

Vol.7 2011

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. 7

March 2011

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

分子集合体科学研究室	-----	3
------------	-------	---

分子設計部門

物理有機化学研究室	-----	4
-----------	-------	---

合成有機化学研究室	-----	5
-----------	-------	---

天然物有機化学研究室	-----	6
------------	-------	---

修士論文発表会	-----	7
---------	-------	---

修士課程中間発表会	-----	8
-----------	-------	---

サイエンス・ビジネス・セミナー	-----	9
-----------------	-------	---

理学研究科FD講演会	-----	10
------------	-------	----

2009年度 業績リスト

研究論文	-----	11
------	-------	----

学会発表	-----	12
------	-------	----

論文別刷	-----	15
------	-------	----

量子化学に基づく非経験的分子軌道法や高次元アルゴリズムに基づく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プロトン化水クラスター(PWC)多量体の計算を行っている。PWC は生体内の空間に存在するといわれており、重要な物質である。高次元アルゴリズムを用いた最適化計算により7量体までの既知の重要な安定構造を計算することができた。今後は現在まで計算が行われていない8量体以上についての構造探索を行っていく予定である。

ルチジン誘導体は近年問題となっているホルムアルデヒドの検出物質である。本研究室ではルチジン誘導体の基底状態ならびに励起状態の解明を行ってきたが¹⁾、より詳細に出発物質であるβ-ジケトンの置換基効果を解明するためには、反応機構の解明が必要であり、非経験的分子軌道計算により反応経路の解明を試みている。

常識的には反応が進行しないか抑制されると考えられる水溶液の凍結過程および巨視的な氷固相内における酸化・還元反応の例として、ヨウ化物イオン酸性水溶液の凍結によるヨウ素 I₂ 生成反応を取り上げ、その反応メカニズムを分子力学法により解析した。分子力学法(Amber potential)でヨウ素 2 原子と水 30 分子の系の構造最適化を行った。初期状態は水の内部にヨウ素原子が存在する構造を仮定したが、最適化された構造は、水クラスターの表面に I がある構造となった。温度が低いとエンタルピーの寄与がエントロピーの寄与より大きくなり、水溶液系では水分子が形成する水素結合数の最大化がなされることにより、溶媒である水の結晶化が実現される。そのため、イオン等の溶質が系の外部に押し出され、I₂ の表面析出が促進されることが判った。²⁾

1) "Theoretical study on ground and excited states of 3,5-diacetyl-1,4-dihydrolutidine" , H. Teramae, Y. Y. Maruo, and J. Nakamura, *J. Chem. Model.*, in press.

2) “水の凍結が促進する酸化・還元反応 — ヨウ化物イオン酸性水溶液の凍結によるヨウ素生成 —” , 本田 数博, 森 義仁, 寺前 裕之, 長嶋 雲兵, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **9**, No.4, 205–210 (2010)

我々は二原子分子の分子構造をどこまでも精密に決定してゆくという観点の下、non-Born-Oppenheimer の取扱いを実験、理論の両面から検討して精密な構造決定を行なっている。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、また、non-Born-Oppenheimer 解析の benchmark として HF 分子に当該 Hamiltonian を適用した結果を Uehara et al. [*J. Phys. Chem. A*, **113**, 10435-10445 (2009)] に報告している。

今年度、DF 分子について HF 分子との同時解析を当該 non-Born-Oppenheimer effective Hamiltonian を用いて行なった。これまで報告されている HF, DF の同時解析では、HF, DF 分子に対して別々の分子定数が決定されている。しかし、我々の解析では HF, DF 分子に対してただ一組の分子定数が決定される。従来決定された分子定数は謂わば「可約」表現である。F 原子は安定同位体がないので我々の分子定数は「既約 (irreducible)」である。かつ、従来の解析より少ない数のパラメータで高い精度でスペクトルを fit した。この結果は *Chem. Phys.* 誌に publish される。¹⁾

これまで観測されていない ¹³CS の励起振動回転スペクトルを、44%濃縮 ¹³CS₂ 試料を用いて観測した。多数の励起振動バンドが観測され、現在 Origin を用いてスペクトルを正確に読取り解析を行なっている。Origin によるスペクトルの読取りは Ogilvie 博士の advise によるが、OPUS よりはるかに高精度な読取りができることがわかった。

Simon Fraser University, CECM, John F. Ogilvie 博士 (コスタリカ大学客員教授) が 2010 年 10 月 1 日から 11 月 1 日まで物質科学専攻の招へいにより本研究室に滞在された。共同研究として、HCl の高励起振動回転バンドを観測し、新たな多数のスペクトル線を高精度で得た。当該期間中に Ogilvie 博士が行なった lecture は以下の通りである。

- (1) サイエンスビジネスセミナー、10 月 16 日 (院 PC 教室)

Aspects of scientific applications in technical industry.

