

Vol.3 2007

ANNUAL REPORT

Department of Material Science
Graduate School of Science
Josai University

城西大学大学院理学研究科
物質科学専攻

Annual Report

Department of Material Science
Graduate School of Science
Josai University

Vol. 3

March 2007

城西大学大学院理学研究科
物質科学専攻

**Copyrighted materials in this publication were reproduced
with permission from the copyright owners.**

目次

研究紹介

情報科学部門

情報科学研究室	-----	1
---------	-------	---

分子物性光学部門

分子分光学研究室	-----	2
----------	-------	---

反応動力学研究室	-----	3
----------	-------	---

物質機能部門

物質機能科学研究室	-----	4
-----------	-------	---

分子集合体科学研究室	-----	5
------------	-------	---

分子設計部門

物理有機化学研究室	-----	6
-----------	-------	---

合成有機化学研究室	-----	7
-----------	-------	---

天然物有機化学研究室	-----	8
------------	-------	---

修士課程中間発表会	-----	9
-----------	-------	---

修士論文発表会	-----	10
---------	-------	----

サイエンス・ビジネス・セミナー	-----	11
-----------------	-------	----

2006 年度 業績リスト

研究論文	-----	12
------	-------	----

総説・著書	-----	13
-------	-------	----

学会発表	-----	14
------	-------	----

論文別刷	-----	17
------	-------	----

量子化学に基づく非経験的分子軌道法や分子動力学法といった手法を用いた分子の機能や物性の解析が中心的研究テーマである。特に分子構造の変化や化学反応に関する様々な問題についてアプローチを行っている。

複雑な分子系に対する構造最適化手法として非経験的分子軌道法と高次元アルゴリズムを用いる手法の提唱を行った。高次元アルゴリズムは古典力学によるハミルトニアンを利用した一般的な最適化問題の解法であり、多くの変数を持つ最適化すべき関数（評価関数）の大局的最小値やそれに近い値を持つ局所的な極小値を効率良く求める事を目的として開発された。最適化されるべき変数に対してそれらに共役な運動量を変数として加えることにより、最適化空間の次元数を拡大してより高次元な空間から最適化空間を見ることで最適化を効率化する手法である。そのような意味で高次元アルゴリズムと呼ばれている。加えた運動量変数は最適化する必要がないので、最適化に都合が良いように任意に選びさらに変形する事が可能となる。

最近の研究例を以下に紹介する。

理論の定式化と適用例として X_4Y_{10} 分子 ($X=C, Si; Y=H, F, Cl$) の最適化問題が取り扱われた。 X_4Y_{10} 分子では X, Y の組み合わせによっては従来のトランス・ゴーシュ構造に加えてオルソ構造が出現するため、非常に興味深い系である。高次元アルゴリズムを用いて探索を行った。初期の運動エネルギー及び混合性のパラメータと二面体角の分布の関係について調べられた。概ね、エネルギーの低い配座に長い時間滞留することがいずれの化合物でも確かめられた。

高次元アルゴリズムを用いて実在のタンパク質である、エンケファリンの立体構造解析の可能性を検討している。高次元アルゴリズムを古典的分子動力学法と組み合わせることで、大規模分子の立体構造解析の可能性を検討した。特に混合性パラメータを操作することで、より低いエネルギーの配座をとっていることや、折りたたんだ構造が出現していることが確かめられた。

- 1) 高次元アルゴリズムにおける混合性パラメータに関する研究、寺前裕之、土屋恭平、石原康行、小山晃弘、佐藤麗、清野巧、坪寛之、石元孝佳、長嶋雲兵、分子構造総合討論会 2006 (静岡), 2006 年 9 月
- 2) 高次元アルゴリズムを用いた Enkephalin の構造解析、土屋恭平、寺前裕之、渡邊寿雄、石元孝佳、長嶋雲兵、日本コンピューター化学会 2006 春期年会 (東京), 2006 年 5 月

研究テーマ

- (1) 二原子分子の精密構造解析の研究
- (2) 不安定分子の高分解能分光

当研究室の主テーマは、どこまでも精密に分子構造を決定してゆくためにはどうすればよいか、その結果何がわかるのかということにある。

Uehara, Ogilvie¹⁾、Uehara²⁾が提案したスペクトルの解析理論 (analytic approach of non-Born-Oppenheimer treatment : universal scheme for determination of the physically significant parameters³⁾) は Born-Oppenheimer breakdown を正しく取り入れ、物理的に意味のある分子 parameter を決定するものである。この理論によって二原子分子の分子構造はどこまでも精密に決定してゆくことができる。

