

Vol.5 2009

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. 5

March 2009

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

物質機能部門

物質機能科学研究室 ----- 3

分子集合体科学研究室 ----- 4

分子設計部門

物理有機化学研究室 ----- 5

合成有機化学研究室 ----- 6

天然物有機化学研究室 ----- 7

修士課程中間発表会 ----- 8

修士論文発表会 ----- 9

サイエンス・ビジネス・セミナー ----- 10

2008年度 業績リスト

研究論文 ----- 11

総説・著書 ----- 13

学会発表 ----- 13

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。

最近の研究例を以下に紹介する。

高次元アルゴリズムを用いて日本で販売されている BZP (ベンゾジアゼピン) 系の精神安定剤の統一的な最適化構造計算を行った。得られた安定構造に対して、HOMO-1 並びに HOMO-2 の軌道エネルギーが薬理作用と相関している事がわかり、簡単に薬理活性相関を調べる事が可能である事を示した。¹⁾

また高次元アルゴリズムを用いた計算をする上で重要となる二電子積分の保存法で従来提唱されていた PK 法の有効性を並列計算環境下で改めて検討した。並列計算環境下ではむしろ PK 法を用いない方が効率的になることを示した。²⁾

アセトアルデヒドおよびアセトンにおける、水素原子の重水素置換が、メチル基の内部回転に及ぼす影響を、原子核も量子的に取り扱う手法である **multicomponent molecular orbital (MC_MO)**法を用いて調べた。原子核を古典的に取り扱う従来の方法では計算できない同位体効果を見いだした。^{3,4)}

1) "Molecular Structure Optimization and Molecular Dynamics Using Hamiltonian Algorithm: Structure of Benzodiazepine Minor Tranquilizers—Towards Non-Empirical Drug Design —", H. Teramae, K. Ohtawara, T. Ishimoto and U. Nagashima, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **81**, 1094–1102 (2008).

2) "Study on Raffanetti's P File Format in Conventional *Ab Initio* Self-Consistent-Field Molecular Orbital Calculations in Parallel Computational Environment", H. Teramae and K. Ohtawara, *J. Comp. Chem., Japan*, **7**, 179-184 (2008).

3) "H/D isotope effect of methyl internal rotation for acetaldehyde in ground state as calculated from a multicomponent molecular orbital method", T. Ishimoto, Y. Ishihara, H. Teramae, M. Baba, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.* **128**, 184309 (2008).

4) "H/D isotope effect in methyl torsional interaction of acetone as calculated by a multicomponent molecular orbital method", T. Ishimoto, Y. Ishihara, H. Teramae, M. Baba, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.* **129**, 214116 (2008)

研究テーマ： 高温二原子分子、不安定分子の精密構造解析の研究

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こと、その結果明らかになる分子の物理的描像はどのようなものかということである。多原子分子では三原子分子といえども構造を精密に決定できないので、これができるのは二原子分子に限られる。

研究手段は Uehara, Ogilvie¹⁾、Uehara²⁾が提案したスペクトルの non-Born-Oppenheimer 解析理論 (analytic approach of non-Born-Oppenheimer treatment : universal scheme for determination of the physically significant parameters³⁾) による高分解能スペクトルデータセットの *universal fit* である。

HF

昨年度までに、fit に用いるのに適切な data set を確定し、解析プロセスも十分な近似の order に拡張して universal fit を行い、non-Born-Oppenheimer パラメーター4 々を含む 15 々の分子パラメーターを決定した。この分子パラメーターから Dunham 係数 Y_{ij} と各振動状態についての回転定数が計算できる。15 々の分子パラメーターから導かれる Y_{ij} は 41 々、回転定数は 72 々であり、これらの値は今年度求めた。これらは、既報の値と良く一致したが、既報では Y_{ij} が 21 々、回転定数が 35 々しか決定されていない。これから、本解析が従来のものより、より正確かつ完全な分子定数のセットを与えるものであることが結論できる。以上の HF の解析プロセス、結果は non-Born-Oppenheimer 解析のベンチマークとして paper を記載した。現在、投稿するところである。