- (2) 反応動力学特論 Ogilvie 先生講演会、10 月 22 日
(院 PC 教室)

Chemical application of high-resolution spectrometry.

- (3) 化学科コロキウム、10 月 22 日 (1-118 教室)

Basic concept of high-resolution spectrometry for chemists.

- (4) 理学研究科 FD 講演会、10 月 29 日 (1-118 教室)

Teaching and learning mathematics with symbolic computation.



John F. Ogilvie 博士

なお、DF の paper 原稿について数々の助言をいただいた朽津耕三先生に厚くお礼申し上げます。

1) K. Horiai, H. Uehara, *Chem. Phys.* **380**, 92-97 (2011); available on line 5 Jan. 2011.

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) 一昨年に続き CO₂ の非対称な同位体種である C¹⁶O¹⁸O を含む van der Waals 錯体、Ne-C¹⁶O¹⁸O、N₂-C¹⁶O¹⁸O、のパルスジェットー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行った。スペクトルを解析することにより、新たな吸収ピークを帰属することができ、これらの錯体の構造や、錯体形成による C¹⁶O¹⁸O の反対称伸縮振動の振動数の変化をより精度よく求めることができた。錯体形成による振動数変化を C¹⁶O₂ や C¹⁸O₂ の錯体形成による振動数変化と比較した。
- (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、を組み合わせてトルエンやキシレンの気相濃度を測定する方法を検討している。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。昨年はトルエン濃度 10 ppm でのナノ孔ガラスへの吸着を詳しく調べた。また、I₂O₅ の硫酸溶液を着色試薬としてトルエン濃度 10 ppm での着色とこの試薬を用いたときの他の揮発性有機化合物の干渉を調べた。
- (3) 我々はこれまで Pyridine との NH...N 水素結合の形成が、Pyrrole の NH 伸縮振動の基本音および倍音の振動数と赤外吸収強度にどのような作用をもたらすかを調べた結果、水素結合の形成は、NH 伸縮振動の基本音の赤外吸収強度を増加させ、第一倍音の赤外吸収強度を減少させることが分かった。昨年は、Benzene と NH...π 水素結合を形成した場合について、NH 伸縮振動の基本音および第一倍音の赤外吸収強度の変化について調べた。

計算機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 (SCIGRESS MO Compact 1.0) 非経験的分子軌道法 (Gaussian 98, Gaussian03W) を用いている。また、今年度は 15 台からなる PC クラスターを導入し、FMO-HF 法により Protein-Ligand の全電子計算を試みた。さらに、Molecular Operating Environment (MOE) により、定量的構造活性相関および Protein-Ligand Docking に焦点を当て、萌芽的な研究を行ない、一定の成果を得ている。

以下のような幾つかのテーマに大別することができる。

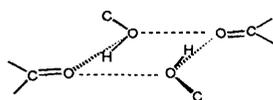
- (1) 非経験的分子軌道法を用いた Tetrazole 類の熱分解機構の検討
Naoki Uchida, Kunio Waki, and Teruo Kurihara, 投稿準備中
- (2) Molecular Operating Environment (MOE) を用いた抗精神病薬 Phenothiazine 類の標的受容体の網羅的探索
- (3) Molecular Operating Environment (MOE) による抗 HIV 活性剤 ADAMs の QSAR 解析とタンパク質とのドッキングの研究
- (4) MOE を用いた azulene 誘導体の QSAR および GOLD を用いた Protein-Ligand Docking
Naohiro Fujimami, Hidetsugu Wakabayashi, and Teruo Kurihara, 投稿準備中
- (5) MOE を用いた 4-Trifluoromethylimidazole 類および 3-Formylchromone 類の QSAR および Protein-Ligand Docking
Takuya Matsuzaka, Masami Kawase, and Teruo Kurihara, 投稿準備中
- (6) MOE を用いた抗血小板凝集作用を有する Pyrazine 類の QSAR およ Protein-Ligand Docking
- (7) 活性トロポノイドの求核置換反応の再検討および大環状トロポコロンドのニッケル錯体の合成

