

# 設計に基づく分子自在制御の化学

平成 25 年度 ～ 平成 29 年度私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

研 究 成 果 報 告 書

平成 30 年5月

学校法人名 学校法人 立教学院

大学名 立教大学

研究組織名 未来分子研究センター

研究代表者 枝元一之

(立教大学理学研究科教授)

## は し が き

本冊子は、平成24年度より平成29年度まで、文部科学省の私立大学戦略的基盤形成支援事業の選定を受けて、立教大学理学部に設置された未来分子研究センターが主体となって推進した研究プロジェクト「設計に基づく分子自在制御の化学」の研究成果をまとめたものです。

化学の目的の一つは、分子の構造を様々に変えることでその性質を自在に制御し、新規な機能性を持った分子・分子材料を開発していくことにあります。従来、機能分子の開発は、主に天然に存在する分子を手本として試行錯誤的に分子構造を変換することにより行われてきました。しかし、優れた機能を持つ分子・分子材料を合目的に創製するには、機能の本質の理論化学的解析とそれに基づく「分子設計」、それを基とした「合成」と、構造・物性の「計測」、さらにその機能の「評価」を行い、それを理論化学的解析にフィードバックするサイクルを確立する必要があります。本研究プロジェクトでは、実験と計算が密接に連携することによる「設計」「合成」「計測」「評価」のサイクルを確立し、新たな課題解決型研究システムを構築することを目指し、計算による分子設計を担当する「設計グループ」と、実験的に機能分子の構築を行う「反応制御グループ」並びに「物性・機能制御グループ」を設け、これらのグループが互いに成果をフィードバックし合うことにより、機能分子・分子材料開発を行ってきました。このような課題解決型研究システムの構築により、革新的な機能を持つ分子・分子材料、例えば光メモリ、光駆動アクチュエーター、ドラッグデリバリーシステム、環境応答機能触媒、不斉合成触媒、水の光分解触媒、生分解性人工ポリマーなどの開発が大きく進展いたしました。それらの具体的成果につきましては、本冊子の内容をご参照いただければと思います。今後も、本プロジェクトで得られた成果を基盤として、理学研究科における研究・教育のさらなる発展を目指す所存です。本プロジェクトに関しまして、ご意見・ご助言等お寄せいただければ誠に幸甚です。

本研究プロジェクトを推進するにあたり、さまざまにご協力・ご支援をいただいた立教大学の関連部署の皆様、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

平成30年5月  
研究代表者 枝元 一之  
(立教大学理学研究科教授)

## 目次

第1部: 研究成果報告書概要	1
第2部: 研究成果報告	241
1. 研究プロジェクトの概要	242
2. 研究体制	243
3. 研究成果報告	246

## **第1部：研究成果報告書概要**



	教授	性化合物の創製と反応開発	
鈴木 望	理学研究科・助教	分光分析法によるキラル分子の物性および分子間相互作用の解析	〃
中藪 孝志	理学研究科・助教	分子性触媒を基盤とした高効率な光エネルギー変換反応系の構築	〃
枝元 一之	理学研究科・教授	表面反応を利用した高機能触媒の開発	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)
入江 正浩	未来分子研究センター・客員研究員	光スイッチ機能を持つ蛍光分子の設計と合成	〃
松下 信之	理学研究科・教授	外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価	〃
森本 正和	理学研究科・教授	結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製	〃
大山 秀子	理学研究科・教授	高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明	〃
三井 正明	理学研究科・教授	時空間分解顕微計測による光電変換ダイナミクスの解明	〃
上谷 幸治郎	理学研究科・助教	天然高分子材料を用いた機能材料の創製	〃
新堀 佳紀	理学研究科・助教	機能性ナノクラスターの精密合成と構造・物性の解明	〃
共同研究機関等			
古明地 勇人	産業技術総合研究所・主任研究員	分子動力学手法の開発と応用	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)
福澤 薫	星薬科大学薬学部・准教授	計算化学の先導的・実証的応用計算	〃
吉澤 一成	九州大学先導物質化学研究所・教授	単一分子伝導の光制御に関する理論的研究	〃
都築 誠二	産業技術総合研究所・上級主任研究員	計算化学手法を用いた分子間相互作用の精密解析	〃
池田 潔	広島国際大学薬学部・教授	未来志向型機能を有するバイオプローブの合成開発	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

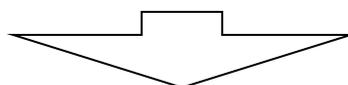
大坪 忠宗	広島国際大学・薬学部・准教授	未来志向型機能を有するバイオプローブの合成開発	〃
-------	----------------	-------------------------	---

<研究者の変更状況(研究代表者を含む)>

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
機能分子を配位または内包した金属-酸化物複合ナノクラスターの創製と評価	理学研究科・助教	掛札 洋平	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

(変更の時期:平成 26 年 3 月 31 日)



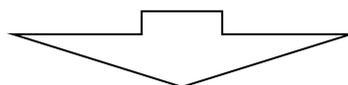
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
単結晶金電極への機能性化合物の吸着	理学研究科・教授	池澤 泰成	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

(変更の時期:平成 26 年 3 月 31 日)



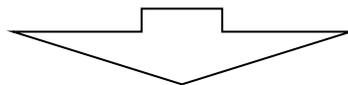
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



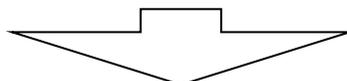
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	理学研究科・教授	三井 正明	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



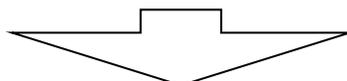
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	理学研究科・助教	上谷 幸治郎	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



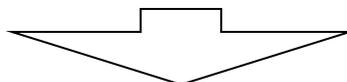
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	産業技術総合研究所・上級主任研究員	都築 誠二	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



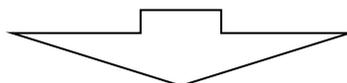
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	広島国際大学・薬学部・准教授	大坪 忠宗	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
光スイッチ機能を持つ 蛍光分子の設計と合成	理学研究科・ 特任教授	入江 正浩	3. 物性に基づく機能を 有する分子・分子材料 の開発(物性・機能制御 グループ)