HF

HF 分子の回転・振動回転高分解能スペクトルはこれまで異なる振動状態に関する同時 fit がなされていない。また、異なる同位体種に関する同時 fit もなされていない。これは HF の potential が極めて大きい非調和性を持つため、従来の方法では fit がうまくゆかないためであると思われる。我々の universal scheme で、HF の回転・振動回転高分解能スペクトルにつき異なる振動状態に関する同時 fit を行なったところ、完全に満足すべき結果を得た。このとき、Dunham potential 展開を a_9 項まで拡張し、関係する Dunham 係数 Y_{011} , Y_{19} , Y_{27} , Y_{35} , Y_{43} , Y_{51} の解析表式を記号計算 Maple を用いて新たに求めた。また、Bruker IFS-125HR を用いて 600-1000 cm^{-1} 領域の純回転スペクトルを測定し直し、報告されているスペクトルと合わせて、universal scheme による計算値と比較した。

我々は文献 3) において、高分解能分光分野の著名な理論家達が提唱する二原子分子の解析方法が、parameter にし得ないものを分子パラメーターとしており、正しくないことを指摘した。驚くべきことに直近においても、*J. Mol. Spectrosc.* 誌上彼らは連名でその間違った方法を二原子分子の解析方法として提唱している。⁴⁾この観点からしても、本 HF の解析結果の公表は極めて重要であると考えられる。⁵⁾

GaF

昨年度の AlF⁶⁾に引き続き、GaF の高分解能振動回転スペクトルの観測、解析を行っている。

- 1) H. Uehara, J.F. Ogilvie, *J. Mol. Spectrosc.* **207**, 143 (2001).
- 2) H. Uehara, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **77**, 2189 (2004).
- 3) H. Uehara, K. Horiyai, S. Umeda, *Chem. Phys. Lett.* **404**, 116-120 (2005).
- 4) M. Rey, V.G. Tyuterev, J.A. Coxon, R.J. Le Roy, *J. Mol. Spectrosc.* **238**, 260-263 (2006).
- 5) to be published.
- 6) K. Horiyai, H. Uehara, *Spectrochim. Acta* **A63**, 1009-1012 (2006).

化学反応においては、反応分子が衝突や光励起などを通して活性化され、遷移状態を経て生成物に至る。研究室の目標は、活性化状態・遷移状態にある反応分子をとらえ、化学反応を制御している因子を把握することにある。そのために、時間分解高分解能フーリエ変換赤外分光システムを開発し、これを用いて、短寿命の活性化分子の構造情報の獲得や反応生成分子の量子準位分布を測定することを目標としている。

フーリエ変換赤外分光器の原理は、入射光を2光束に分割し、それをいろいろな光路差で重ね合わせた干渉パターンを求めて、そのフーリエ変換でスペクトルを得ることにある。反応時間の関数で反応システムの赤外スペクトルを測定するためには、極微小光路差ごとにパルスの反応を繰り返し、反応時間の関数で干渉信号を測定・蓄積するシステムを構築する必要がある。研究室では、本学機器分析センターに設置された Bruker 125HR 高分解能フーリエ変換赤外分光器に時間分解測定機能を付加することとした。すなわち、光パルス励起を一定光路差 (He-Ne レーザーの干渉信号) ごとに繰り返し起こし、それにともなって起こる過度的吸収、または、発光を時間分解能 1×10^{-6} 秒、かつ、波長分解能 0.1 cm^{-1} (将来的には、 0.01 cm^{-1} へ改良予定) で分光測定することに成功している。

(1) 水銀光増感反応による一酸化炭素 (CO) 分子の振動励起

パルスの動作する水銀共鳴線ランプで、セル中の水銀原子を励起し、これと衝突して生成する振動励起 CO の赤外発光スペクトルの時間変化の測定によって、電子状態 - 振動状態間のエネルギー移動、および、振動状態のエネルギー緩和の情報を得ることに成功した。現在、従来の測定結果との整合性について動力的解析を通して検討を行っている。