以上の研究テーマ中投稿を準備している研究があり、その他については更なる検討が必要であり、鋭意研究中である。特に PC クラスターによる Protein-Ligand の全電子計算については、方法論も含めて再考をする必要がある。

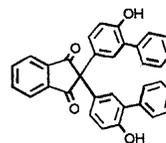
特異な機能や物性を示す π 共役系化合物の創出を目指して、プロトン移動や光応答性を有する化合物、安定な π ラジカル、超分子結晶を与える化合物などを分子設計し、合成と物性探索を行っている。本年度は、新たに 1,3-インダンジオンのイミノ誘導体における四塩化チタン誘起による骨格転位反応と光転位反応を見出した。これらの研究のうち、成果が大きかったのは、以下に記す通り、包接結晶（溶媒和結晶）のクリスタル-エンジニアリングに関する研究課題である。

[1] 新しい scissors 形ホスト分子による包接結晶の形成¹⁾

剛直で高い scissors 形の分子 **1** が種々の溶媒分子を取り込んで溶媒和結晶を形成することを見出した。**(1)₂(benzene)₃**, **(1)(acetone)**, **(1)(EtOH)**, **(1)(CH₂Cl₂)** などについて X 線結晶解析を行った結果、いずれの結晶においても、ホスト分子は head-to-tail に水素結合した二量体として存在し、それを構築単位とする水素結合の超分子ネットワークが形成されていた。また、>C=O \cdots HO- 水素結合と双極子-双極子相互作用の相乗効果により 4 個の酸素原子が平行四辺形をつくる 4 分子相互作用の存在を明らかにし、これを四中心疑似分岐型水素結合と名付けた。



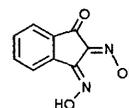
四中心疑似分岐型水素結合



1

[2] インダン-1,2,3-トリオン ジオキシムの擬多形と多形²⁾

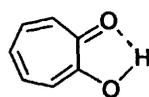
オキシム **2** を合成し、水素結合性化合物との多成分結晶の構築を目指して検討した結果、アルコール類を溶媒和した種々の結晶を与えることがわかった。**(2)(MeOH)**, **(2)₂(MeOH)**, **(2)(EtOH)**, **(2)(i-PrOH)** など、いわゆる擬多形の形成であるが、これら擬多形の中に多形の結晶を見出した。すなわち、**(2)(MeOH)**, **(2)₂(MeOH)**, **(2)(EtOH)** のそれぞれに結晶構造の異なる α と β の二つの結晶が存在することを明らかにした。多成分結晶において同一成分分子、同一組成比からなる多形の例は少なく、結晶構造の違いは興味のもたれるところであるが、主として、溶媒分子との間の水素結合パターンの様式が反映されたものであり、それらを多形構造と組成比に関連させて、きれいに分類することができた。



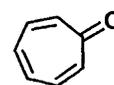
2

- 1) 春日井健太、今井一則、小林啓二、第 19 回有機結晶シンポジウム、2010 年 11 月 11 日 (大阪)
- 2) (a) Suzuki, Mitsuaki; Kobayashi, Keiji, *The Pacificchem 2010*, 2010, December, (Honolulu). (b) S. Suzuki and K. Kobayashi, *Crystal Growth & Design*, in press

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、



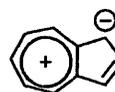
Tropolone



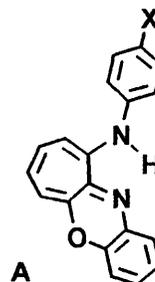
Tropone



Azulene

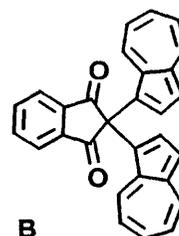


- (1) トロポコロナド及びその関連化合物の合成：トロポノイド及びアズレノイドを含むクラウンエーテル等の大環状化合物の合成とその金属錯体を合成し、その性状を検討している。本年度は、ベンゾ[*b*]シクロヘプタ[*e*][1,4]オキサジンの複素環交換反応を利用したトロポコロナド及びその関連化合物の合成を検討し、新規なアミノトロポノイミン誘導体 (A) 及びその金属錯体の合成について引き続き、研究を行なった。