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



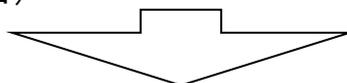
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理学研究科・ 特任教授	未来分子研究センター・ 客員研究員	入江 正浩	3. 物性に基づく機能を 有する分子・分子材料 の開発(物性・機能 制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理論設計支援による機 能分子触媒の開発	理学研究科・ 准教授	山中 正浩	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設計(設 計グループ)

(変更の時期:平成 26 年 4 月 1 日)



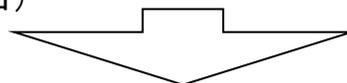
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理学研究科・准教授	理学研究科・教授	山中 正浩	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設 計(設計グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
計算化学の先導的・ 実証的応用計算	みずほ情報総研 (株)・チーフコン サルタント	福澤 薫	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設計(設 計グループ)

(変更の時期:平成 26 年 7 月 1 日)



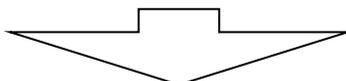
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
みずほ情報総研 (株)・チーフコンサ ルタント	日本大学松戸歯学部科学 教室・助教	福澤 薫	1. 分子の機能性の理 論的解析と分子設 計(設計グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 28 年 4 月 1 日)



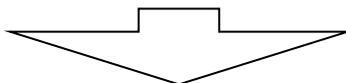
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	理学研究科・助教	鈴木 望	2.反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
計算化学の先導的・実証的応用計算	日本大学松戸歯学部科学教室・助教	福澤 薫	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)

(変更の時期:平成 28 年 10 月 1 日)



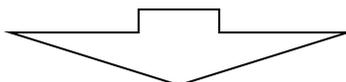
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
日本大学松戸歯学部科学教室・助教	星薬科大学薬学部・准教授	福澤 薫	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
Self-assembling complexes, their properties, and catalysis reactions	理学研究科・教授	ホーン・エルンスト	2.反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

(変更の時期:平成 29 年 3 月 31 日)



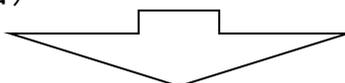
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発	理学研究科・准教授	和田 亨	2.反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

(変更の時期:平成 29 年 4 月 1 日)



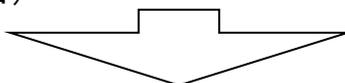
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理学研究科・准教授	理学研究科・教授	和田 亨	2.反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発	理学研究科・准教授	森本 正和	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

(変更の時期:平成 29 年 4 月 1 日)



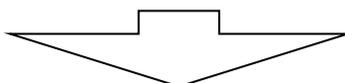
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
理学研究科・准教授	理学研究科・教授	森本 正和	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 29 年 4 月 1 日)



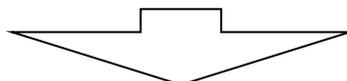
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
東京大学大学院薬学系研究科・特任研究員	理学研究科・助教	堤 亮祐	1. 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 29 年 4 月 1 日)



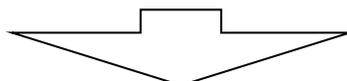
新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
	理学研究科・助教	中藺 孝志	2.反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

旧

プロジェクトでの研究課題	所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割

(変更の時期:平成 29 年 4 月 1 日)



新

変更前の所属・職名	変更(就任)後の所属・職名	研究者氏名	プロジェクトでの役割
東京理科大学理学部応用化学科・博士 研究員	理学研究科・助教	新堀 佳紀	3. 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

## 11 研究の概要(※ 項目全体を10枚以内で作成)

### (1) 研究プロジェクトの目的・意義及び計画の概要

化学の目的の一つは、分子の構造を様々に変えることでその性質を自在に制御し、新規な機能性を持った分子・分子材料を開発していくことにある。革新的な機能を持つ分子・分子材料を合目的的に創製するには、機能性の本質の理論化学的解析とそれに基づく「分子設計」、それを基とした「合成」と、構造・物性の「計測」、さらにその機能性の「評価」を行い、それを理論化学的解析にフィードバックするサイクルを確立する必要がある。本プロジェクトは、計算と実験が密接に連携することによりこのようなサイクルを確立し、分子技術研究のモデルとなる新たな研究拠点を未来分子研究センターに構築することを目指すものである。

本プロジェクトでは、計算による分子設計を担当する「設計グループ」と、実験的に機能分子の構築を行う「反応制御グループ」並びに「物性・機能制御グループ」を設け、これらのグループが互いに成果をフィードバックし合うことにより、機能分子・分子材料開発を行う。「設計グループ」では、機能分子の設計上必須となる複雑系の計算手法の開発を進めるとともに、機能性の本質の理論化学的解析およびそれに基づく機能分子の設計を行う。「反応制御グループ」は、反応性の制御が機能性発現の鍵となる物質、すなわち各種高機能触媒等の開発を担当する。「物性・機能制御グループ」は、物性の制御が機能性発現の鍵となる物質、すなわち光に応答して機能を発現する分子等の開発を担当する。実験グループによる合成分子の物性・構造の計測結果、および機能性の評価結果は「設計グループ」にフィードバックされ、さらなる理論的解析を経て分子の再設計を行う。本研究は学術的には化学の新たな方法論を与えるものであり、さらに得られた具体的成果は環境・エネルギー材料等様々な分野に革新的な進展をもたらすと期待される。

### (2) 研究組織

本研究プロジェクトは、本学の未来分子研究センターの研究員 18 名、学外研究者 6 名、本学の大学院生 (2013 年度 45 名、2014 年度 45 名、2015 年度 50 名、2016 年度 47 名、2017 年度 48 名)により遂行した。大学院生のうち、各年度それぞれ 2 名、4 名、6 名、4 名、5 名を RA に採用した。また、設計グループ強化のため、2016、2017 年度において 2 名の PD を採用した。研究代表者の枝元は、研究プロジェクトを総括するとともに自らもプロジェクトの一翼を担い、物性・機能制御グループにおいて研究を行った。各グループの相互連携を始めとする研究プロジェクトの円滑な推進のため、各研究グループよりグループリーダーを 1 名選出し、運営委員会を組織し、年数回運営委員会を開催した。運営委員会では、プロジェクトの進捗の評価ならびに調整を行い、さらに公開シンポジウム等の企画、定期刊行物の発刊、予算や人事等について審議した。本研究プロジェクトに参画する研究者は、設計グループ、反応制御グループ、物性・機能制御グループのいずれかに属し、各グループ間で互いに成果をフィードバックしつつ研究を進めた。また、会計担当の事務員 1 名と、プロジェクトの推進に関わる会計以外の業務を担当する教育研究コーディネーター 1 名(本学の予算で雇用)が、研究支援に従事した。

