

Vol.6 2010

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. 6

March 2010

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

2009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計算法では並列計算環境下で、どの程度の加速率が得られるのかを検討した。それらのデータから経過時間において、CPU 数との間でスーパーリニアリティが起こることを見いだした。また 32bit 計算機においても CPU を増やすことで大きな積分を扱える事を見いだした。²⁾

ベンゼン環を含む、最も小さいプロトン移動反応を示す物質である、オルトヒドロキシベンゾアルデヒド(OHBA)について、プロトン移動反応の機構を解明すべくいくつかの置換体についてそれらの基底状態ならびに第一励起状態について、分子軌道計算を行った。ケト型の基底状態から電子励起してエノール型にプロトン移動を起こし、さらに基底状態に失活してプロトン移動反応によりケト型に戻る機構が解明された。³⁾

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) “高次元アルゴリズムを用いた分子構造最適化の PC クラスタによる並列処理”, 寺前 裕之, 大田原 一成, *J. Comp. Chem. Jpn.*, **8**, 31-40 (2009)

3) “Computational Study of Excited-State Intramolecular-Proton-Transfer of *o*-Hydroxybenzaldehyde and Its Derivatives”, Shin-ichi Nagaoka, Hiroyuki Teramae, and Umpei Nagashima, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **82**, 570–573 (2009).

分子構造をどこまでも精密に決定して行こうとすると対象は二原子分子に限られる。多原子分子では三原子分子といえどもそれを行なうことはできない。我々は二原子分子の non-Born-Oppenheimer の取扱いを実験、理論の両面から検討し、それに基づいた精密な分子構造決定の研究を行なっている。non-Born-Oppenheimer の取扱いの基本は Uehara, Ogilvie [*J. Mol. Spectrosc.* **207**, 143-152 (2001)] に、non-Born-Oppenheimer effective Hamiltonian は Uehara [*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **77**, 2189-2191 (2004)] に記載されている。

今年度、HF 分子の回転、振動回転スペクトルの解析について、我々の non-Born-Oppenheimer 解析方法を review すると共にさらなる高次項すなわち Dunham potential a_9 項への拡張、他の研究者による解析方法との比較検討を行った paper を、non-Born-Oppenheimer 解析のベンチマークとして *J. Phys. Chem. A* 誌に publish した。¹⁾

我々の解析は Schrödinger 方程式を解析的に解いて得られた結果を用いて、analytical method と呼ばれている。現在一般的に行なわれているのは Schrödinger 方程式中の未定定数を分子定数としてコンピュータにより数値解を求める numerical method と呼ばれるものである。比較検討した結果の主なものは、一部従来述べてきたものと重複するが、次の通りである。

(1) numerical method で用いている Schrödinger 方程式中の未定定数はそのままでは決定し得ない量であるが、numerical method では誤ってそれらを決定している。決定できるのはそれら未定定数の一次結合であり、我々の non-Born-Oppenheimer effective Hamiltonian にはその一次結合が正しく反映されている。

(2) 未定定数の一次結合のみが決定しうる量であることを考慮した numerical method も存在する。しかし、当該方法は実測スペクトルを再現するためだけの potential 関数を使っており、伝統的分子定数を全く無視して物理的意味を付与できない。

(3) 物理的意味が明示された分子定数を与える non-Born-Oppenheimer 解析は、我々のもの以外には見当たらない。また、我々が与える分子定数は伝統的分子定数に立脚するという特長をもっている。

なお今年度、高振動励起状態の HF 分子の振動回転スペクトル、AlH, AlD 分子の $\Delta v=1$, $\Delta v=2$ 振動回転スペクトルの観測も行なっている。

1) H. Uehara, K. Horiai, and T. Noguchi, *J. Phys. Chem. A*, **113**, 10435-10445 (2009).