(2) 海面上のエアロゾル生成機構の基礎研究 - CH_2I_2 の光化学反応

最近、海面上のハロゲンを含むエアロゾル生成は気候変動に関連して注目を浴びている。本研究は、海面から発するヨウ素化合物の光分解の初期過程で生成するエアロゾルの先駆物質を同定するために $\text{CH}_2\text{I}_2 + \text{N}_2 + \text{O}_2$ のシステムの光化学反応を赤外分光によって追跡した。その結果、 $\text{CH}_2\text{I} + \text{O}_2 \rightarrow \text{HCHO} + \text{IO}$, $\text{CO} + \text{H}_2\text{O}$ の反応が初期段階の主要な反応であることを実証した。

分子構造の対称性や酸化状態で分子磁性をコントロールして磁性変化を曖昧さなく証明することが、分子磁性の測定家として最も実力を発揮できる研究である。⁵⁾そんな観点から以下のような研究を紹介する。

生化学的重要研究対象である光合成過程において、その反応の鍵を握るのがマンガン金属イオンの酸化・還元状態の変化である。しかし、複数のマンガンが関与する反応中心の構造は未だに明らかにされていない。我々は光合成系を司る酵素タンパク質の単結晶を作製し、超高磁場 ESR 装置によりマンガンイオンの酸化・還元過程を測定した。その結果、4 個のマンガンイオンが関与する反応中心の構造に関する情報を明らかにした。¹⁾

炭素ケージ内部の空孔に金属原子をトラップした特徴ある構造をしている金属内包フラーレンは、その美しい分子の形が故に新しい化学的性質や分子物性を示す。そのような分子が示す分子磁性は、炭素ケージの化学的修飾や温度変化に対して敏感に変化する。この特性を生かせば、新しいタイプのスピンスイッチングを実現することも可能である。²⁾

ニトロオキシル基を複数持つテトラアリルエチレンにおいては、化学酸化で得られる高スピンラジカルのスピン状態が酸化数に敏感に依存する系が確認された。この高スピンスイッチングを、CW・ESR測定ばかりではなくパルスESR測定法を用いて直接スピン量子数を決定することで曖昧さなく証明した。^{3), 4)}

- 1) H. Matsuoka, K. Furukawa, T. Kato, H. Mino, J.-R. Shen and A. Kawamori, *J. Phys. Chem. B*, **110**, 13242-13247, (2006).
- 2) L. Feng, T. Wakahara, T. Nakahodo, T. Tsuchiya, Q. Piao, Y. Maeda, Y. Lian, T. Akasaka, E. Horn, K. Yoza, T. Kato, N. Mizorogi and S. Nagase, *Chem. Eur. J.*, **12**, 5578-5586, (2006).
- 3) A. Ito, Y. Nakano, M. Urabe, T. Kato and K. Tanaka, *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 2948-2953, (2006).
- 4) Y. Hirao, H. Ino, A. Ito, K. Tanaka and T. Kato, *J. Phys. Chem. A*, **110**, 4866-4872, (2006).
- 5) R. B. Morgunov, R. P. Shibaeva, E. B. Yagubskii, T. Kato and Y. Tanimoto, *J. of Ex. and Theo. Phys.*, **102** (1), 121-130, (2006).

弱い van der Waals 力により分子が結合した集合体、分子クラスター、は構成分子数が有限であるため気体や液体・固体とは異なった状態にあり、特有の性質をもつ。このためクラスターの物性の研究はあらたな機能性材料の開発につながる可能性がある。本研究室では、数個の分子が集合した van der Waals 錯体の高分解能赤外分光を行うことにより、その構造や分子間ポテンシャルを決定している。さらに、van der Waals 錯体の構造などの量子化学計算を行い、実験結果と比較して van der Waals 錯体特有の性質について研究している。昨年行った主な研究テーマを以下に示す。