### (3) 研究施設・設備等

研究施設・装置・設備については、「17. 施設・装置・設備」を参照のこと。本プロジェクトでは、既存の研究施設に加え、研究遂行上必須の研究設備(大規模サーバー、超伝導マグネット、迅速精密質量分析装置、顕微ラマン分光装置)を導入した。これらの装置は、それぞれ担当者が管理し、プロジェクト研究員の利用に供し、さらに研修を受けて使用許可を得た大学院生にも開放した。

### (4) 研究成果の概要 ※下記、13及び14に対応する成果には下線及び\*を付すこと。

#### 平成 25 年度

##### 1. 設計グループ

各研究グループとの連携を開始するとともに、理論解析を効率的に実施するための環境整備・プログラム開発を行った。また、理論解析の効率化に向けて、プログラムの高速化・高機能化を行った。

(1-1)高精度量子化学計算における2電子積分の効率化に向け、コレスキー分解型3次摂動を開発しFMO

プログラム ABINIT-MP への組み込みを実施した。さらに、FMO プログラム ABINIT-MP を「京」コンピュータの上に移植し、ライブラリとして提供した(論 183,187,247,249、学 725,726,810,838,927,950,951,966-968)。(1-2)効率的に光学活性化合物を提供する不斉有機分子触媒としてキラルリン酸触媒に着目し、イミンの不斉還元反応や臭素化反応を利用した不斉非対称化反応について反応機構から立体制御機構までを解明した(論 256-261)。

(1-3)光応答性分子を超高解像イメージングのためのバイオプローブとして利用するため、水溶化を目指して各種糖置換基を導入した新規ジアリールエテン分子を設計開発した(学 964)。

## 2. 反応制御グループ

設計グループとの連携を開始した。エネルギー変換触媒の開発では、構造変化をともなう酸化還元活性な白金錯体を理論計算により分子設計し(学 850,913)、流通式分離系による化学特性解析の研究では、逆相液体クロマトグラフィー系における分離挙動の理論計算による定量的な解析を行った(学 823,870)。

(2-1)理論設計支援による複合機能分子触媒開発では、ビスアミジン骨格を基盤とする機能複合化・複核化配位子を開発し、亜鉛試薬と組み合わせた不斉分子触媒が、 $\alpha$ -ケトエステルの不斉向山アルドール反応や $\alpha$ -ケトエステルの不斉アルキル化を促進することを見出した。

(2-2)自然界における化学物質の立体制御法を解明するため、テルペン化合物の設計と制御について検討を行った。中国産キク科 *Ligularia* 属植物の成分研究では、*L. anoleuca* と *L. fischeri* の産するテルペン化合物が互いに近いことを明らかにした(論 208)。

(2-3)固定型リガンド-基質分子間相互作用の平衡論・速度論的情報を得るため、高速液体クロマトグラフィー(HPLC)による分子間相互作用の解析法を開発した。関連パラメータの実測法や推算法(論 270,271)、および解析基盤となるモーメント式を導出して実験操作法と解析手順を確立した(論 211、学 782,789,793,822)。

(2-4)効率的なエネルギー変換触媒の開発を目指し、配位子効果による錯体触媒の酸化還元電位の制御に成功した(学 882,917,938)。Ru-C 結合を有する単核ルテニウム錯体が、低過電圧で水の酸化を触媒することを見出した(学 688,704,867,915)。さらに、二核コバルト錯体が高選択的に酸素四電子還元反応を触媒することを解明した(論 269、学 851,852,914,916)。

(2-5)高周期 16 族元素を中心とする 6 価化合物の合成法の確立を行い、実験的探索合成を行った。4 価 16 族元素化合物に対する酸化的ハロゲン化反応により 6 価化合物へと導くことが出来、系統的合成法の開発を行った(学 885)。

## 3. 物性・機能制御グループ

設計グループと連携のうえ、以下の研究を開始した。

(3-1)高機能光触媒の二次元  $\text{TiO}_2$  ナノシートの物性解明に向けて、ナノシートと格子の整合する  $\text{Ag}(110)$  上に、 $(1 \times 1)\text{TiO}_2$  薄膜を合成する方法を確立した(学 856,872,874,880,888)。

(3-2)分子間水素結合を有するフォトクロミック分子結晶において不斉選択的光反応が進行すること(論 196)、ランタニド系金属錯体とフォトクロミック分子との配位結合を有する複合分子結晶が光照射により磁気物性を変化させることを見出した(論 225)。

(3-3)光スイッチ蛍光性を持つジアリールエテンについて、適切な置換基の導入により開環反応量子収率を向上させることに成功し、またジアリールエテンの開環反応量子収率が照射波長に依存することを明らかにした(論 223)。バイオプローブへの応用に向けて、ジアリールエテンに親水性置換基を導入することにより水溶化を行った(論 276)。

(3-4)電子アクセプター性分子であるアルキルピオロゲン誘導体に対イオンとしたテトラシアニド白金錯体の新規電荷移動塩を合成し、それらが発光することを見出した。単結晶 X 線構造解析により、本分子間電荷移動相互作用に基づく発光機構は構造自由度が大変高いことが明らかとなった。

(3-5)ポリ乳酸(PLA)の sc 化とアロイ化を同時に行うことで PLA の耐熱性と耐衝撃性の向上を達成し、また

異種金属から成る層状複水酸化物を合成し、その熱分解温度( $T_d$ )がポリプロピレン(PP)の  $T_d$  に近いほど PP に対する難燃効果が高いことを見出した (学 901,905) (特 7-9)。

平成 25 年度の成果をまとめて公開シンポジウム(別紙資料 1)を実施し、さらに成果報告書(別紙資料 2)、ニュースレター(別紙資料 3)を刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。