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。¹⁾

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と芳香族分子の組み合わせを変化させて、分子間相互作用の違いにより磁性分子の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。²⁾

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。^{3), 4)}

- 1) S. Muratsugu, K. Sodeyama, F. Kitamura, M. Sugimoto, S. Tsuneyuki, S. Miyashita, T. Kato and H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, pp. 1388-1389 (2009)
- 2) K. Ono, M. Yoshizawa, M. Akita, T. Kato, Y. Tsunobuchi, S.-i. Ohkoshi and M. Fujita, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, pp. 2782-2783 (2009).
- 3) A. Ito, D. Sakamaki, H. Ino, A. Taniguchi, Y. Hirao, K. Tanaka, K. Kanemoto and T. Kato, *Eur. J. Org. Chem.*, 2009, pp. 4441-4450 (2009).
- 4) D. Sakamaki, A. Ito, K. Furukawa, T. Kato and K. Tanaka, *Chem. Commun.*, pp. 4524-4526 (2009).

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) CO_2 の非対称な同位体種である $\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ を含む van der Waals 錯体、 $\text{Ar}-\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ 、 $\text{Ne}-\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ 、 $\text{N}_2-\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ 、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。スペクトルを解析することにより、これらの錯体の構造や、錯体形成による $\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ の反対称伸縮振動の振動数の変化を求めた。錯体形成による振動数変化を C^{16}O_2 や C^{18}O_2 の錯体形成による振動数変化と比較した結果、 $\text{C}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ が非対称であることの振動数変化への影響は小さいことがわかった。
- (2) 大気汚染物質である揮発性有機化合物の簡便なセンサの開発を目的として、小型近赤外ファイバ分光器とナノサイズの細孔をもつガラス、ナノ孔ガラス、を組み合わせるとルエンやキシレンの気相濃度を測定する方法を調べた。トルエンやキシレンは揮発性有機化合物の代表的なものである。その結果、トルエン濃度 10 ppm まで測定可能であり、測定時間やナノ孔ガラスの厚みを増すことにより、さらに低濃度まで測定できることがわかった。また、選択性のよい方法であることもわかった。
- (3) 四塩化炭素溶液中でのピロール、ピリジン、ピロールーピリジン錯体の近赤外スペクトルを測定した。その結果、ピロールーピリジン錯体の NH 伸縮振動の倍音のピークはピロールのものよりずっと弱いことがわかった。この水素結合形成による NH 伸縮振動の遷移確率の大きな減少は量子化学計算により確認された。

各種分子軌道法を駆使して、有機化合物の薬理作用と電子状態との構造活性相関および Protein-Ligand Docking を研究している。また、それらから導かれる結果を基にリード化合物の設計を目標としている。また、トロポノイド類の電子状態と求核置換反応の一般性を理論および実験から研究している。

具体的には

- 1) 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¹⁾
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。
 - 2) 分子軌道法を用いた5-Hydroxytetrazoleの熱分解機構の検討。投稿準備中
 - 3) 4-Trifluoromethylimidazole類のClassical QSARおよびProtein-Ligand Docking.
投稿準備中
 - 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。
- 1) Tumor-specific Cytotoxicity and Type of Cell Death Induced by Naphtho[2,3-*b*]furan-4,9-diones and Related Compounds in Human Tumor Cell Lines: Relationship to Electronic Structure
A. Takano, T. Kurihara, K. Hashimoto, M. Ogawa, J. Koyanagi, T. Kurihara, H. Wakabayashi, H. Kikuchi, Y. Nakamura, N. Motohashi, H. Sakagami, K. Yamamoto and A. Tanaka, *Anticancer Research* **29**: 455-464 (2009)

特異な機能や物性を示す π 共役系化合物の創出を目指して、プロトン移動や光応答性を有する化合物、安定な π ラジカル、超分子結晶を与える化合物などを分子設計し、合成と物性探索を行っている。本年度は主に、水素結合が関与するプロトン移動ダイナミクスと水素結合による包接結晶の形成に関して以下の成果が得られた。