- (1) van der Waals 錯体 $\text{Ne-}^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ 及び $\text{Xe-}^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ の赤外スペクトルから得られた分子定数を用いて、 Ne-CO_2 錯体及び Xe-CO_2 錯体の構造の同位体効果を調べた。理論計算から求められた分子間振動波動関数を用いてこの同位体効果を解析し、弱い van der Waals 結合に特徴的な大振幅零点振動波動関数について調べた。また Ne や Xe との錯体形成による CO_2 の分子内ポテンシャルの変化を振動バンドのオリジンのシフトを用いて決定した。
- (2) $\text{C}_2\text{H}_4\text{-CO}_2$ 錯体のパルスジェット-赤外ダイオードレーザー分光を行い、高分解能赤外スペクトルを得た。振動回転スペクトルは単純な非対称コマの剛体回転子のハミルトニアンでは再現できず、錯体中で C_2H_4 と CO_2 がほとんど自由に回転していることが確認された。現在スペクトルの解析を進めている。
- (3) $\text{Kr}_2\text{-}^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ 及び $\text{Xe}_2\text{-}^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ 錯体は三体力の効果を見積もるのに適した錯体であり、これらの錯体の赤外スペクトルを測定し、その Q 枝の現れる波数からバンドオリジンのシフトに対する三体力の寄与を求めた。既に報告されている $\text{Ar}_2\text{-}^{12}\text{C}^{16}\text{O}_2$ 錯体の結果と比較すると、三体力の寄与の二体力の寄与に対する比は希ガスの種類によらないことが分かった。また $\text{Xe}_2\text{-}^{12}\text{C}^{18}\text{O}_2$ 錯体の結果と比較すると同位体による違いも小さいことがわかった。

計算化学と称される分子力学法・分子動力学法および分子軌道法を駆使して、有機化合物の電子状態とそれらの物理化学的諸量を研究している。分子軌道法ソフトは半経験的分子軌道法 (winMOPAC) 非経験的分子軌道法 (Gaussian 98, Gaussian03) を用いている。また、分子動力学には winMasphys を用いている。

以下のような幾つかのテーマに大別することができる。

- (1) 有機化合物の電子状態と薬理作用。具体的にはフェノチアジン類、アゼピン類、トロポロン類、アズレン類及びナフトフランジオン類の定量的構造活性相関を検討し、薬理作用の発現機構に迫ることを目的としている。
- (2) 有機化合物の電子状態と反応性、反応機構の検討。具体的には 1) 分子軌道法によるトロポロン類の正常置換反応・異常置換反応及びベンゼン系への転位反応機構の解明。2) アズレン類のハロゲン化反応機構の理論的解明及び NMR ケミカルシフトの理論計算。
- (3) 酸化チタン光触媒による Formamide, Urea 及び界面活性剤、殺虫剤及び除草剤の分解機構の分子軌道法からの検討
- (4) 萌芽的研究として、数式処理ソフトを用いた量子化学入門教材の作成

最近の研究例を (1) のテーマの研究内容を簡単に紹介する。

Azulene 類および tropolone 類の 50% 細胞毒性活性(CC₅₀)と電子状態との定量的構造活性相関を研究し、CC₅₀ と水溶液中と気相中の全エネルギーとの差、双極子モーメント計算値、HOMO, LUMO 軌道エネルギー等の電子状態との間に良い相関があることを報告した。

(4) は昨年、水素原子軌道の可視化を纏め投稿掲載済み。

- (1) Relationship between Electronic Structure and Cytotoxic Activity of Azulenes
In vivo 20:391-396(2006).
Relationship between Electronic Structure and Cytotoxic Activity of Tropolones
In vivo 20:391-396(2006).
- (2) Maple を用いた量子化学入門教材の作成
城西情報科学研究、第 16 巻第 1 号、pp7-25 (2006).