## 平成 26 年度

### 1. 設計グループ

前年度までの結果を踏まえ、さらに各研究グループとの連携を強化し、理論計算と実験の融合を深化させて知的応答機能分子材料における機能性の解析及び分子設計を推進した。

(1-1) 引き続き FMO 計算の高速化、高機能化を行いながら、その応用計算として、界面、高分子、生体分子に関連した知的応答機能分子材料に対して、機能性の解析及び分子設計を行った。高分子の粗視化シミュレーションのための有効パラメータを FMO 計算から算定し、初期検討として実際にナフィオンなどを例にシミュレーションを実施した(学 637)。液体クロマトグラフィーの分離過程モデルの分子動力学計算を行い、水とメタノール溶媒での挙動の違いを理論的に解析した。流通式分離系による化学特性解析の研究では、チモール- $\beta$ -シクロデキストリン間の会合エネルギーを定量的に解析し、この包接反応系における分子認識の特徴を計算化学的に明らかにした(学 686,783)。

(1-2) 複合機能分子触媒や不斉分子触媒の機能解析を行い、合理的分子設計への足掛かりとした。不斉複核亜鉛触媒による不斉ヨードラクトン化反応(論 198)、キラルリン酸触媒やアミノ酸触媒によって達成される不斉反応について理論解析を行い、基質に応じて発現する機能性から立体制御機構までを理論的に解明した(論 193,194,196,197,256)。環状の三座配位子を有する白金(IV)錯体の電気化学的な検討に基づき、金属-配位子間の軌道相互作用について理論的な再解析を行った(論 136)。

(1-3) 設計に基づき、フォトクロミック分子に効率的な糖置換を導入することで、水溶性の向上に成功し(学 796) (特 1)、ウイルスの表面タンパク質等に対してバイオプローブとして応用した。

### 2. 反応制御グループ

前年度の設計グループによる理論的な検討を踏まえて実験を行い、その結果を設計グループへフィードバックすることを開始した。

(2-1) 金属-ビスアミン触媒の開発を推進し、ルイス・ブレンステッド複合酸触媒が  $\alpha$ -ケトエステルの不斉向山アルドール反応を、亜鉛三核触媒がニトロアルケン類とインドールの不斉 Friedel-Crafts 反応を促進することを見出した。

(2-2) Ligularia 属植物の成分研究では、*L. subspicata* におけるフラノエレモフィラン化合物の複雑な多様性の存在などを明らかにした(論 206)。ビスボラン化合物の合成では可能な4つの立体異性体をすべて合成し、立体構造が NMR で区別できることを示した(論 161)。

(2-3) 光学異性体クロマト分離系におけるキラル分離挙動を解析し、2-フェノキシプロピオン酸(R 体)と  $\beta$ -臭素化シクロデキストリン間の相互作用に関する会合速度定数および解離速度定数を定量的に求めた(論 163、学 685)。

(2-4) 水の酸化反応触媒に関する研究成果を本にまとめ(図書 13)、さらに水の酸化反応、および酸素還元反応において、錯体触媒の架橋配位子による反応速度の向上と反応選択性の制御に成功した(学 649-651,772-775)。

(2-5) 設計グループとの密接な連携により、糖置換基を導入して水溶性を向上したジアリールエテン誘導体を合成し(学 796) (特 1)、ウイルスの表面タンパク質等に対するバイオプローブとして応用した。

(2-6) 6価典型元素化合物を分子コアとする置換基の官能基修飾法を確立した。中性分子である6価 16 族元素上のハロゲン原子を一端引き抜き、カチオン種とした後に官能基化することで望む6価化合物へと変換できることが判った(学 853)。

### 3. 物性・機能制御グループ

前年度に引き続き、設計グループによる理論的な検討を踏まえて実験を行い、その結果を設計グループへフィードバックすることを開始した。

(3-1)Ag(110)上に作成した(1×1)TiO<sub>2</sub> 薄膜が、各種物性測定より二次元 TiO<sub>2</sub> ナノシートである可能性が高いことを見出した(学 657,680,692,720,723,801)。

(3-2)水素結合ネットワークを有するフォトクロミック分子結晶について、光反応に伴う分子構造変化により水素結合に平行な結晶軸が可逆的に伸縮することを見出し、光駆動アクチュエーターの変形機構に関する重要な知見を得た。ジアリールエテンの反応点にペリレンを導入すること、もしくはスルホン化ジアリールエテンのエテン部位をジシアノエチレンで置換することで応答波長を長波長化し、可視光応答フォトクロミック分子の新しい設計指針を提示した(論 226)。

(3-3)各種アルキルビオロゲン誘導体・テトラシアニド白金酸塩について発光量子収率、発光色の CIE 色度図座標の測定を行い、これらの物性値を明らかにした。ジヒドロビピリジニウムイオンとヘキサシアニド鉄酸イオンで構成される新規電荷移動塩を合成し、酸蒸気による三色系のベイポクロミック現象を発見し、単結晶構造解析により色変化の原因である構造変化を明らかにした。

(3-4)熱誘起相分離により sc-PLA から成る塊状多孔質体を生成し、sc 化により耐熱性に加え耐薬品性も著しく向上することを見出した。スーパーエンジニアリングプラスチックと PP をアロイ化することにより、PP の難燃化・耐熱化を達成するなどの成果を得た(特 10,12)。

平成 26 年度の成果をまとめて公開シンポジウム(別紙資料 4)を実施し、さらに成果報告書(別紙資料 5)、ニュースレター(別紙資料 6)を刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。3 月に外部評価委員会による外部評価(別紙資料 4)を受け、それを元に研究方針の再検討を行った。

## 平成 27 年度

### 1. 設計グループ

前年度までの結果を踏まえ、さらに各研究グループとの連携を強化し、理論計算と実験の融合を深化させて知的応答機能分子材料における機能性の解析及び分子設計を推進した。

(1-1) 高速化、高機能化した FMO 法により、界面、高分子の反応性を解析した。

(1-2) 光駆動アクチュエーターの変形機構等につき、理論解析を行った。

(1-3) 複合機能分子触媒や不斉分子触媒の理論的検討に基づき、その高機能化を検討した。新規な分子触媒骨格として、柔軟な骨格を有する不斉分子触媒に着目し、位置選択的アシル化反応、不斉酸化反応について理論解析を行い、基質に誘導適合して発現する触媒機能について解明した(論 148,149)。現在は反応制御グループとの共同で、適合誘導型制御の一般性について解析を進めるとともに、高機能な分子触媒の設計指針の確立を目指して研究を推進している。