1) 分子内回転と同期した1,5-プロトン移動¹⁾

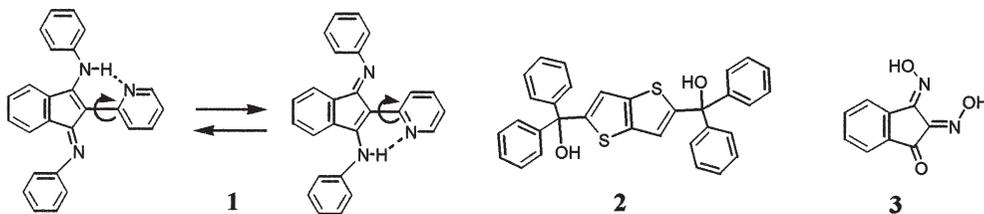
2-(2-ピリジノ)ニンヒドリンにアニリンを縮合させた化合物**1**は、結晶状態でイミノ-エナミン構造であることをX線結晶解析により明らかにした。溶液中では、温度可変NMRの昇温にともない、分子長軸にたいして対照的な平均構造が現れることから、ダイナミックな1,5-プロトン移動により早い構造変換を起こしていることがわかった。NMRの時間スケールで水素結合は維持されていることから、アニリン由来の二つの窒素原子間の1,5-プロトン移動に同期して、ピリジン環を結ぶ単結合が回転し、水素結合サイトを交換していることがわかった。

2) アキラルな包接結晶からのゲスト脱離によるキラルな結晶への変換²⁾

一般にキラルな結晶がアキラルな結晶に変換される例は非常に少ない。ラセミ結晶がラセミ混合物に変化することは稀であることに対応している。化合物**2**をホストとし種々の溶媒をゲストとして取り込んだ包接結晶は、アキラルな空間群($P-1$, $P2_1/c$)で結晶化した。しかし、加熱によりゲストを脱離させた後の粉末結晶は、そのXRDより、ジクロロメタンから再結晶して得られるホスト**2**のみのキラルな結晶($P2_1$)と同じ結晶構造であることがわかった。

3) 超分子水素結合パターンの違いによる溶媒和結晶の多形と擬多形

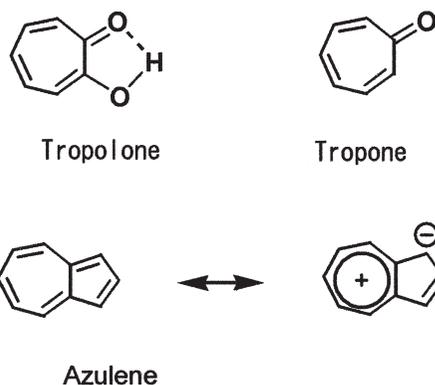
ニンヒドリンをオキシム化して得られた化合物**3**は、種々のアルコール類から再結晶することにより溶媒和結晶(擬多形)を与えた。これら8種類の結晶はすべて異なり、エタノールとメタノールについては組成比の異なる擬多形が得られ、さらに、それぞれの擬多形の中に多形を見いだした。これら多形における結晶構造の違いは、分子間水素結合がつくる超分子構造のパターンの違いに由来することを明らかにした。



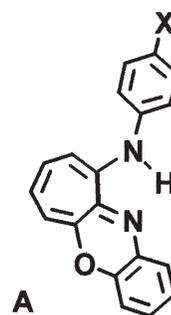
1) Y. Mukano et al., *Tetrahedron* **66**, 605 (2010)

2) H. Saito et al. *Chem. Lett.*, **38**, 1080 (2009).