A

- (2) 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。本年度も昨年に引き続き、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が得られた。



B

- (3) トロポン及びアズレン類の薬理活性の研究：天然に存在するヒノキチオールやグアイアズレンなどをはじめと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。当研究室では、10年程前から明海大学の坂上 宏 教授との共同研究により、比較のために 100種以上のトロポン及びアズレン類の薬理活性の研究もおこなっている。本年度も昨年に引き続き、ベンゾ[*b*]シクロヘプタ[*e*][1,4]オキサジン誘導体及びアズレン類の中で腫瘍選択性及び NO 産生抑制を示す化合物のホルメシス効果、細胞に対する紫外線保護効果、抗炎症効果に関して検討した。

第6回物質科学専攻修士論文発表会

2011年 2月24日

氏名	論文タイトル	指導教員
1. 春日井 健太 <small>かすがい けんた</small>	ビス(ヒドロキシフェニル)メタン骨格に基づくキノンメチド化合物の合成と性質	小林 啓二 教授
2. 原 亮 <small>はら りょう</small>	Dibenzosuberenone 誘導体の酸化および光反応	小林 啓二 教授
3. 北原 幹也 <small>きたはら みきや</small>	活性トロポノイドの求核置換反応の再検討 および大環状トロポコロナンドのニッケル錯体の合成	栗原 照夫 教授
4. 小鮎 陽介 <small>こぶな ようすけ</small>	Molecular Operating Environment (MOE) による抗HIV活性剤ADAMsのQSAR解析とタンパク質とのドッキングの研究	栗原 照夫 教授
5. 柴田 大樹 <small>しばた ひろき</small>	窒素内包フラーレン (N@C ₆₀) の水溶化	上原 博通 教授
6. 鈴木 雅也 <small>すずき まさや</small>	スピロ接合シクロヘキサジエノン誘導体の光反応	小林 啓二 教授
7. 瀬戸 秀幸 <small>せと ひでゆき</small>	ニンヒドリンとジアミン類との反応	小林 啓二 教授
8. 蛭田 理恵 <small>ひるた りえ</small>	種々のアリールアミノトロポニイミン誘導体の合成	若林 英嗣 教授
9. 藤波 尚弘 <small>ふじなみ なおひろ</small>	MOE を用いた Azulene 誘導体の QSAR 及び GOLD を用いた Protein - Ligand Docking	栗原 照夫 教授
10. 山田 裕之 <small>やまだ ひろゆき</small>	アズレン類とニンヒドリンの反応	若林 英嗣 教授

2010年度 物質科学専攻 修士課程中間発表会

2010年12月22日(水)

会場 1-118 教室

1. イサチン骨格に基づくキノイド形化合物の合成と性質
[合成有機化学研究室] 青山 礼子
2. Bindone の自己縮合による拡張 π 共役化合物の合成 .
[合成有機化学研究室] 今井 一則
3. 非経験的分子軌道法を用いた Tetrazole 類の熱分解機構の検討 .
[物理有機化学研究室] 内田 直輝
4. CS の振動回転スペクトルの精密測定
Gd₂@NC₇₉ の X-band 及び W-band の ESR シミュレーション
[分子分光学研究室] 槐 靖範
5. 2-フェニル-1,3-インダンジオンとフェニルヒドラジン類との反応
[合成有機化学研究室] 坂ノ下絵里子
6. HF, HCl の振動回転スペクトルの精密測定
[分子分光学研究室] 角田 典雅
7. I₂O₅/H₂SO₄ との着色反応による気相トルエン濃度の測定
[分子集合体科学研究室] 出水 俊喜
8. アルコキシアズレン類とニンヒドリンとの反応
[天然物有機化学研究室] 富田 惇輝
9. Origin による CO の標準スペクトル精度の検討
Cu ポルフィリンダイマーと La@C₈₂ の交換相互作用
[分子分光学研究室] 中田 智博
10. Molecular Operating Environment (MOE) を用いた抗精神病薬 Phenothiazine 類の
標的受容体の網羅的探索
[物理有機化学研究室] 宮前 智紀