(1-4) 標的分子-タンパク質間相互作用解析により、各種受容体タンパク質から生体細胞まで幅広く利用可能な超高解像顕微鏡におけるフォトクロミック標識分子の設計開発を行った。

### 2. 反応制御グループ

さらに理論計算と実験の融合を深化させるべく、新たに設計グループとの共同で、二酸化炭素還元によるメタノール生成を目指したルテニウム-ルイス酸金属錯体の開発を開始した。また高周期元素を含む芳香族性化合物に関する理論予測とそれに基づく分子設計の知見を得た。天然物に関しては、*L. hodgsonii* が日本産と中国産で異なるのみならず、中国産もさらに2つのケモタイプに分けられることなどを明らかにした(論 157)。

(2-1)金属-ビスアミン触媒の開発を推進し、 $\alpha$ -ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応や不斉アルキニル化反応の開発を開始した。

(2-2) 非固定型の遊離リガンド-基質分子間相互作用の平衡論的および速度論的情報を得るための解

析法を開発した。特に、キャピラリー電気泳動を利用するリガンド非固定型の分子間相互作用解析法を開発した(学 632,633,635)(特 5)。

(2-3)水の酸化反応を触媒する二核ルテニウム錯体の金属間距離と反応キャビティの親水性を制御することにより、反応速度が向上することを見出した。

(2-4) 超高解像顕微鏡(PALM/STORM)に応用可能な、フォトクロミック標識分子の開発を開始した。

(2-5) 6価典型元素化合物をオクタヘドラル空間の制御分子として用いて、機能性発現のためのデザイン合成を行った。また種々の酸化状態を有する 16 族元素化合物の自在制御合成に関する知見を得た(論 214,215、学 791,886,887,960,961)。

### 3. 物性・機能制御グループ

前年度に引き続き、設計グループによる理論的な検討を踏まえて実験を行い、特に高分子材料の物性測定の結果を設計グループへフィードバックすることを開始した。

(3-1)Ag(110)上に作成した(1×1)TiO<sub>2</sub> 薄膜の電子状態について、角度分解光電子分光測定を行い、二次元電子状態を求めることに成功した。

(3-2)フォトクロミック分子結晶の光誘起変形を解析し、光異性化反応に伴う分子の構造変化がマクロスケールの結晶外形変化を誘起することを明らかにし、光照射により自重の 1900 倍の物体を持ち上げるなど、光駆動アクチュエーターとして優れた機能を発現することを見出した(論 169)。

(3-3)アルキルピオロゲン誘導体・テトラシアニド白金酸塩が、湿度に応じてその発光色を変えることを発見した。各種物性測定の結果から、結晶水の数が大きく発光特性を変えることを明らかにした。

(3-4)ポリ乳酸(PLA)の可塑性により分子運動を容易にし、それが分子間相互作用による sc 化と異種高分子間界面反応のアロイ化に与える影響について検討した。また分解促進剤を含む PLA 塊状多孔質体を熱誘起相分離法にて創出し、PLA 多孔質体の分解速度を制御した(特 15)。

平成 27 年度の成果をまとめて公開シンポジウム(別紙資料 18)を実施し、さらに成果報告書(別紙資料 20)、ニュースレター(別紙資料 19)を刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。

## 平成 28 年度

### 1. 設計グループ

前年度までの結果を踏まえ、さらに各研究グループとの連携を強化し、理論計算と実験の融合を深化させて知的応答機能分子材料における機能性の解析及び分子設計を推進した。

(1-1) FMO 計算の粗視化シミュレーション(DPD)で用いる有効パラメータ算定に用いる手法とワークフローの基盤を確立し、ナフィオン-水系、脂質-水系などで先導的な応用計算を行った(学 206,247,250, 263,270,271,272,273,322,323,333,334,336,408)。また、情報科学関係では機械学習を用いた計算結果の自動解釈等を試みた(論 12、学 246,263,335,407)。

(1-2) 不斉分子触媒の機能解析として、キラルリン酸やキラルピスリン酸触媒反応における立体制御機構を解明した。また、複数の反応部位を有する基質の高選択的化学変換について理論解析を行い、相互作用ネットワークの構築と反応場の立体的修飾に関する分子像を明らかとして、合理的分子触媒設計への足掛かりとした(論 81,83,84,85、学 275,276,277,295,410,411)。

(1-3) 外部からの非接触光刺激に応答するフォトクロミック分子に対して、糖置換基を導入することにより水溶性を向上させた新規バイオプローブの設計・開発を行った(学 409,464,474)。構造を基盤とした計算化学手法と配列を基盤としたバイオインフォマティクスを融合させた新アプローチを疾病関連の様々な生体系へ適用した(論 78,79、学 175,251,254,264,274,339,340,341,396,397,455,456,457,459,460,462,463)。

(1-4) 蛍光スイッチフォトクロミック分子の実験的成果から得た合理的設計指針に基づいて、水溶性置換基を有し、なおかつ抗体タンパクへのラベル化が可能なバイオイメージングプローブを合成した(論 121)。

## 2. 反応制御グループ

設計グループとの連携を深め、設計された金属-ビスアミジン触媒の不斉分子触媒機能の検討を開始し、また空間制御による機能性発現のデザインを行った。

(2-1) Friedel-Crafts アルキル化反応、不斉ビニロガス向山アルドール反応、ヒドロホスホニル化反応を達成した。また、CPL 特性を示す色素-キラルビスアミジン超分子系を設計した(学 290-292,297,388,389)。

(2-2) シクロデキストリン誘導体による包接反応等の分子間相互作用や界面透過現象を解析して会合・解離速度定数や透過速度定数を求め、解析法の妥当性を実証した(論 104,105,106、学 293,294,356,357,358,398,399,415)(特 5)。