非ベンゼン系芳香族化合物に属する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に関する研究を行なっている。特にナフタレンの構造異性体でもあるアズレンは、 $C_{10}H_8$ のような簡単な炭化水素にもかかわらず、鮮やかな青色を持つ化合物である。この特異的な構造に興味を持ち、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、

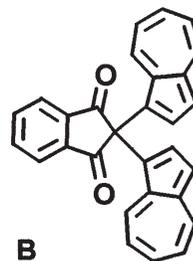


- (1) トロポコロナンド及びその関連化合物の合成：トロポノイド及びアズレノイドを含むクラウンエーテル等の大環状化合物の合成とその金属錯体を合成し、その性状を検討している。本年度は、ベンゾ[*b*]シクロヘプタ[*e*][1,4]オキサジンの複素環交換反応を利用したトロポコロナンド及びその関連化合物の合成を検討し、新規なアミノトロポニイミン誘導体 (A) 及びその金属錯体の合成について研究を行なった。



- (2) アセアズリレン類の合成とその反応：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誘導体が見出された。本年度は、これらの合成法の確立とその性状および臭素化反応を検討した。

- (3) アズレン類とニンヒドリンとの反応：小林啓二教授らにより、ニンヒドリンとフェノール類の反応で興味深い結果が報告されている。フェノールの代わりにアズレン類との反応を検討した結果、ニンヒドリンとアズレンが 1:2 で反応した化合物 B 及び 2:3、3:4、さらに鎖状に繋がった化合物を得た。



- (4) トロポ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ン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ン及びアズレン類の薬理活性の研究を検討している。本年度も昨年に引き続き、明海大学の坂上教授との共同研究により、ベンゾ[*b*]シクロヘプタ[*e*][1,4]オキサジン誘導体の抗がん作用と抗炎症作用について研究を行った。

2009年度 城西大学大学院理学研究科
物質科学専攻 修士課程中間発表会
会期 2009年12月25日(金)
会場 1-118 教室

1. 揺動ラジカル分子の合成と性質
[合成有機化学研究室] 春日井 健太
2. dibenzosuberone の酸化反応に関する研究
[合成有機化学研究室] 神谷 亮
3. トロポノイド化合物の求核置換反応の再検討
[物理有機化学研究室] 北原 幹也
4. ABINIT-MP 及び AMBER による protein 類の全電子状態計算の予備計算
[物理有機化学研究室] 小鮎 陽介
5. C₆₀ 表面を選択認識するペプチドの探索
[物質機能科学研究室] 柴田 大樹
6. スピロ接合シクロヘキサジエノン誘導体の合成と光反応
[合成有機化学研究室] 鈴木 雅也
7. ニンヒドリンとジアミン類との反応
[合成有機化学研究室] 瀬戸 秀幸
8. 種々のアニリン誘導体によるアミノトロポニイミン及びその金属錯体の合成
[天然物有機化学研究室] 蛭田 理恵
9. MO 法を用いた TiO₂ 光触媒作用による殺虫剤 Methomyl および Oxamyl の分解機構について
[物理有機化学研究室] 藤波 尚弘
10. アズレン類とニンヒドリンの反応
[天然物有機化学研究室] 山田 裕之

第5回 理学研究科物質科学専攻修士論文発表会プログラム

2010年2月25日

* 開会挨拶 研究科長

時 間	氏 名	論 文 タ イ ト ル	指 導 教 員
9:40 ~ 10:00	いぬづか しゆんすけ 犬塚 俊介	ナノ孔ガラスと近赤外分光法を用いたトルエン及びキシレンの気相濃度の測定法に関する研究	尾崎 裕 教授
10:00 ~ 10:20	くわがき たかゆき 桑垣 貴之	赤外分光法による van der Waals 錯体 Ar ⁺ , Ne ⁺ , N ₂ ⁺ - ¹² C ¹⁶ O ¹⁸ O の研究	尾崎 裕 教授
10:20 ~ 10:40	さいとう ひろのり 齋藤 裕功	イサチンと求核試薬との反応	小林 啓二 教授
10:50 ~ 11:10	すずき みつあき 鈴木 光明	インダン骨格に基づくオキシム化合物の構造化学的研究	小林 啓二 教授
11:10 ~ 11:30	なかざわ りょう 仲澤 諒	高温HF分子の振動回転スペクトルのnon-Born-Oppenheimer 解析	上原 博通 教授
11:30 ~ 11:50	やぎ とむゆき 八木 智行	Non-Born-Oppenheimer Hamiltonian によるAIH, AID分子の高分解能スペクトルの研究	上原 博通 教授