今後、振動回転スペクトルについても、測定精度を検討する。

CS

二重結合の例として CS ラジカルの高分解能振動回転スペクトルを昨年度から観測している。CS は慣用的解析方法においても同位体スペクトルの同時 fit が未だ行なわれていない。この観点から ¹³CS の観測が重要である。検出には 13% に濃縮された ¹³CS₂ と He 混合気体のマイクロ波放電プラズマからの発光を用いた。分解能 0.01 cm⁻¹ の測定でこれまで報告されていない ¹³CS v=2-1, 3-2 band を観測した。その結果、初めて正確な non-Born-Oppenheimer 解析の結果を得た。

なお二重結合の例として、SiO 分子についてもスペクトルの観測を行い、実験室での測定では既報のものより高い v, J 遷移を得ているが、極めて高温な太陽黒点からの放射スペクトルが報告されている。

CaH

²Σ 電子状態フリーラジカル of スペクトルの non-Born-Oppenheimer 解析を検討する目的で CaH のスペクトルの観測を行なった。反応系は Ca+H₂ または CaH₂+H₂、反応条件はマイクロ波放電または 800-1000°C の高温下での交流放電、の種々の組み合わせで CaH の検出を試みたが未だ成功していない。今後更なる改良を行なってゆく。

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. Horiai, S. Umeda, *Chem. Phys. Lett.* **404**, 116 (2005).

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。そんな観点から以下のような研究を紹介する。

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内包金属原子の数で敏感に変化する。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。^{1), 2)}

金属イオンの配位結合能力を接着剤として、水溶液中で自己集合的に超分子が会合し、大きな構造体並びに機能性発現の場を与えることが可能になっている。機能性発現の場として、水溶液中にコントロール可能な疎水性空間をデザインする。空間に内包される磁性分子の数を変化させてスピン状態を制御することに成功し、スピン状態を曖昧さ無く決定した。³⁾

ニトロオキシル基をいろいろなトポロジーに配置した化合物で、化学酸化により得られる高スピンラジカルのスピン状態がトポロジーに依存することが確認された。この高スピンスウィッチングを、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。^{4), 5)}

- 1) T. Tsuchiya, R. Kumashiro, K. Tanigaki, Y. Matsunaga, M. O. Ishitsuka, T. Wakahara, Y. Maeda, Y. Takano, M. Aoyagi, T. Akasaka, M. T. H. Liu, T. Kato, K. Suenaga, J. S. Jeong, S. Iijima, F. Kimura, T. Kimura and S. Nagase, *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 450-51 (2008).
- 2) T. Akasaka, T. Kono, Y. Takematsu, H. Nikawa, T. Nakahodo, T. Wakahara, M. O. Ishitsuka, T. Tsuchiya, Y. Maeda, M. T. H. Liu, K. Yoza, T. Kato, K. Yamamoto, N. Mizorogi, Z. Slanina and S. Nagase, *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 12840-41 (2008).
- 3) K. Ono, M. Yoshizawa, T. Kato and M. Fujita, *Chem. Commun.*, 2328-30 (2008).
- 4) A. Ito, Y. Yamagishi, K. Fukui, S. Inoue, Y. Hirao, K. Furukawa, T. Kato and K. Tanaka, *Chem. Commun.*, 6573-75 (2008).
- 5) A. Ito, S. Inoue, Y. Hirao, K. Furukawa, T. Kato and K. Tanaka, *Chem. Commun.*, 3242-44 (2008).

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。また以上の研究の応用として、最近環境問題として取り上げられてきている揮発性有機化合物 (VOC) について、赤外分光などを利用した小型センサの開発を行っている。昨年行った主な研究テーマを以下に示す。

- (1) $C_2H_4-CO_2$ 錯体の同位体種である $C_2H_4-C^{18}O_2$ 、 $C_2D_4-CO_2$ 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ためにサブバンドがそれぞれ不規則にシフトすることが確認された。内部回転を取り入れた計算を行い、このシフトの傾向や同位体効果をおおよそ再現することができた。
- (2) エチレンを含む錯体の構造を調べるため、パルスジェット赤外ダイオードレーザー分光により、 C_2D_4 -希ガス (Ar, Kr, Xe) 錯体の高分解能赤外スペクトルを測定することを試みた。
- (3) エーテル類と CO_2 あるいは OCS からなる錯体の研究はほとんど行なわれていない。そこでこれらの錯体について量子化学計算を行い錯体の構造、電荷分布、錯体形成による CO_2 あるいは OCS の振動の振動数変化などを調べた。その結果、似た性質の分子からなる錯体でも構造が大きく異なることがわかった。
- (4) ベンゼン、トルエンについて、小型可視ファイバ分光器を用いてその検出法を検討した。また、ナノ孔ガラスと小型近赤外ファイバ分光器を用いてベンゼン、トルエンの検出法を検討した。