(2-3)GC 電極上に修飾した二核 Co 錯体が酸素の四電子還元反応を触媒することを明らかにした(学 127,224,348)(特 6)。ルテニウム錯体の構造を精密に制御することにより低電位での水の酸化を実現した(論 100,101,学 219,220,221)。

(2-4)カルボキシル基を有する蛍光性ジアリールエテンを用いて Vero 細胞  $\alpha$ -tubulin の RESOLFT 超解像バイオイメージングに成功した(論 121)。

(2-5) 6価典型元素化合物をオクタヘドラル空間の制御分子として用いて、機能性発現のためのデザイン合成を行った他、種々の酸化状態を有する 16 族元素化合物の自在制御合成に関する知見を得た(学 230,283,301,413,414)。

## 3. 物性・機能制御グループ

設計グループによる理論的な検討を踏まえて機能分子の開発を進めるとともに、更なる詳細な物性計測を目指して単分子計測法の開発にも着手し、高分子膜中や半導体界面における光誘起電荷移動について1分子計測を行って、電荷分離・拡散・再結合の機構を明らかにした。

(3-1) Ag(110)上に作成した(1×1)TiO<sub>2</sub> 薄膜の結晶性を向上し、電子状態を解明した(論 44、学 169,259,365)。

(3-2)水素結合性ジチアゾリルイミダゾール誘導体を用いて、プロトン移動機構による誘電物性と光化学反応性を併せもつ複合機能分子結晶を構築した。また、設計グループとの連携により、カルボキシル基を有する蛍光性ジアリールエテンを用いて RESOLFT 超解像バイオイメージングに成功した(論 121)。

(3-3) 有機アクセプターと組み合わせて 8 種類の新規発光性白金錯体、パラジウム錯体を合成し、単結晶構造解析を行い、発光特性を解析した(学 302,303,310,311,353,367,368)。

(3-4)バイオマス由来のポリ乳酸(PLA)を用いて、生体・環境に対しても安全な新規ブレンド(フィルム、多孔質体)を開発し、その高次構造と加水分解挙動の関連性について詳細な検討を行った(論 64,130、学 315,331,332,404)(特 7,15,20)。また、高熱伝導性高分子の研究を行い、天然高分子の結晶繊維セルロースナノファイバーにおいて、高い熱伝導性を見出した(論 178、学 165,166,260,386,403,529,530,549,623,630)。

平成 28 年度の成果をまとめて公開シンポジウム(別紙資料 24)を実施し、さらに成果報告書(別紙資料 27)、ニュースレター(別紙資料 23)を刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。

## 平成 29 年度

### 1. 設計グループ

各研究グループとの連携のもとに理論計算と実験の融合を深化させて知的応答機能分子材料における機能・分子設計の指針を確立するとともに、今後の展開を指向した理論的基盤を整備した。

(1-1) FMO-DPD 連携の技術を発展させ、イオン系やタンパク質も扱えるようになった。また、有効パラメータ算定のワークフローのコード、独自の DPD コードも開発した(論 1,2,3,13、学 1,8,10,42,54,74,92,95,102,106,195,196)。機械学習・深層学習を含めた統計的な解析手法の整備も進み、応

用の範囲も広げることが出来た(論 17、図書 1、学 73,76,94,101)。

(1-2) 不斉分子触媒の高機能化を指向して、キラルリン酸-カルボン酸触媒、キラルイミノホスホラン触媒、グアニジン-ウレア触媒の不斉触媒機能について理論解析を行い、相互作用ネットワークの構築と反応場の立体的修飾に基づいて、立体制御機構を明らかにした(論 23,25,91、学 12,15,17,18,21,58,59,208,209,210)。

(1-3) in cell系へ光応答分子の適用を拡張し、メソスコピックレベルでのバイオイメージングの基盤を確立した(学 80)。日本独自に開発の進む計算手法をウイルスタンパク質、産業応用化酵素、生活習慣病標的など、実際の生体系の解析に適用し、新規薬物候補化合物を合理的に設計・開発した(論 18,19,20,21 学 2,5-7,44,45,78,79,110-117,176,177)。

## 2. 反応制御グループ

設計グループとの連携で、反応性の制御に基づく機能をもつ分子の化学について、以下の成果を得るとともに、今後の当該分野の発展の礎を得るため成果の総括を図った。

(2-1) ビスアミジン骨格を基盤とする不斉分子触媒を用いて触媒機能の高度化を検討し、不斉ビニロガス向山アルドール反応やヒドロホスホニル化反応におけるエナンチオスイッチング現象、複核 Zn 触媒の不斉エチル化反応における高度な分子認識能の発現を見出した(論 24、学 13,14,16,81,199,211,212,213)。

(2-2) 速度定数の測定値に基づく数値計算法により求めた計算溶出曲線と実測溶出曲線を比較する解析結果の妥当性の計算化学的な確認方法を開発した。また、キャピラリー電気泳動法を利用して会合・解離速度定数を決定する際に、より正確な速度定数を得るための補正法を開発した(論 6,34,35、学 63,140,141,143,147)。

(2-3) 水の酸化反応における O-O 結合形成機構を明らかにした(論 33、学 82,255)。ルテニウム錯体触媒のプロトンと電子の移動の制御によって、水の酸化に対する触媒活性が著しく向上した(学 60,128,131,219,220,221,350)。さらに ラマン分光法等を用い、コバルトポルフィリン錯体の酸素発生触媒反応の律速過程を明らかにした(学 38,62,130,179)。

(2-4) 分子空間の制御が可能なアルキル置換基を開発し、制御法の一般化を行い、種々の高周期典型元素を含む高反応性化学種の合成と分子設計に関する知見を得た(論 7,8、学 26-30,148,149,168,183,184)。

## 3. 物性・機能制御グループ

設計グループとの連携で、物性の制御に基づく機能をもつ分子・材料の化学について、以下の成果を得るとともに、今後の当該分野の発展の礎を得るため成果の総括を図った。

(3-1) Ag(110)上に作成した(1×1)TiO<sub>2</sub> 薄膜の窒素ドーピングを開始した。

(3-2) 中空構造をもつフォトクロミック分子結晶について、X 線構造解析により光誘起変形機構を明らかにし、光誘起物質放出デバイスとしての機能を見出した(論 62,127)。