* 閉会挨拶

平成21年度 サイエンスビジネスセミナー

紀尾井町キャンパス 4階405教室

- 9月26日 金子雅一 (株)キロン
医薬品開発における化学との接点
- 10月 3日 藤田郁光 富士通 BSC
わが国IT産業の国際環境と国際戦略
- 10月17日 吉田雄一 (株)和光純薬工業
和光純薬工業の事業展開
- 10月24日 太田多禾夫 ISO9001・ISO14001 RCA CEAR 主任審査員
技術倫理と企業倫理に求められるもの
- 10月31日 市川 勝 東京農業大学客員教授
バイオリファイナリー触媒技術の新展開
(バイオマスからのケミカルズ合成と応用)
- 11月 7日 小川大助 KTP 技術顧問
ケミカル製品のコスト競争力
- 11月14日 薄井玲子 社団法人 企業研究会「技術マネジメント」グループ
産業界での「実のある」異業種交流とは
- 11月21日 萩原 隆 昭和シェル石油研究開発部
知的財産の基礎
- 11月28日 京極浩史 日本電子分析機器本部 技術顧問
バイオテクノロジーの発展と企業化の歩み
- 12月 5日 矢島幸一郎 (株)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
- 12月12日 平石久人 シチズンホールディングス(株) 監査役
企業研究開発と大学研究との違い

2009 年度業績リスト

研究論文

Computational Study of Excited-State Intramolecular-Proton-Transfer of *o*-Hydroxybenzaldehyde and Its Derivatives

S. Nagaoka, H. Teramae, and U. Nagashima, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **82**, 570–573 (2009).

高次元アルゴリズムを用いた分子構造最適化の PC クラスタによる並列処理

寺前 裕之, 大田原 一成, *J. Comp. Chem. Jpn.*, **8**, 31-40 (2009).

Analysis of Rotational and Vibrational-Rotational Spectra of HF Based on the Non-Born-Oppenheimer effective Hamiltonian

H. Uehara, K. Horiai, and T. Noguchi, *J. Phys. Chem. A*, **113**, 10435-10445 (2009).

Polycationic States of Oligoanilines Based on Wurster's Blue

A. Ito, D. Sakamaki, H. Ino, A. Taniguchi, Y. Hirao, K. Tanaka, K. Kanemoto, and T. Kato, *Eur. J. Org. Chem.*, 2009, 4441-4450 (2009).

Two-Electron Reduction of a Rh-Mo-Rh Dithiolato Complex to Form a Triplet Ground State Associated with a Change in CO Coordination Mode

S. Muratsugu, K. Sodeyama, F. Kitamura, M. Sugimoto, S. Tsuneyuki, S. Miyashita, T. Kato, and H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 1388-1389 (2009).

Spin Crossover by Encapsulation

K. Ono, M. Yoshizawa, M. Akita, T. Kato, Y. Tsunobuchi, S.-i. Ohkoshi, and M. Fujita, *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 2782-2783 (2009).

High-spin polycationic states of an alternate meta-para-linked oligoarylamine incorporating two macrocycles

D. Sakamaki, A. Ito, K. Furukawa, T. Kato, and K. Tanaka, *Chem. Commun.*, 4524-4526 (2009).

Frequencies and absorption intensities of fundamentals and overtones of NH stretching vibrations of pyrrole and pyrrole-pyridine complex studied by near-infrared/infrared spectroscopy and density-functional-theory calculations

Y. Futami, Y. Ozaki, Y. Hamada, M. J. Wojcik, and Y. Ozaki, *Chem. Phys. Lett.* **482**, 320-324 (2009).

Tumor-specific Cytotoxicity and Type of Cell Death Induced by Naphtho[2,3-*b*]furan-4,9-diones and Related Compounds in Human Tumor Cell Lines: Relationship to Electronic Structure

A. Takano, K. Hashimoto, M. Ogawa, J. Koyanagi, T. Kurihara, H. Wakabayashi, H. Kikuchi, Y. Nakamura, N. Motohashi, H. Sakagami, K. Yamamoto, and A. Tanaka, *Anticancer Res.*, **29**, 455-464 (2009).