平成 22 年度 サイエンスビジネスセミナー

- (1) 9月25日 藤田郁光 富士通 BS
わが国 I T 産業の国際環境と国際戦略
- (2) 10月2日 萩原 隆 昭和シェル石油 海外知財戦略室
知的財産の基礎
- (3) 10月9日 太田多禾夫 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
- (4) 10月16日 Prof. J.F. Ogilvie Simon Fraser Univ.
Aspects of scientific applications in technical industry
- (5) 10月23日 市川 勝 東京農業大学客員教授
バイオマスのエネルギー資源化技術と将来展望
- (6) 10月30日 金子雅一 キロン
医薬品開発における化学との接点
- (7) 11月13日 吉田雄一 和光純薬工業
和光純薬工業の事業展開
- (8) 11月20日 村山徹郎 元三菱化学チーフサイエンティスト
新商品開発のプロジェクト X
- (9) 11月27日 薄井玲子 社団法人 企業研究会
産業界での「実のある」異業種交流とは
- (10) 12月4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
- (11) 12月11日 長澤 浩 ニッタ(株)事業開発センター・チームリーダー
企業における新規開発と研究・開発者の使命—シーズ型開発とニーズ型開発
- (12) 12月18日 仲川政宏 元トヨタ自動車, 元スルザー・メテコ・ジャパン(株)
サイエンスビジネスと英語力
- (13) 1月 8日 京極浩史 日本電子分析機器本部 技術顧問
サイエンスとビジネスの関係——バイオテクノロジーをめぐって
- (14) 1月22日 岡田 勲 東工大名誉教授
製塩関連の話

2010年理学研究科FD講演会

- (1) 教育のIT化に向けて：「浮遊粒子状物質（SPM）および大気汚染物質の脳
型多変量技法の開発」

江戸川大学メディアコミュニケーション学部情報文化学科

神部順子 准教授

2010年 3月 1日

- (2) 教育のIT化に向けて：「Teaching and learning mathematics with symbolic
computation」

Simon Fraser University, Department of Mathematics, Center for Experimental and
Constructive Mathematics and Universidad de Costa Rica, Escuela de Quimica

John F. Ogilvie 博士（コスタリカ大学客員教授）

2010年10月29日

- (3) 理学部講演会を兼ねて：「学部と大学院での学び方と過ごし方：あるOBからの
メッセージ」

東京大学名誉教授、東京農工大学大学院客員教授

朽津耕三 先生

2010年12月25日

2010 年度業績リスト

研究論文

Microsoft Excel を用いた分子軌道の描画の実習

長岡 伸一, 寺前 裕之, 長嶋 雲兵

J. Comput. Chem. Jpn., **9**, 177–182 (2010)

Microsoft Excel を用いた分子軌道の描画の実習(2) —イオン性、分極関数、貫入—

長岡 伸一, 寺前 裕之, 長嶋 雲兵

J. Comput. Chem. Jpn., **9**, 241–248 (2010)

水の凍結が促進する酸化・還元反応 — ヨウ化物イオン酸性水溶液の凍結によるヨウ素生成 —

本田 数博, 森 義仁, 寺前 裕之, 長嶋 雲兵

J. Comput. Chem. Jpn., **9**, 205–210 (2010)

Imino–enamine Tautomerism and Dynamic Prototropy in 1-Imino-3-amino-1*H*-indens

Y. Mukano, M. Momochi, Y. Takanashi, M. Suzuki, H. Wakabayashi, H. Teramae, and K. Kobayashi

Tetrahedron, **66**, 605–611 (2010)

Hormetic Response of Cultured Normal and Tumor Cells to 2-Aminotropone Derivatives

H. Wakabayashi, T. Narita, A. Suga, and H. Sakagami

International Journal of In Vivo Research, **24**, 39-44 (2010)

Hormetic and Anti-radiation Effects of Tropolone-related Compounds

K. Kantoh, M. Ono, Y. Nakamura, Y. Nakamura, K. Hashimoto, H. Sakagami, and H. Wakabayashi

International Journal of In Vivo Research, **24**, 843-852 (2010)

