講演題目: 創薬の現場における学際的な研究者の役割
講演者: 大川 和史 氏 (持田製薬株式会社)

③ The 9th Nano Bio Info Chemistry Symposium の開催

Date: Dec.8 (Sat) – 9 (Sun), 2012

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

英語での口頭発表のみの「第9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: 5

Prof. Inara E. Alidzanova (Orenburg University)

“Endometallofullerene influence on the bacterial populations Escherichia coli”

Prof. Sergey N. Letuta (Orenburg University)

“Orenburg University”

Prof. Vitaly L. Berdinskiy (Orenburg University)

“New spin dependent processes in physics, chemistry and molecular biology”

Prof. Ludmila V. Dokashenko (Orenburg University)

“Japan culture center of the Orenburg University”

Prof. Sergey N. Letuta et al. (Orenburg University)

“Delayed Fluorescence of Exogenous Phosphors in Tissues”

・参加者数: 98 人 (内学生数=69 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 2 名

Fumiya Morishima

“The spectroscopic study of estrogen and its hydrogen bonding abilities”

Dai Akase

“Aqueous solvation of α -, β -, and γ -cyclodextrins: from first principles to classical force fields”

Student Award 4 名

Yunzi Xin

“Blue LED Developed by Si-Quantum-Dot/Polymer Hybrid Material: High Current Density and Optical Power Density”

Jiang Ma

“A laser trapping-spectroscopy study on mass transfer processes across a single micro-droplet/air”

interface”

Jun Yamashita

“Generation of Vibrationally Excited $S_2(X^3\Sigma_g^-$ and $a^1\Delta_g)$ in the $S(1D) + OCS$ Reaction”

Megumi Mishima

“LFP study on Generation of Long-lived Singlet 1,2-Diaza-4,4-dialkoxycyclopentane-3,5-diyls”

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 (NaBiT 生命科学系集中講義)

2012年9月8日(土)～9月15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:2012年10月24日～12月13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24日(水)12:50-14:10 自然認識と思考、計算、計算機

第2回10月24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25日(木)12:50-14:10 熱力学とマックスウエルのデモン

第4回10月25日(木)14:35-16:05 ボルツマン分布と統計力学

統合テーマ:「もの」の科学と「こと」の科学

第5回11月14日(水)12:50-14:10 古典物理学の統計的な性格

第6回11月14日(水)14:35-16:05 分子から生命の科学へ

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15日(木)12:50-14:10 量子力学の理論形式

第8回11月15日(木)14:35-16:05 スピンと2状態系の量子力学

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28日(水)12:50-14:10 多粒子系の量子力学

第10回11月28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11月29日(木)12:50-14:10 量子情報・量子計算の原理

第12回11月29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12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12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13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。2012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6人目である。

三枝 俊亮 (2013年3月23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（1名）と研究員（1名）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3年）2011年12月27日～2012年12月5日

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

受入れ研究者： Dr. Sotiris Xantheas

派遣研究員： 吉田 智喜（研究員）2012年4月26日～（2年間）

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25年3月1日現在）および平成24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	
	大 賀 恭 (非常勤)	大分大学工学部応用化学科	
	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	
	久 枝 良 雄 (非常勤)	九州大学大学院工学研究院	
	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	
	准教授	石 坂 昌 司	化学専攻分子構造化学講座
		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 柳 克 夫	数理分子生命理学専攻生命理学講座
河 内 敦		化学専攻分子反応化学講座	
久 米 晶 子		化学専攻分子構造化学講座	
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	
関 谷 亮		化学専攻分子構造化学講座	
西 原 禎 文		化学専攻分子構造化学講座	
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	
	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	
波多野 さや佳	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		

2-3 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24年度化学科在籍学生数

平成24年5月1日現在

入学年度	在籍学生数
平成24年度	63(16)
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	5(1)
平成19年度	3(0)
平成18年度	4(0)
平成17年度以前	2(1)
合 計	268(75)

() 内は女子で内数

・チューター

入学年度	チューター
平成24年度	泉, 高口, 藤原(昌)
平成23年度	中田, 井口
平成22年度	井上, 小島, 勝本
平成21年度	藤原(照), 藤原(好)
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

・平成24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】	楯	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】	山本，水田	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
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，熱力学第一-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	江幡	量子化学，波動・粒子二重性，波動関数，シュレディンガー方程式
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 I A	石橋	熱力学，化学平衡，相平衡，相律
専門	2 前	必修	物理化学 I B	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 II A	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 II B	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	石坂	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 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	中田	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	久米	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	石坂，井上 久保，久米 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	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	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	化学インター ンシップ	泉	派遣研修, 職業倫理
専門	3前	必修	化学実験	小島	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	藤原(好) 片柳, 勝本, 高橋, 岡田	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	井口	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, 楯	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, 河内, 高木, 池田,	有機化学・演習・有機反応・有機構造・有機 反応機構
専門	3後	選択	有機金属化学	水田	典型元素および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 久枝 良雄 (九州大学大学院工学研究院/教授)
(酵素機能化学) 担当: 錯体化学グループ
化学特別講義 大賀 恭 (大分大学工学部/教授)
(有機反応論) 担当: 反応有機化学グループ