各種分子軌道法を駆使して、有機化合物の電子状態と反応性を中心に研究しており、それらから導かれる結果を基に機能性有機化合物の設計を目標としている。

1) Theoretical Studies on Phenothiazines, Benzo[*a*]phenothiazines and Benz[*c*]acridines

Teruo Kurihara · Kazumi Shinohara · Makoto Inabe, Hidetsugu Wakabayashi · Noboru Motohashi · Hiroshi Sakagami · Joseph Molnar

.Motohashi N (eds.) Bioactive Heterocycles VI, Springer, pp. 253-279 (2008).

2) ナフト[2,3-*b*]フラン-4,9-ジオン類の薬理活性と電子状態との関係

39種の化合物について正常細胞およびがん細胞の50%細胞毒性活性を測定し、その内3種の高いTS値を示した、化合物については細胞死の形態を詳細に調べた。さらに、これら化合物の電子状態と薬理活性との構造活性相関を検討した。受理され印刷中である。

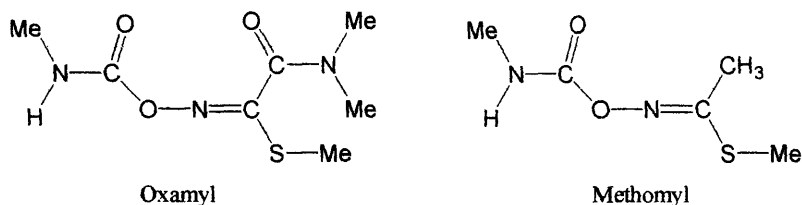
A. Takano, T. Kurihara, H. Sakagami, et al, *Anticancer Res.*

3) トロポノイド類の反応性およびアズレン誘導体の薬理活性について研究している。

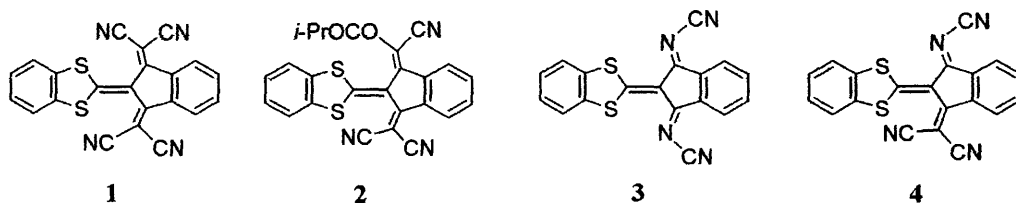
トロポノイド類の求核置換反応はC-2位に置換する正常反応とC-7位への異常反応が知られているが、反応機構は不明な点が残されており、明確には確立されていない。この点を現在検討中である。

4) 酸化チタン光触媒の働きにより、多くの有機化合物の分解機構を分子軌道法の立場より研究している。この研究は明星大学日高久夫教授との共同研究である。

この分解機構は今まで、電子密度からの議論であったが、遷移状態等からの検討を行っている。現在は殺虫剤 methomyl, oxamylに関して検討している。



電子供与部位 (D) と電子受容部位 (A) が π -共役系でつながった push-pull 共役系化合物として、1,3-インダンジオンのカルボニル基を A 部位とする新規化合物 **1**、**2**、**3**、**4**などを合成し、それらの構造と性質について研究した。¹⁾



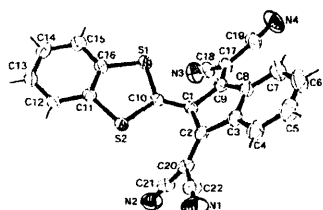
ビス(ジシアノメチレン)体 **1** は X 線結晶解析の結果、平面構造ではなく、インダン骨格の 2 位の炭素で大きく折れ曲がり D および A のベンゼン環どうしが約 140° 傾いた構造であることがわかった。CN 基の N と 1,3-ジチオール環の S は van der Waals 半径の和よりも短い距離にあり、折れ曲がることにより π 共役が途切れるという電子的な不利は、ヘテロ原子相互作用により補われていると考えられる。