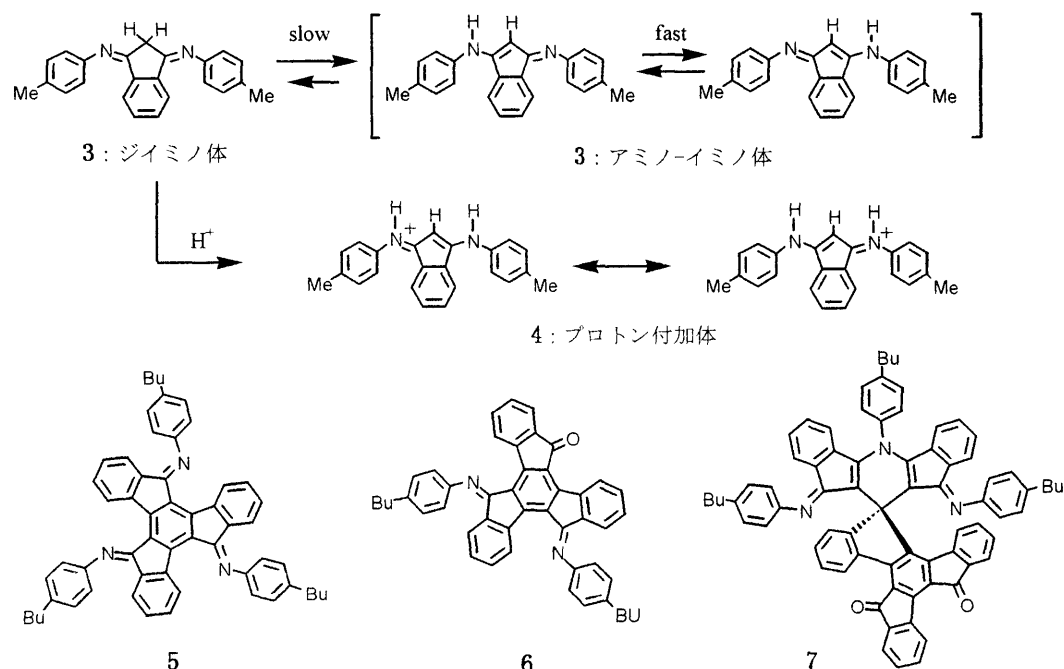
インダン-1,3-ジオン (1) を基本骨格とする新しい π 共役系化合物の合成とその機能化について研究を進めている。この炭素骨格は交差 π 共役系および電荷共鳴 π 共役系の前駆体となり得ると考えられる。また、2位の炭素原子について1とumpolungの関係にあるニンヒドリン(2)も原料として利用できることから、反応に多様な可能性が期待できる。

今年度は、アニリン類と1との反応を検討し、その生成物の特異な構造と性質について明らかにした。

アニリンが2分子縮合した生成物3は、結晶状態ではアミノ-イミノ型互変異性構造であるが、溶液中ではジイミノ体も共存していることを見出した。また、アミノ-イミノ体は、非常に速いダイナミックなプロトン移動の挙動下にあることがNMRスペクトルより明らかになった。ジイミノ体はプロトン付加により、電荷非局在系カチオン4に変化した。このカチオンの塩を単結晶として単離しX線結晶解析を行った結果、二つの $C=N^+$ 結合は等価であることが確かめられた。

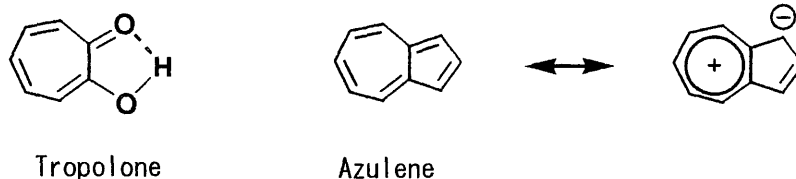
四塩化チタンを触媒にしてアニリンと1との反応を行なうと、1が3分子縮合したトルキセン誘導体5や6などが得られた。また、スピロ構造を持つ1の5量体7も単離された。この構造はX線結晶解析により確かめられた。

これら生成物のうち、アニリン2分子縮合体6はNMRにおける濃度変化が著しいことなどから、溶液中で π - π スタックして会合する性質があることを明らかにした。



非ベンゼン系芳香族化合物に属するトロポノイド及びアズレノイドの化学に関する研究を行なっている。

これら七員環骨格を有するトロポノイド及び七員環と五員環が縮環したアズレノイドの化学は70数年前、野副鉄男先生によりタイワンヒノキの精油中から見出されたヒノキチオールに始まった。ベンゼン骨格を持たないこのトロポノイド及びアズレノイドは芳香族性を示し、また大きな双極子モーメントを示すことから、これらの研究はその構造決定や合成にとどまらず、新規な π 共役系への興味を深めると共に分子軌道法の改良をもうながした。しかし、その特異的な構造のためにベンゼノイドとは反応性が異なり、系統的な研究が行われていない分野が多い。そこで当研究室では、これらの化合物に興味を持ち、基礎研究の一端として下記のテーマで研究を行っている。



(1) アズレン類の合成と反応： 新規なアズレン類の合成とその反応性の検討。

現在、グアイアズレンのNC Sによるハロゲン化反応を検討している。その結果、ハロゲンがアズレン環からアルキル基に移動するなどの興味ある事実を見いだした。現在、HPLC及びNMRを用いて反応追跡を行い、不安定な多数の新規物質の構造、並びに反応経路が明らかになりつつある。