Reactions of Ninhydrin with Benzo[*b*]thiophenes

N. Suzue, R. Ishii, R. Kamiya, H. Wakabayashi, and K. Kobayashi, *Heterocycles*, **78**, 2467-2475 (2009).

Solid-State Transformation of Achiral Crystals to a Chiral Crystal by Guest Release from Host-Guest Inclusion Crystals of Achiral Host Compound

H. Saito, M. Suzuki, H. Miyamae, N. Hayashi, and K. Kobayashi, *Chem. Lett.* **38**, 1080-1081 (2009).

Effect of Tropolone, Azulene and Azulenequinone Derivatives on Prostaglandin E₂ Production by Activated Macrophage-like Cells

M. Nishishiro, T. Kurihara, H. Wakabayashi, and H. Sakagami, *Anticancer Res.*, **29**, 379-384 (2009).

Tumor-specific Cytotoxicity and Type of Cell Death Induced by Benzo[*b*]cyclohept[*e*][1,4]oxazine and 2-Aminotropone Derivatives

T. Narita, A. Suga, M. Kobayashi, K. Hashimoto, H. Sakagami, N. Motohashi, T. Kurihara, and H. Wakabayashi, *Anticancer Res.*, **29**, 1123-1130 (2009).

Inhibition of NO Production in LPS-stimulated Mouse Macrophage-like Cells by Benzo[*b*]cyclohept[*e*][1,4]oxazine and 2-Aminotropone Derivatives

A. Suga, T. Narita, L. Zhou, H. Sakagami, K. Satoh, and H. Wakabayashi, *International Journal of In Vivo Research*, **23**, 691-698 (2009).

著書

「固体有機化学」 pp. 1-256 化学同人 (2009)
小林啓二、林直人 共著

「化学辞典 第2版」 pp. 1-1716 森北出版 (2009)
小林啓二 共同編集(編集代表 吉村壽次) および 執筆分担

学会発表

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

H. Teramae, K. Ohtawara, T. Ishimoto, and U. Nagashima

The International Conference on "Simulations and Dynamics for Nanoscale and Biological Systems" (Tokyo), 2009年3月

ルチジン誘導体の電子状態に関する研究

寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎

日本コンピューター化学会 2009 春期年会 (東京), 2009年5月

分子内プロトン移動反応に関する理論的研究 (3)

寺前裕之, 長岡伸一, 長嶋雲兵

日本コンピューター化学会 2009 春期年会 (東京), 2009年5月

ルチジン誘導体の電子状態に関する研究

寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎

第12回理論化学討論会 (東京), 2009年5月

分子内プロトン移動反応に関する理論的研究

寺前裕之, 長岡伸一, 長嶋雲兵

分子科学討論会 2009 (名古屋), 2009年9月

ルチジン誘導体の電子状態に関する研究

寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎

日本コンピューター化学会 2009 秋期年会 (仙台), 2009 年 11 月

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

仲澤 諒, 堀合公威, 上原博通

第 3 回分子科学討論会 (名古屋), 2009 年 9 月

AlH, AlD スペクトルの non-Born-Oppenheimer 解析

八木智行, 堀合公威, 上原博通

第 3 回分子科学討論会 (名古屋), 2009 年 9 月

溶液中におけるポリイン・ヨウ素錯体の形成

和田資子, 若林知成, 長田良一, 加藤立久, 第 36 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (名古屋), 2009 年 3 月