結晶中での屈曲構造は、溶液中では早いダイナミックな反転運動となることを明らかにした。すなわち、エステル体 **2** の低温 ^{13}C -NMR において、イソプロピル基のメチルシグナルは -79°C で 2 本に分裂し、キラルな分子構造になることを示した。融合温度法により、この屈曲運動の活性化エネルギーを 43.2 kJmol^{-1} (-55°C) と見積もった。

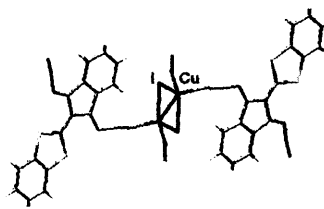
これら化合物の電子スペクトルは溶媒の極性を変えてもほとんど変化しないことから、基底状態においても大きな分極構造の寄与があるものと考えられる。B3LYP/6-31G**に基づく理論計算の結果からも、大きな双極子モーメントをもつこと、また、最長波長吸収が D から A への分子内電荷移の性格が強いことが示された。

シアノイミノ体 **3** については、CuI との反応により、1 : 1 の錯体を得た。X 線結晶解析により、CN 基の窒素原子をすべて Cu に配位させた配位高分子錯体構造であることがわかった。

1 の分子構造



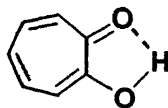
3 と CuI との 1 : 1 錯体における配位構造



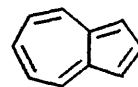
1) D. Masuda et al., *Tetrahedron Lett.*, **49**, 4342 (2008)

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約80年前、野副鉄男先生により台湾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。本年度は、

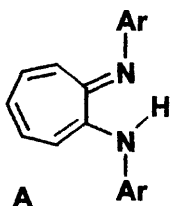


Tropolone

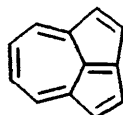


Azulene

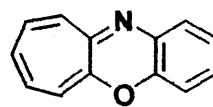
- (1) トロポコロンAND及びその関連化合物の合成：トロポノイド及びアズレノイドを含むクラウンエーテル等の大環状化合物の合成とその金属錯体を合成し、その性状を検討している。本年度は、七員環に置換基を有するアミノトロポニンミン(A)及びその金属錯体の合成について研究を行なった。
- (2) アズレン類の合成と反応：新規なアズレン類の合成とその反応性の検討。
グアイアズレンのトリフルオロアセチル誘導体の加水分解中にアセアズリレン(B)誘導体およびその前駆体が得られることを見出した。本年度は、これらの反応を系統的に調べる目的でトリクロロアセチルなどの各種アセチルアズレン誘導体を合成し、その反応性を比較検討した。
- (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。本年度は、ベンゾシクロヘプタオキサジン(C)骨格を有する化合物26種の抗がん作用と抗炎症作用について研究を行った。



A



B



C

物質科学専攻 修士課程中間発表会

2008年12月16日(火)

1. ナノ孔ガラスと近赤外分光法を用いた気相トルエン濃度の測定

[分子集合体科学研究室]

犬塚 俊介

2. van der Waals 錯体 希ガス-C₂D₄ の高分解能赤外分光

[分子集合体科学研究室]

桑垣 貴之

3. チエノチオフェンからなる機能性化合物の合成と性質

[合成有機化学研究室]

齋藤 裕功

4. インダン骨格をもつオキシム誘導体の合成と機能開発

[合成有機化学研究室]

鈴木 光明

5. 高温 HF 分子の振動回転スペクトルの non-Born-Oppenheimer 解析

[分子分光学研究室]

仲澤 諒

6. ²Σフリーラジカルの non-Born-Oppenheimer 解析 ; CaH

[分子分光学研究室]

八木 智行

修士論文発表会

2008年2月25日(水)