・担当授業科目一覧

平成24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, 先端化学			◎	
	井上 克也	基礎無機化学, 無機固体化学,	無機化学演習		◎	
	江幡 孝之	基礎化学A, 基礎物理化学B, 先端化学			◎	
	齋藤 健一	光機能化学		○	◎	
	楯 真一	生体高分子化学, 化学概説A			◎	
	中島 覚	放射化学			◎	
	中田 聡	分子光化学, 教養ゼミ			◎	
	灰野 岳晴	有機化学Ⅱ, 構造有機化学			◎	
	藤原 照文	機器分析化学			◎	
	水田 勉	有機金属化学, 化学概説B		○	◎	
	山崎 勝義	物理化学ⅡA, 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, 化学概説B			◎	
	准教授	石坂 昌司	無機化学Ⅲ,	無機化学演習	○	◎
		石橋 孝章	物理化学ⅠA,	物理化学演習		
		井口 佳哉	分子構造化学, 化学実験A		◎	◎
		岡田 和正	物理化学ⅠB	化学演習, 物理化学演習	○	◎
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	○	◎	
久米 晶子		無機化学Ⅲ	無機化学演習	○	◎	
高口 博志		教養ゼミ, 物理化学ⅡB	化学英語演習, 物理化学演習	○	◎	
小島 聡志		基礎有機化学	有機化学演習	○	◎	
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			○	○
	大前 英司	バイオインフォマティクス	有機化学演習	○	○	
	岡本 泰明		無機化学演習	○	○	
	勝本 之晶		物理化学演習	○	○	
	久保 和幸		無機化学演習	○	○	
	高木 隆吉		情報活用演習, 無機化学演習	○	○	
	高橋 修			○	○	
	仲 一成					
	福原 幸一		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24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						
教養 コア 科目	教養ゼミ	2	教養ゼミ	2	必修														
	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			○	○										
	外国 語 科目 (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	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	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	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)	「ベーシック外国語Ⅰ」から2単位	各1	必修	○														
「ベーシック外国語Ⅱ」から2単位		各1	必修		○														
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	11	(0)	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	(0)	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	(0)	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	(0)	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			
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ⅠA	2				②								
			物理化学ⅠB	2				②								
			物理化学ⅡA	2					②							
			物理化学ⅡB	2					②							
			無機化学Ⅰ	2				②								
			無機化学Ⅱ	2				②								
			無機化学Ⅲ	2					②							
			有機化学Ⅰ	2					②							
			有機化学Ⅱ	2					②							
	有機化学Ⅲ	2					②									
	無機化学演習	1						①								
	物理化学演習	1							①							
	有機化学演習	1								①						
	専門科目	2		先端数学	2	選択必修					○					
				先端物理学	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														
		43 (注5)	15以上		生物構造化学	2	選択必修					○				
					生体物質化学	2						○				
					有機分析化学	2							○			
					有機典型元素化学	2								○		
					反応動力学	2								○		
					分子構造化学	2								○		
					量子化学	2								○		
					無機固体化学	2								○		
					機器分析化学	2								○		
					構造有機化学	2								○		
					反応有機化学	2								○		
					光機能化学	2								○		
					システムバイオロジー	2								○		
					生体高分子化学	2									○	
					分子光化学	2									○	
					有機金属化学	2									○	
					放射化学	2									○	
					生物化学	2									○	
バイオフィオマティクス					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			
0 5 8			理学部他プログラムで開講される「専門基礎科目」及び「専門科目」の授業科目(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単位を超過して修得した「バックページ別科目」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』
- ・『基盤科目』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24年度化学科卒業生進路状況

(平成25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			
60 (22)	5 (4)	3 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	0 (0)	1 (0)	3 (0)	1 (0)	1 (0)	48 (16)	1 (1)	3 (1)

2-3-4 卒業論文発表実績

【1】平成24年度卒業研究生の各研究グループ配属者数

研究グループ名	卒研究生数	スタッフ名
化学専攻分子構造化学講座 構造物理化学研究グループ	5	江幡, 井口, 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	5	水田, 久米, 久保
分析化学研究グループ	4	藤原(照), 石坂, 岡本
構造有機化学研究グループ	5	灰野, 関谷, 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, 高木, 波多野
量子化学研究グループ	3	相田, 勝本
数理分子生命理学専攻 物理環境化学研究グループ	5	中田, 藤原(好), 藤原(昌)
生物化学研究グループ	5	泉, 芦田
分子生物物理学研究グループ	5	楯, 片柳, 大前
自然科学研究支援センター 光機能化学研究グループ	2	齋藤
放射線反応化学研究グループ	2	中島
計	61	