溶液中におけるポリイン・ヨウ素錯体の光誘起生成

和田資子, 長田良一, 槐靖範, 若林知成, 加藤立久, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (筑波), 2009 年 9 月

常磁性金属内包フラーレンの分子変換と物性開拓

高野勇太, 山田道夫, 二川秀史, Zdenek Slanina, 溝呂木直美, 生沼みどり, 土屋敬広, 前田優, 赤阪健, 加藤立久, 永瀬茂, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (筑波), 2009 年 9 月

ゲスト封入によりスイッチ可能なホスト-ゲストスピン相互作用

Fatin Hajjaj, 田代健太郎, 赤阪健, 加藤立久, 相田卓三, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (筑波), 2009 年 9 月

金属内包フラーレンの位置選択的な二段階修飾

佐藤悟, 前田優, 稲田浩司, 二川秀史, 山田道夫, 溝呂木直美, 長谷川正, 土屋敬広, 赤阪健, 加藤立久, Zdenek Slanina, 永瀬茂, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (筑波), 2009 年 9 月

溶液内での光誘起によるポリイン・臭素錯体形成

槐靖範, 加藤立久, 和田資子, 若林知成, 第 37 回フラーレン・ナノチューブ総合シンポジウム (筑波), 2009 年 9 月

テトララジカルのスピン整列に及ぼす置換基効果

安倍学, 中村岳史, 前田倫, 古川貢, 加藤立久, SEST2009 第 48 回電子スピンサイエンス学会年会 (神戸), 2009 年 11 月

施錠可能なホストに包摂されるフラーレンゲストの電子スピンスイッチング

Fatin Hajjaj, 田代健太郎, 二川秀史, 赤阪健, 古川貢, 加藤立久, 相田卓三, SEST2009 第 48 回電子スピンサイエンス学会年会 (神戸), 2009 年 11 月

ナノ孔ガラスと赤外分光法を用いた気相トルエン濃度の測定

犬塚俊介, 紺野東一, 尾崎裕, 内山政弘, 長澤浩
日本化学会第 89 春季年会 (船橋), 2009 年 3 月

ナノ孔ガラスを利用した気相トルエン濃度の分光測定

犬塚俊介, 紺野東一, 尾崎裕, 内山政弘, 長澤浩
第 50 回大気環境学会年会 (日吉), 2009 年 9 月

ナノ孔ガラスと赤外分光を用いたベンゼン・トルエン・キシレンセンサの検討

犬塚俊介, 紺野東一, 尾崎裕, 内山政弘, 長澤浩
第 48 回化学センサ研究発表会 (小金井), 2009 年 9 月

希ガス-C¹⁶O¹⁸O 錯体の赤外ダイオードレーザー分光

桑垣貴之, 紺野東一, 尾崎裕
第 3 回分子科学討論会 (名古屋), 2009 年 9 月

2-フェニル-1,3-インダンジオンとジフェニルアミン類との反応

木村祐子, 若林英嗣, 加藤立久, 小林啓二
日本化学会第 89 春季年会 (船橋), 2009 年 3 月

アキラル包接結晶からのゲスト脱離によるキラルなホスト結晶構造の形成

齊藤裕功, 鈴木光明, 宮前博, 若林英嗣, 小林啓二
日本化学会第 89 春季年会 (船橋), 2009 年 3 月

2-(2-ピリジル)インダン-1,3-ジオンおよびジイミン誘導体の互変異性構造とプロトン移動

鈴木光明, 高梨友理子, 宮前博, 若林英嗣, 小林啓二
第 20 回 基礎有機化学討論会 (桐生), 2009 年 9 月

ニンヒドリンのジオキシム体におけるアルコール溶媒和結晶の多形・擬多形
鈴木光明，宮前博，若林英嗣，小林啓二
第18回有機結晶シンポジウム（東京），2009年11月

Annual Report

城西大学大学院物質科学専攻

第5巻 2010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