(2) トロポコロナンド及びその関連化合物の合成： トロポノイド及びアズレノイドを含むクラウンエーテル等の大環状化合物の合成とその金属錯体を合成し、その性状を検討している。特に最近は、アミノトロポニンイミン及びポルフィリン骨格の比較の意味でも興味があるアズレンとベンゼン環を含むアズレノコロナンドの合成とその金属錯体の合成について研究を行なっている。

(3) トロポロン及びアズレン類の薬理活性の研究： 天然に存在するトロポロン類及びアズレン類には薬理活性を示すものが多く知られている。そこで、比較のために当研究室で合成したトロポロン類及びアズレン類の薬理活性の研究を検討している。特に最近は、フッ素を含むアズレン誘導体とそのハロゲン類似体を系統的に合成し、その性状と薬理活性の研究を行なっている。

修士課程中間発表会

2006年12月22日(金)

1. トリフルオロアセチルアズレン誘導体の合成
[天然物有機化学研究室] 新井篤洋
2. ニンヒドリンとヒドラジン類との反応
[合成有機化学研究室] 石井理恵
3. 分子軌道法によるトロポノイド化合物の反応性の再検討
[物理有機化学研究室] 稲部誠
4. 有機ビラジカルにおけるラジカルサイトの移動
[物質機能科学研究室] 金住誠
5. ニンヒドリンとチオフェン類との反応
[合成有機化学研究室] 鈴江暢野
6. Naphtho[2,3-*b*]furan-4,9-dione 類の薬理活性と電子状態との関連
[物理有機化学研究室] 高野綾子
7. HF の回転・振動回転スペクトルとその fit
[分子分光学研究室] 野口剛範
8. フェノール性ヒドロキシ基による分子内ヘミアセタールの形成
[合成有機化学研究室] 橋本涼
9. 赤外分光による希ガス-CO₂三量体 van der Waals 錯体の研究
[分子集合体科学研究室] 山口稯也

修士論文発表会

2007年2月21日(水)

1. MO法によるグアイアズレンのハロゲン化反応機構の検討
[物理有機化学研究室] 青木一洋
2. MO法による Formamide、Urea、界面活性剤、殺虫剤および除草剤の光触媒下での分解機構の検討
[物理有機化学研究室] 大野耐一
3. ランタンダイマー内包フラーレン負イオン ($\text{La}_2@C_{80}^-$) の ESR スペクトル
[物質機能科学研究室] 川崎裕貴
4. 高次元アルゴリズムによる Enkephalin の立体構造解析に関する理論的研究
[情報科学研究室] 土屋恭平
5. チオフェン環の置換したトリフェニルメチル型炭素ラジカルの研究
[合成有機化学研究室] 長濱錦志
6. アズレン誘導体の薬理活性
[天然物有機化学研究室] 西代正志
7. アズレン誘導体の可視吸収スペクトルの特性
[天然物有機化学研究室] 林 史雄
8. 1,3-インダンジオンとアニリン類との反応
[合成有機化学研究室] 武鹿野陽子
9. 配位結合ケージに包接された銅ポルフィリン多量体のスピン結合状態
[物質機能科学研究室] 渡辺健太郎
10. テトラアザアズレノコロナンドの合成
[天然物有機化学研究室] 渡邊雄騎

サイエンスビジネスセミナー

紀尾井町キャンパス

1. 9月16日 飯田 汎 東レ経営研究所
「ニッポン技術者の使命 ～
出でよ！ 若きリーダーたち」
2. 9月30日 大平陽子 デイーエム情報システム
「コンピューソフト企業を目指す人のためにー
情報処理資格取得など」
3. 10月14日 加藤 修 環境研究センター研究支援部
「人材派遣と現代の雇用制度」
4. 10月21日 引地一昌 エスアールエル理事
「医療検査業界の動向」
5. 10月28日 森永 傳 帝人 知的財産センター
「大学からの技術移転と企業化」
6. 11月11日 加勢憲夫 大栄無線電機株式会社
「大学院生の渡世術」
7. 11月18日 矢萩 章 株式会社 エヌ・ウエーブ
「コンピューターソフト業界で期待される人材」
8. 11月25日 黒川 卓 日経サイエンス編集長
「科学技術ジャーナリストという仕事」
9. 12月 2日 福田立子 三井化学触媒化学研究所
「現場力～会社の中で成長していくために～」
10. 12月 9日 久保田壮一 J S T ・ 情報事業本部
「JST の情報事業ーJ-STAGE を中心に」
11. 12月 16日 小川大助 KTP 技術顧問
「ケミカル製品のコスト競争力」

2006 年度 業績リスト

研究論文

Infrared Diode Laser Spectroscopy of the $\Delta v=2$ Band of AlF.