1. ニンヒドリンとフェノール類との反応生成物に関する研究
[合成有機化学研究室] 石塚 幸司
2. 多成分分子軌道法によるアセトアルデヒドとアセトンにおけるメチル基回転に伴う
H/D 同位体効果に関する解析
[情報科学研究室] 石原 康行
3. CO₂ および OCS とエーテルとの van der Waals 錯体の量子化学計算
[分子集合体科学研究室] 岩楯 佳奈子
4. 赤外分光法による van der Waals 錯体 C₂H₄-CO₂ の内部回転に関する研究
[分子集合体科学研究室] 大塚 和章
5. Non-Born-Oppenheimer Hamiltonian による CS, SiO 分子のスペクトル研究
[分子分光学研究室] 廣瀬 隆
6. インダン骨格に基づく新しい push-pull π -共役化合物の合成と性質
[合成有機化学研究室] 舛田 大輔

サイエンスビジネスセミナー

1. 9月27日 金子雅一 (株)シミック CP事業本部
「医薬品開発における化学との接点」
2. 10月4日 藤田郁光 富士通BSC
「我が国IT産業の国際環境と国際戦略」
3. 10月11日 吉田雄一 和光純薬工業
「和光純薬工業の事業展開」
4. 10月25日 市川 勝 東京農業大学客員教授
「基礎研究から企業化への道」
5. 11月8日 小川大助 KTP技術顧問
「ケミカル製品のコスト競争力」
6. 11月15日 矢島幸一郎 日本電子システムテクノロジー
「最先端システムテクノロジーによる未来への貢献」
7. 11月22日 萩原 隆 昭和シェル石油 研究開発部
「知的財産の基礎」
8. 11月29日 京極浩史 日本電子 分析機器本部 技術顧問
「IVD (In Vitro Diagnostics)の最近30年の歩みと今後の展望」
9. 12月13日 平石久人 シチズン電子株式会社
「企業研究開発と大学研究との違い」

2008 年度業績リスト

研究論文

Molecular Structure Optimization and Molecular Dynamics Using Hamiltonian Algorithm: Structure of Benzodiazepine Minor Tranquilizers – Towards Non-Empirical Drug Design

H. Teramae, K. Ohtawara, T. Ishimoto and U. Nagashima, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **81**, 1094–1102 (2008).

H/D isotope effect of methyl internal rotation for acetaldehyde in ground state as calculated from a multicomponent molecular orbital method

T. Ishimoto Y. Ishihara, H. Teramae, M. Baba, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.* **128**, 184309 (2008).

H/D isotope effect in methyl torsional interaction of acetone as calculated by a multicomponent molecular orbital method

T. Ishimoto Y. Ishihara, H. Teramae, M. Baba, and U. Nagashima, *J. Chem. Phys.* **129**, 214116 (2008).

Study on Raffanetti's P File Format in Conventional *Ab Initio* Self-Consistent-Field Molecular Orbital Calculations in Parallel Computational Environment

H. Teramae and K. Ohtawara, *J. Comp. Chem., Japan.* **7**, 179-184 (2008).

Nanorods of Endohedral Metallofullerene Derivative.

T. Tsuchiya, R. Kumashiro, K. Tanigaki, Y. Matsunaga, M. O. Ishitsuka, T. Wakahara, Y. Maeda, Y. Takano, M. Aoyagi, T. Akasaka, M. T. H. Liu, T. Kato, K. Suenaga, J. S. Jeong, S. Iijima, F. Kimura, T. Kimura and S. Nagase, *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 450-51 (2008).

Three-metal-center spin interactions through the intercalation of metal azaporphines and porphines into an organic pillared coordination box.

K. Ono, M. Yoshizawa, T. Kato and M. Fujita, *Chem. Commun.*, 2328-30 (2008).

Trimacrocyclic arylamine and its polycationic states.

A. Ito, Y. Yamagishi, K. Fukui, S. Inoue, Y. Hirao, K. Furukawa, T. Kato and K. Tanaka, *Chem. Commun.*, 6573-75 (2008).

An N-substituted azal[1.4]metacyclophane tetracation: a spin-quintet tetraradical with four para-phenylenediamine-based semi-quinone moieties.

A. Ito, S. Inoue, Y. Hirao, K. Furukawa, T. Kato and K. Tanaka, *Chem. Commun.*, 3242-44 (2008).

Does Gd@C₈₂ Have an Anomalous Endohedral Structure? Synthesis and Single Crystal X-ray Structure of the Carbene Adduct.