【2】平成24年度の卒業生と研究題目

浅井龍太郎	植物のエノン類還元酵素三種の立体選択性を決定する機構	生物化学
阿部加奈子	C-H活性化を目指したfront-to-front型2核錯体反応場の開発と反応基質の検討	錯体化学
石川 駿	オージェ電子-解離イオン同時計測法による炭素内殻励起cis-ヘキサフルオロシクロブタンの解離過程の研究	構造物理化学
石川 朋己	ロウソクのススを原料とした蛍光性炭素ナノ粒子の光化学物性	分析化学
犬伏菜々美	ガスクロマトグラフィーによる微量水素の測定とその定量限界に関する研究	光機能化学
今泉 早織	銅二価錯体による酸化カップリング触媒反応機構の電気化学的手法による研究	錯体化学
今村 太亮	金属配位により自己集合した分子カプセルの合成とゲスト包接に関する研究	構造有機化学
岩崎 邦祐	加熱気化導入-誘導結合プラズマ発光分析によるプラスチック中の微量水銀の直接定量法	分析化学
上田 知明	N-stearoyl-p-nitroaniline単分子膜上における樟脳円板の自律運動	自己組織化学
上谷実可子	タバコ培養細胞中でJAが配糖化される機構-1細胞ダイレクト質量分析法を用いた変換機構の解析-	生物化学
上原 基史	水熱合成法による酸化物磁性体の合成と物性評価	固体物性化学
江寄 駿人	光感受性Belousov-Zhabotinsky反応-光抑制条件で伝播する化学波の消滅-	自己組織化学
大西 冬馬	フェナントレン-TCNB CT錯体結晶に対する磁場の影響	自己組織化学
岡崎 恵美	クマリン化合物がもつ動物細胞へのアポトーシス誘導活性とラジカルスカベンジャーの構造的寄与を利用した新規MALDIマトリックスの開発	生物化学
岡崎 由貴	キラルな置換基を導入したニトロニルニトロキンドラジカル錯体の合成と物性評価	固体物性化学
奥田 芽以	RNA干渉介在タンパク質DicerのAgotaタンパク質結合領域のNMR構造解析	分子生物物理学
片山 慶一	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	分析化学
勝手 貴礼	銀を触媒とした化学エッチング法によるSiウエハからのナノワイヤ作製	光機能化学
加藤 直輝	デスモグレイン1-表皮剥脱毒素複合体の構造解明に向けた発現法の確立	分子生物物理学
門築ちひろ	振動励起OHのHeによる超低速緩和過程の速度論的研究	反応物理化学
金原 幸誠	シクロプロパン誘导体からの異常発光現象の解明に関する研究	反応有機化学
川口 智美	NADPH補酵素改変によるエノン類還元酵素を用いた増炭反応-NADPCNを用いた植物のエノン類還元酵素への新しい酵素機能追加-	生物化学
木瀬 翔太	Mo(IV)及びCu(II)を用いたシアノ架橋型錯体の合成と物性	固体物性化学
木原 翔也	福島県伊達市における土壤中の放射性物質の深度分布と土壤からのセシウムの抽出	放射線反応化学
木村 沙希	ホウ素原子上にペンタフルオロフェニル基を有するo-(ヒドロシリル)(ボリル)ベンゼンの合成研究	有機典型元素化学