学会発表

Theoretical study on the ground and excited states of 3,5-diacetyl-1,4-dihydrolutidine
Hiroyuki TERAMAE, Yasuko Y. MARUO, and Jiro NAKAMURA
MATH/CHEM/COMP2010 (Dubrovnik), 2009 年 6 月

ルチジン誘導体の励起状態に関する研究
寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎
日本コンピューター化学会 2010 春期年会 (東京), 2010 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
第 13 回理論科学討論会 2010 (札幌), 2010 年 5 月

ルチジン誘導体の電子状態に関する理論的研究
寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎
シンポジウム「電子状態理論の新機軸」(岡崎), 2010 年 8 月

ルチジン誘導体の電子状態に関する理論的研究
寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎
分子科学討論会 2010 (大阪), 2010 年 9 月

ルチジン誘導体の励起状態に関する研究(2)
寺前裕之, 丸尾容子, 中村二郎
日本コンピューター化学会 2010 秋期年会 (長岡), 2010 年 11 月

Theoretical study on the ground and excited states of 3,5-diacetyl-1,4-dihydrolutidine
Hiroyuki TERAMAE, Yasuko Y. MARUO, and Jiro NAKAMURA
Pacifichem2010 (Honolulu), 2010 年 12 月

DF 分子スペクトルの Non-Born-Oppenheimer 解析
角田典雅, 堀合公威, 上原博通
第 4 回分子科学討論会 2010 (大阪), 2010 年 9 月

CS の振動回転スペクトルの non-Born-Oppenheimer 解析
槐 靖範, 中田智博, 堀合公威, 上原博通
第 4 回分子科学討論会 2010 (大阪), 2010 年 9 月

$N_2-C^{16}O^{18}O$ 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 4 回分子科学討論会 (大阪), 2010 年 9 月

Pyrrole の NH 伸縮振動の基本音・倍音の赤外吸収強度への NH--- π 水素結合形成
の作用
二見能資, 尾崎裕, 濱田嘉昭, 尾崎幸洋
第 4 回分子科学討論会 (大阪), 2010 年 9 月

トロポノイド化合物の求核置換反応の再検討
北原幹也, 若林英嗣, 栗原照夫
日本化学会第 90 回春季年会 (東大阪), 2010 年 3 月

ニンヒドリンとジアミン類との反応
瀬戸秀幸, 若林英嗣, 小林啓二
日本化学会第 90 回春季年会 (東大阪), 2010 年 3 月

スピロ接合シクロヘキサジエノン化合物の光反応
鈴木雅也, 若林英嗣, 小林啓二
日本化学会第 90 回春季年会 (東大阪), 2010 年 3 月

スピロ接合した 2,5-シクロヘキサジエノン誘導体の光転位反応
鈴木雅也, 若林英嗣, 小林啓二
第 21 回 基礎有機化学討論会 (名古屋), 2010 年 9 月

2-アルコキシアズレン類とニンヒドリンとの反応
富田 惇輝, 今井 一則, 鈴木 光明, 小林 啓二, 若林 英嗣
第 21 回 基礎有機化学討論会 (名古屋), 2010 年 9 月

1,3-インダンジオンの2位にジアミン類が環状接合したスピロ化合物における
分子内電荷移動相互作用

瀬戸 秀幸, 横橋 利明, 若林 英嗣, 寺前 裕之, 小林 啓二

第21回 基礎有機化学討論会 (名古屋), 2010年9月

Polymorphs and pseudopolymorphs of solvated crystals of indantrione-1,2-dioxime

Mitsuaki Suzuki, and Keiji Kobayashi,

Pacificchem2010 (Honolulu), 2010年12月

新しい scissors 型ホスト化合物による包接結晶の形成と結晶構造

春日井健太, 今井一則, 小林啓二

第19回有機結晶シンポジウム (大阪), 2010年11月

アズレン類とニンヒドリンの反応

山田裕之, 小林啓二, 栗原照夫, 若林英嗣

日本化学会第90回春季年会 (東大阪), 2010年3月

Annual Report
城西大学大学院物質科学専攻

第7巻 2011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