T. Akasaka, T. Kono, Y. Takematsu, H. Nikawa, T. Nakahodo, T. Wakahara, M. O. Ishitsuka, T. Tsuchiya, Y. Maeda, M. T. H. Liu, K. Yoza, T. Kato, K. Yamamoto, N. Mizorogi, Z. Slanina and S. Nagase, *J. Am. Chem. Soc.*, **130**, 12840-41 (2008).

Dynamic Behavior of Cyclic Hemiacetals of
2-Hydroxy-2-(2-hydroxyphenyl)-1,3-indandione Derivatives

S. Hashimoto, N. Sakuma, H. Wakabayashi, H. Miyamae, and K. Kobayashi, *Chem.Lett.*, **37**, 696-697 (2008).

Novel push-pull π -conjugated compounds suffering steric hindrance between donor and acceptor subunits

D. Masuda, H. Wakabayashi, H. Miyamae, H. Teramae, K. Kobayashi, *Tetrahedron Letters* **49**, 4342-4345 (2008).

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

J. Takahashi, T. Sekine, M. Nishishiro, A. Arai, H. Wakabayashi, T. Kurihara, K. Hashimoto, K. Satoh, N. Motohashi, and H. Sakagami, *Anticancer Res.*, **28**, 171-178 (2008).

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

K. Miyahara, H. Murayama, H. Wakabayashi, T. Kurihara, K. Hashimoto, K. Satoh, N. Motohashi, and H. Sakagami, *Anticancer Res.*, **28**, 2657-2662 (2008).

Tumor-specific Cytotoxicity and Type of Cell Death Induced by Benzocycloheptoxazines in Human Tumor Cell Lines.

H. Murayama, K. Miyahara, H. Wakabayashi, T. Kurihara, K. Hashimoto, K. Satoh, O. Amano, H. Kikuchi, Y. Nakamura, Y. Kanda, S. Kunii, N. Motohashi, and H. Sakagami, *Anticancer Res.*, **28**, 1069-1078 (2008).

Synthesis of 1,2-Azulenequinone Derivatives by Bromine-Oxidation

H. Wakabayashi, O. Irinamihira, S. Shibata, T. Kurihara, Y. Uchiyama, A. Ohta, and K. Fujimori, *Heterocycles*, **76**, 1133-1140 (2008).

著書

Theoretical Studies on Phenothiazines, Benzo[*a*]phenothiazines and Benz[*c*]acridines

Teruo Kurihara · Kazumi Shinohara · Makoto Inabe, Hidetsugu Wakabayashi · Noboru Motohashi · Hiroshi Sakagami · Joseph Molnar

Motohashi N (eds.) *Bioactive Heterocycles VI*, Springer, pp. 253-279 (2008).

「有機化学（三訂版）」 裳華房(2008)

小林啓二 著

学会発表

分子内プロトン移動反応に関する理論的研究

寺前裕之、橋詰大志郎、長岡伸一、長嶋雲兵

日本コンピューター化学会 2008 春期年会（東京），2008 年 5 月

多成分分子軌道法によるメチル基回転に伴う H/D 同位体効果に関する研究

石原康行，寺前裕之，石元孝佳，長嶋雲兵

日本コンピューター化学会 2008 春期年会（東京），2008 年 5 月

高次元アルゴリズムによる向精神薬の理論的研究

寺前裕之, 大田原一成, 石元孝佳, 長嶋雲兵

分子科学討論会 2008 (福岡), 2008 年 9 月

分子内プロトン移動反応に関する理論的研究 (2)