國岡 周平	電子衝撃法による3-メチルピロールの窒素内殻励起領域における特異的解離	構造物理化学
神代 隼輔	フェナントレン骨格によるストレッチ効果を利用した開殻系分子の速度論的安定化	反応有機化学
桑名 祐里	溶解度の高い新規スフェランドの開発	有機典型元素化学
越宗 佑亮	磁気微小重力空間において作製したカーボンナノチューブ磁気配向薄膜の光学特性の解析	自己組織化学
澤井 麻子	脱カルボニル化反応を用いるジラジカルの発生とその反応挙動に関する研究	反応有機化学
下村 洋介	銀ナノ粒子-ピレン間相互作用についての研究	自己組織化学
須賀 陽音	不揮発性物質のレーザー気化とレーザー分光	構造物理化学
妹尾 一樹	BINAP骨格を有するキラルな環状カルボジホスホランを配位子にもつ金錯体の合成と反応性	錯体化学
世良 文香	ニオブを含むオクタシアノ架橋型錯体の合成と物性	固体物性化学
高木 沙弥	開殻系における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
高木 雄介	分子進化解明を目指したエストロゲン受容体-ブロック欠失変異体の構造解明向け調製法の検討	分子生物物理学
多田 航	トリニトロフルオレノンで両端を修飾したポリブタジエンポリマーとビスポルフィリンクレフト部位をもつホスト分子の合成研究	構造有機化学
立野 雄也	振動SFG分光法を用いたシリカ基板上マレイミド単分子膜の配向解析	量子化学
角田 優太	長鎖アルキルを導入した4,4'-ビスアセトキシビフェニルとカリックス[4]レゾルシンアレーン分子カプセルの会合に関する研究	構造有機化学
中本 敦	含ケイ素ラダー型ポリマーの合成を指向した官能性ケイ素置換ジリチオアレーン類の開発	有機典型元素化学
難波 孝志	東広島市内の河川における環境放射能と化学的酸素要求量	放射線反応化学
西田 直哉	ジヒドロ葉酸還元酵素の構造及び安定性に対する水和の寄与	分子生物物理学
野口 佑太	C-H官能基化を目指した電子求引基を有するオキサジリジンの合成研究	反応有機化学
茨木 里彩	オキサアルカン酸塩の構造とその水溶液の物性	構造物理化学
晩田 成美	ヘテロ原子の特性を活かした縮合反応の検討	有機典型元素化学
平野 大	酸化のカップリングによるフェニルイソオキサゾールとチオフェンを部分構造にもつ大環状化合物の合成研究	構造有機化学
平野めぐみ	液体ギ酸に対する軟X線発光分光における理論的研究	反応物理化学
藤原 圭吾	振動励起 $S_2(X^3\Sigma_g^-, a^1\Delta_g)$ のHeによる緩和速度定数の決定	反応物理化学
古市 圭子	疎水性ペプチドの検出感度向上を目的とした新規MALDIマトリックスの設計	生物化学
星川 美穂	Hsp70タンパク質のアロステリック構造変化解析を目指したNMR構造解析	分子生物物理学
正木 千鈴	白金-ホスフィノボラン錯体の合成、構造、および反応性	錯体化学
水野 武見	三重項増感部位を有するシクロペンタン-1,3-ジラジカルの反応挙動に関する研究	反応有機化学
森坂 雄介	カリックス[5]アレーン誘導体とルテニウム錯体の包接挙動	構造有機化学
森迫 祥吾	立体障害のあるsp ³ 塩基の合成と応用	有機典型元素化学
森田 那月	人工オートポイエーシス系の構築への試み	固体物性化学

柳井谷拓馬	単一状態のイオン発生法を用いたRFイオンガイド反応装置の開発	反応物理化学
山本 冠仁	Methyl 4-methoxycinnamateの電子励起状態のtrans体からcis体への異性化についての研究	構造物理化学
吉野 純一	銅(II/I)錯体の電極反応で制御するカップリング触媒開発の試み	錯体化学
力山 和晃	ATR-IR法による合成高分子薄膜に対するウシ血清アルブミンの吸着様式の解析	量子化学
渡部 雄大	浸透圧調整物質の水和構造に関する理論化学的研究	量子化学

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。数理分子生命理学研究科（化学系）と共催で開催している。平成24年度の世話人は岡田和正准教授である。

平成24年度の講師と題目を次にあげる。

平成24年度第1回『電子駆動力を持つ分子マシン』 2012年7月9日(月)

久米晶子（化学専攻分子構造化学講座）

平成24年度第2回『ヒ素化合物の鉍物への吸着挙動』 2012年8月6日(月)

田中雅人（地球惑星システム学専攻）

（※ 物理化学系セミナーとの合同開催）

平成24年度第3回『水素酸素系の気体爆轟の伝播における化学反応と流体構造』

2012年11月5日(月)

須佐秋生（工学研究院エネルギー・環境部門）

・物理化学系セミナー

平成24年度第1回 2012年8月6日(月)

『ヒ素化合物の鉍物への吸着挙動』

田中雅人（地球惑星システム学専攻）

（※ Chemサロンとの合同開催）

平成24年度第2回 2012年10月22日(月)

『アダマンタン誘導体の水和シミュレーション』

土居英男（量子化学D3）

『振動励起分子による化学反応の加速』

河野七瀬（反応物理化学D2）

平成24年度第3回 2012年12月17日(月)

『シクロデキストリンの分子内相互作用と分子間相互作用』

赤瀬 大（量子化学D3）

『アミノ酸残基の双極子モーメントに関する量子化学的研究』

三枝俊亮（量子化学D3）

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

灰野 岳晴 (平成24年度化学科自己点検・評価委員)
岡本 泰明 (化学専攻分子構造化学講座)
波多野 さや佳 (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)