(3-3) 前年度合成に成功した 8 種類の新規発光性白金錯体、パラジウム錯体のうち結晶水の有無による擬似多形のある 6 種の塩を用いて、結晶構造と発光特性の相関を明らかにした。(学 65,133,187,235)

(3-4) PLA ブレンドの環境(pH、塩濃度)が加水分解挙動にどのような影響を与えるのか詳細な検討を行った。(学 39,173)(特 21)さらに、熱伝導性高分子の研究を進展し、セルロースナノファイバーの一軸配向化によって、伝熱異方性を発揮するナノペーパーを開発した。(論 65、学 47,68,69,90,165,166,181,188,190,268,330)

以上の成果に加え、可視光照射による蛍光性ジアリールエテンの蛍光スイッチング現象を見出し、それを用いた単一波長 STORM 超解像バイオイメージングに成功した(論 49,52)。また、単分子計測の開発を進展させ、それを用いて多重極子発色団の発光挙動が固体環境と液体環境で大きく異なることを見出し、その原因を明らかにした。加えて、発光性銀クラスターと種々の消光剤を用いた消光実験により、クラスター消光剤分子間での電荷移動の速度定数を評価することができた。発光性金銀合金クラスターの発光挙動を、単一分子計測技術を使って評価することにより、クラスター分子からの発光の明滅現象を観測すること

に成功した。

平成 29 年度の成果をまとめて公開シンポジウム(別紙資料 31)を実施し、さらに成果報告書(別紙資料 33)、ニュースレター(別紙資料 30)を刊行して研究の進捗状況を総括するとともに成果の発信を行った。3 月に外部評価委員会による外部評価(別紙資料 34)を受け、それを元にプロジェクト研究の総括を行った。

#### <優れた成果が上がった点>

本プロジェクトの進展により、特に「光に応答する分子」の開発が大きく進展し、入江正浩による“The Porter Medal”の受賞(別紙資料 7)につながった。その他、本プロジェクトで得られた顕著な成果は以下の通りである。なお、受賞等につながった成果については、「14 その他の研究成果等」にまとめた。

設計グループにおいては、非経験的な FMO 計算に基づいて算出した有効相互作用パラメータによって、信頼性の高い粗視化シミュレーションを行う方法論を確立することができた。様々な分子触媒反応の理論的解析によって得られた知見から、相互作用ネットワークによる安定化と立体反発による不安定化の巧みなバランスによって高選択性が発現する分子像を明瞭に示し、合理的触媒設計の指針を確立した。インフルエンザウイルス表面タンパク質 NA のすべての亜型に有効であり、ヒト Neu には不活性な新規抗インフルエンザ薬候補化合物の合理設計に成功した。麻疹ウイルスの分離に用いられる vero 細胞などに光応答性分子を適用し、その有効性を実証できた。

反応制御グループにおいては、設計グループとの連携により、以下に示す数々のブレイクスルーを達成した。不斉分子触媒の中心金属や添加剤に依存したエナンチオスイッチング現象の発見し、特異的な化学選択性を示す分子認識型複核金属触媒を開発した。速度解析法として、従来表面プラズモン法などが開発されていたが、測定対象を基板へ固定化する際に化学構造が変化してしまうという問題があった。そこで、キャピラリー電気泳動法を利用して分子の固定化や蛍光標識化を必要としない実験法を開発した。これは、理論的シミュレーションとの共同で達成されたもので、化学的に非修飾の遊離分子間における本来の相互作用情報の解析を可能にする極めて独創的な成果である。また、高反応選択的な酸素還元触媒を開発し、特許取得に至った。

物性・機能制御グループにおいても、設計グループとの連携により、光に応答する分子の開発や機能性高分子の研究が大きく進展した。新規に構築した6種類もの塩に関して、含水塩結晶と無水塩結晶の疑似多形の関係にある双方について結晶構造解析に成功した。これにより、電子ドナーとアクセプターの組合せが同一で結晶構造のみが異なる塩の組を用いて、結晶構造と発光特性の相関を明らかにできた。機能性高分子の開発に関しては、新規ポリ乳酸/ポリ(リンゴ酸-乳酸)ブレンドは PLA 生来の遅い加水分解速度を飛躍的に加速することを初めて見出し、その分解速度は高次構造(結晶化、配向など)の影響を大きく受けることを明らかにした。また、かねてより断熱素材とみなされてきたセルロースにおいて、プラスチックの3~10倍高い熱伝導性を発見し、伝熱材への転換を世界で初めて可能にした。また、天然セルロースの結晶繊維が伝熱異方性を発揮することを明確に実証し、熱流制御材料を創出した。光に応答する分子の開発に関しては、蛍光性ジアリールエテンを用いた RESOLFT 超解像イメージングに関する研究を進展させ、この成果は極めてクウォリティーの高い学術誌(Angew. Chem. Int. Ed. 2016, 55, 15429)で Very Important Paper および Back Cover に選ばれるなど、国際的に高い評価を得ている。本プロジェクトでは単分子計測の開発にも着手した。この計測法は、まだ発展途上にあるにも関わらず、超分子カプセルを用いた有機色素の光安定性の向上に関する研究成果が、英国王立化学会の Photochemical&Photobiological Sciences 誌の Issue8, 2014 の Front cover に選ばれるなど、すでに顕著な業績を生んでいる。なお、上記の成果の多くは数々の受賞等につながっており、その詳細は「14 その他の研究成果等」にまとめた。

#### <課題となった点>

「設計グループ」においては、方法論の開発・試行錯誤に時間を費やし、かつ実験へのフィードバックを優先したために、研究期間内に当該研究をすべて論文公表するには至らなかったが、いずれも投稿に向けて準備中である。ウイルスベクターの光応答制御を試みたが、分子構造の変化が局所的であったため、光のみによる制御には至っておらず検討を継続中である。

「反応制御グループ」においては、類例のない選択性を示す分子触媒の開発には成功したが、それを応用した多成分連結反応については、その可能性を見出すにとどまった。また、キャピラリー電気泳動法により分子間相互作用や界面透過現象を速度解析する場合には、ピークの分散に対する分子拡散、試料注入量、ジュール熱および検出窓幅等の影響を考慮する必要があることが分かり、これらの補正を行った。また、燃料電池用触媒を指向した酸素還元修飾電極の開発に成功したが、なお耐久性が課題となっている。