寺前裕之, 藤田若菜, 長岡伸一, 長嶋雲兵

日本コンピューター化学会 2008 秋期年会 (高知), 2008 年 9 月

多成分分子軌道法によるアセトンのメチル基回転に伴う H/D 同位体効果の解析

石原康行, 寺前裕之, 石元孝佳, 長嶋雲兵

日本コンピューター化学会 2008 秋期年会 (高知), 2008 年 9 月

CS の高分解能スペクトルの non-Born-Oppenheimer 解析

廣瀬 隆, 野口剛範, 堀合公威, 上原博通

日本化学会第 88 春季年会 (東京), 2008 年 3 月

^{13}C の振動回転スペクトルの観測と non-Born-Oppenheimer 解析

廣瀬 隆, 堀合公威, 上原博通

第 2 回分子科学討論会 (福岡), 2008 年 9 月

La@C_{82} と 1, 2, 3, 4, 5-ペンタメチルシクロペンタジエンの位置選択的可逆付加反応

佐藤悟^{*1}, 前田優^{*1}, 稲田浩司^{*1}, 山田道夫^{*1}, 土屋敬広^{*1}, 石塚みどり^{*1}, 長谷川正^{*1}, 赤阪健^{*1}, 加藤立久, 溝呂木直美^{*2}, Zdenek Slanina^{*2}, 永瀬茂^{*2}

(*1 筑波大 TARA センター, *2 分子研), 第 35 回 フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (東京工業大学), 2P-9, 平成 20 年 8 月

$\text{N@C}_{60}/\text{C}_{60}$ ナノウィスカーの ESR 測定

加藤立久, 長田良一, 枝松徹, Michael Scheloske^{*1}, Wolfgang Harneit^{*1}, 若原孝次^{*2}, 宮澤薫一^{*2} (*1 Free University Berlin, *2 物材研), 第 35 回 フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (東京工業大学), 3P-6, 平成 20 年 8 月

ポリイン・ヨウ素混合溶液における禁制吸収帯の強度増強効果
和田資子*1, 若林知成*1, 長田良一, 加藤立久 (*1 近畿大理工), 第2
回分子科学討論会 2008 (福岡国際会議場), 2P035, 平成 20 年 9 月
 $C_2H_4-C^{16}O_2$ と $C_2H_4-C^{18}O_2$ の高分解能赤外スペクトル
大塚和彰、山口慎也、紺野東一、尾崎裕
日本化学会第 88 春季年会 (東京), 2008 年 3 月

van der Waals 錯体、 R_2O-CO_2 と R_2O-OCS ($R=CH_3, CH_3CH_2$) の量子化学
計算
岩楯佳奈子、紺野東一、尾崎裕
日本化学会第 88 春季年会 (東京), 2008 年 3 月

$C_2H_4-CO_2$ 錯体の同位体種の赤外スペクトル
大塚和彰、桑垣貴之、紺野東一、尾崎裕
第 2 回分子科学討論会 (福岡), 2008 年 9 月

van der Waals 錯体、 $ROR'-CO_2$ と $ROR'-OCS$ ($R=R'=CH_3, CH_3CH_2$; $R=CH_3$,
 $R'=CH_3CH_2$) の量子化学計算
岩楯佳奈子、紺野東一、尾崎裕
第 2 回分子科学討論会 (福岡), 2008 年 9 月

配座変換を伴う 1.5-プロトン移動ダイナミクス
百地 舞, 若林英嗣, 小林啓二
日本化学会第 88 春季年会 (東京), 2008 年 3 月

分子内ヘミアセタール構造を剛直部分とするホスト化合物の設計
橋本涼, 若林英嗣, 宮前博, 小林啓二
日本化学会第 88 春季年会 (東京), 2008 年 3 月

α -ケトヒドラゾノ化合物の互変異性構造
石井理恵, 宮前博, 若林英嗣, 小林啓二
日本化学会第 88 春季年会 (東京), 2008 年 3 月

5-(2-ベンゾ[b]チエニル) ジベンゾスベレノールの光反応
小野塚達也, 毛利真也, 若林英嗣, 小林啓二
日本化学会第 88 春季年会 (東京), 2008 年 3 月

1, 3-インダンジオン誘導体とフェニルヒドラジン類との反応

小濱有加, 小山綾子, 若林英嗣, 小林啓二

日本化学会第88春季年会 (東京), 2008年3月

ニンヒドリンとチオフェン類との反応

鈴江暢野, 若林英嗣, 小林啓二

日本化学会第88春季年会 (東京), 2008年3月

内部回転と同期したプロトン移動ダイナミクス

百地 舞, 小濱 有加, 若林 英嗣, 小林 啓二

第19回 基礎有機化学討論会 (吹田), 2008年10月

Annual Report
城西大学大学院物質科学専攻

第5巻 2009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