K. Horiai, H. Uehara, *Spectrochim. Acta*, **A63**, 1009-1012 (2006).

Differential temperature laser induced fluorescence spectroscopy.

Z. Duan, R.W. Field, N. Yamakita and S. Tsuchiya, *Chem. Phys.*, **324**, 709-720 (2006).

Localization of Conduction Electrons and the Magnetic Properties of the Molecular Metals β'' -(BEDT-TTF)₄NH₄[M(C₂O₄)₃]DMF (M = Cr³⁺, Fe³⁺).

R. B. Morgunov, R. P. Shibaeva, E. B. Yagubskii, T. Kato and Y. Tanimoto, *J. of Ex. and Theo. Phys.*, **102** (1), 121-130 (2006).

g-Anisotropy of the S₂-State Manganese Cluster in Single Crystals of Cyanobacterial Photosystem II Studied by W-Band Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy.

H. Matsuoka, K. Furukawa, T. Kato, H. Mino, J.-R. Shen and A. Kawamori, *J. Phys. Chem. B*, **110**, 13242-13247 (2006).

Triradical Cation of p-Phenylenediamine Having Two Nitroxide Radical Groups: Spin Alignment Mediated by Delocalized Spin.

A. Ito, Y. Nakano, M. Urabe, T. Kato and K. Tanaka, *J. Am. Chem. Soc.*, **128**, 2948-2953 (2006).

High-Spin Radical Cations of a Dendritic Oligoarylamine.

Y. Hirao, H. Ino, A. Ito, K. Tanaka and T. Kato, *J. Phys. Chem. A*, **110**, 4866-4872 (2006).

The Bingel Monoadducts of La@C₈₂: Synthesis, Characterization, and Electrochemistry.

L. Feng, T. Wakahara, T. Nakahodo, T. Tsuchiya, Q. Piao, Y. Maeda, Y. Lian, T. Akasaka, E. Horn, K. Yoza, T. Kato, N. Mizorogi and S. Nagase, *Chem. Eur. J.*, **12**, 5578-5586 (2006).

Infrared Spectroscopy of Ne-¹²C¹⁸O₂ and Xe-¹²C¹⁸O₂: Change in the CO₂ Intramolecular Potential by Formation of Rare Gas-CO₂ Complexes.

T. Konno, S. Fukuda, Y. Ozaki, *Chem. Phys. Lett.*, **421**, 421-426 (2006).

Relationship between Electronic Structure and Cytotoxic Activity of Azulenes.

T. Kurihara, M. Noguchi, T. Noguchi, H. Wakabayashi, N. Motohashi and H. Sakagami, *In vivo*, **20**, 385-390 (2006).

Relationship between Electronic Structure and Cytotoxic Activity of Tropolones

T. Kurihara, H. Mine, Y. Satoh, H. Wakabayashi, N. Motohashi and H. Sakagami, *In vivo*, **20**, 391-396 (2006).

Apoptosis-inducing Activity of Trihaloacetylazulenes against Human Oral Tumor Cell Lines.

Y. Akatsu, N. Ohshima, Y. Yamagishi, M. Nishishiro, H. Wakabayashi, T. Kurihara, H. Kikuchi, T. Katayama, N. Motohashi, Y. Shoji, H. Nakashima, and H. Sakagami, *Anticancer Res.*, **26**, 1917-1924 (2006).

Inhibition of LPS-stimulated NO Production in Mouse Macrophage-like Cells by Trihaloacetylazulenes.

N. Ohshima, Y. Akatsu, M. Nishishiro, H. Wakabayashi, T. Kurihara, K. Satoh, N. Motohashi, and H. Sakagami, *Anticancer Res.*, **26**, 2921-2928 (2006).

総説

「高磁場-高周波数電子スピン共鳴測定 (多周波数 ESR 測定)」
加藤立久、分光研究、第 55 巻、第 6 号、pp.369-378 (2006).

著書

21 世紀の化学 シリーズ 1 「基礎有機化学」 朝倉書店 (2006)
小林啓二

学会発表

高次元アルゴリズムを用いた Enkephalin の構造解析
土屋恭平、寺前裕之、渡邊寿雄、石元孝佳、長嶋雲兵
日本コンピューター化学会春期年会（東京）、2006 年 5 月

高次元アルゴリズムにおける混合性パラメーターに関する研究
寺前裕之、土屋恭平、石原康行、小山晃弘、佐藤麗、清野巧、坪寛之、
石元孝佳、長嶋雲兵
分子構造総合討論会（静岡）、2006 年 9 月

高次元アルゴリズムを用いた Enkephalin の構造解析(II)
土屋恭平、寺前裕之、渡邊寿雄、石元孝佳、長嶋雲兵
日本コンピューター化学会秋期年会（函館）、2006 年 10 月

HF の回転・振動回転スペクトルとその fit
野口剛範、堀合公威、上原博通
分子構造総合討論会（静岡）、2006 年 9 月

高温分子 GaF の赤外分光
堀合公威、野口剛範、上原博通
分子構造総合討論会（静岡）、2006 年 9 月

金属クラスターを内包するフラーレンの分子磁性
加藤立久、川崎裕貴、山田道夫、飯塚裕子、赤阪健
分子構造総合討論会（静岡）、2006 年 9 月

配位結合ケージに包摂された銅ポルフィリン二量体のスピン結合状態
渡辺健太郎、加藤立久、小野公輔、吉沢道人、藤田誠
第 45 回電子スピンスイエンス学会（京都）、2006 年 11 月

希ガス-N₂O 錯体の赤外スペクトルの量子化学計算
齋藤 豊、紺野東一、尾崎裕
日本化学会第 86 春季年会（船橋）、2006 年 3 月

希ガス-CO₂ van der Waals 錯体の構造の同位体効果
山口慎也、紺野東一、尾崎裕
分子構造総合討論会（静岡）、2006 年 9 月

ニンヒドリンとヒドラジン類との反応生成物における互変異性構造

石井理恵、武鹿野陽子、若林英嗣、宮前博、小林啓二

日本化学会第86春季年会（船橋）、2006年3月

三個のスピロ炭素原子からなるシクロプロパン誘導体—その意外な生成と性質

清原彩子、若林英嗣、小林啓二、山本学、真崎康博

日本化学会第86春季年会（船橋）、2006年3月

ニンヒドリンとフェノール類との反応生成物における環状ヘミアセタール構造

橋本涼、若林英嗣、小林啓二

日本化学会第86春季年会（船橋）、2006年3月

ニンヒドリンとチオフェン類との反応により生成する着色化合物の構造

鈴江暢野、若林英嗣、小林啓二

日本化学会第86春季年会（船橋）、2006年3月

The Reaction of Thiophenes with Ninhydrin

Nono Suzue, Hidetsugu Wakabayashi, and Keiji Kobayashi

22nd International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS-22), August 20–25, 2006, Saitama, Japan

Preparation of Hemithioindigos by Oxidation of Benzo[*b*]thiophene Compounds

Hiroyuki Endo, Suzumi Hashimoto, Hidetsugu Wakabayashi, and Keiji Kobayashi

22nd International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur (ISOCS-22), August 20–25, 2006, Saitama, Japan

3個のスピロ接合炭素からなるシクロプロパンの合成と性質

清原彩子、金住誠、若林英嗣、宮前博、加藤立久、小林啓二

第18回基礎有機化学連合討論会（福岡）、2006年10月

1,3-ジイミノインダン誘導体におけるプロトトロピーのキャラクターゼーション

武鹿野陽子、若林英嗣、宮前博、小林啓二

第18回基礎有機化学連合討論会（福岡）、2006年10月

トリハロアセチルアズレン類の合成とその薬理活性

若林英嗣、西代正志、赤津孔明、大島伸晴、山岸淑恵、栗原照夫、本橋登、坂上宏

日本化学会第86春季年会（船橋）、2006年3月

グアイアズレンと *N*-クロロコハク酸イミドとの反応

若林英嗣、佐藤剛、郡司妙子、小山知美、青木一洋、本橋力哉、栗原照夫

日本化学会第86春季年会（船橋）、2006年3月

Annual Report
城西大学大学院物質科学専攻

第3巻 2007年3月 発行

編集・発行 城西大学大学院理学研究科物質科学専攻
〒350-0295 埼玉県坂戸市けやき台1-1
電話 049-271-7728

印刷・製本 (株)外為印刷
〒111-0032 東京都台東区浅草2-29-6
電話 03-3844-3855