「物性・機能制御グループ」においては、ベイポクロミズムの機構解明において、失透しやすい含水塩結晶のうちいくつかについては結晶構造解析が成功しなかったため、別途の物性解析を総合してモデルを提案した。高分子開発において、PLA はガラス転移点(60 °C)以下の温度範囲では加水分解速度が非常に遅く、その生分解性という特性を生かす事が非常に困難であったが、その突破口を見出した。二次元光触媒の開発において、質の良い二酸化チタン薄膜の合成のためには、超高真空槽にかなりの圧力の酸素を導入する必要があり、測定系への悪影響が懸念された。試料準備槽を整備してそこで薄膜調整を行うことにより、測定系への酸素導入の影響を回避した。

#### <自己評価の実施結果と対応状況>

毎年行う学内の全研究員(本学の専任教員)による「成果報告会」、および年度末の運営委員会において自己評価を実施した。その結果、279報の論文、21件の特許出願が出るなど、ほぼ投入した費用に見合った成果が上がっていると判断している。研究成果がさらに最大となるような予算配分についても検討を行い、その結果、平成 27 年度は構造解析の先鋭化が必要との認識に基づいた予算配分を行った。また、「設計」と「合成」の密接な連携をより強化し、さらに広範な分野での計算を実施するためには、設計グループの人的強化が必要と判断し、平成 28 年度から設計グループに 2 名の PD を配置した。

#### <外部(第三者)評価の実施結果と対応状況>

本プロジェクトの外部評価を行うため、永瀬 茂(京都大学・福井謙一記念研究センター・シニアリサーチフェロー)、塩谷光彦(東京大学大学院理学研究科化学専攻・教授)、時任宣博(京都大学化学研究所・所長)の 3 名から成る外部評価委員会を組織し、平成 27 年 3 月に外部評価を実施した。その結果、概ね順調にプロジェクトが進展しているとの評価を得た。その際、各グループの連携をさらに強化するよう指摘があり、高機能触媒としての二核錯体の開発に設計グループがスクリーニングの手法でバックアップするなど、さらに連携を強めるとともに、上記<自己評価>で記した判断のもとに設計グループに PD2 名を配するよう研究費を配分した。

#### <研究期間終了後の展望>

主に設計グループにより本事業で得られた知見に基づき、FMO 計算を基盤とする粗視化シミュレーションをポリマー系、人造脂質系だけでなく、今後はタンパク質や DNA などの生体分子系の設計にも活用を広がっていく。さらに、膨大な計算結果(ビッグデータ)を自動的に解析・解釈する手段に機械学習・深層学習を用いる手法を更に発展させ、複雑系の化学への応用につなげる。超分子構造などの新しい設計指針を導入して、高選択性・分子認識などの触媒機能をさらに先鋭化した分子触媒を開発する。臨床応用可能な化学療法剤・新規低分子抗ウイルス薬とともに、合理的設計による高活性な人工抗体を開発する。

主に反応制御グループにおいて本事業で得られた知見(エナンチオスイッチング現象・高度な基質認識

能)に基づき、分子触媒のさらなる高機能化を検討していく。各種のナノ粒子が関わる相互作用や界面透過現象の速度解析へと適用範囲を拡大する。また、天然の光合成を模倣したプロトンと電子の移動の制御が、水の酸化と酸素還元に対する触媒活性の向上に効果的であることを見出したので、今後は平衡電極電位近辺での高反応速度を示す触媒の開発へ展開する。さらに、本事業による汎用性の高いアルキル置換基の開発は、今後の未知の化学種の創製に繋げることが可能であり、研究基盤の確立と今後の更なる学術的展開につながるものである。

主に物性・機能制御グループにおいて、有機アクセプターの選択によって結晶に多形、疑似多形が現れ、環境に応答した発光物質を得られることが示されたことから、その応答特性などの解明を今後進めれば、これまでとは異なる作用機序による機能を発現する未来分子・物質の開発へと進展することが期待できる。本事業で開発した二次元光触媒の開発の手法は、今後様々な低次元機能材料の創出に応用できる。本事業で開発したPLA多孔質体は再生医療の細胞足場材料として重要であり、今後本事業で創出した熱誘起相分離現象を利用した多孔質体の生成法について、その応用を深めていく。また、本事業で開発を開始した単分子計測は、特に色素増感太陽電池における電荷移動機構の解明を通じて、その高効率化への道を開くものである。また、発光の明滅現象を詳細に解析してその原因の解明を可能とし、それを通じて、今後例えばナノサイエンスの1つの焦点となっている金属クラスターの発光メカニズムの解明につながることを期待できる。

#### <研究成果の副次的効果>

設計グループにおいてFMO計算の大規模化が達成され、それにより複雑系の機能解析、材料設計が進展すると期待される。それに伴い、水溶性光スイッチ蛍光分子の開発が進展すると期待される。これは超高解像顕微鏡の開発につながるるとともに、特にバイオイメージングの革新的進展をもたらすと考えられる。他にも、光による水の完全分解を触媒する錯体や、高機能触媒による多成分連結反応による有用物質の効率的合成法等の開発が進展しており、これらの成果は将来的に技術移転等を通じて社会への大きな貢献が期待される。さらに、膨大な計算結果(ビッグデータ)を自動的に解析・解釈する手段に機械学習・深層学習を用いた先導的事例を示すことができた。これは、ビッグデータの解析が重要となる複雑系の化学の今後の進展に、大きく貢献するものである。

反応制御グループにおいて開発された分子集合体(界面活性剤ミセル等)の界面における物質透過の速度定数測定法は、医療分野での応用が期待されている。酸素発生触媒の開発はグリーンエネルギー開発の鍵となるが、本研究で得たコバルトポルフィリン錯体の酸素発生反応機構に関する知見は、今後のさらなる高活性な触媒分子の重要な設計指針となる。

物性・機能制御グループでは、高機能高分子開発の過程で、生分解性PLAが水圧粉砕法によるシェールガスの採掘に応用可能であり、採掘効率を7倍にも上げることが見出された。その結果、PLAの加水分解速度の自在制御を目指した本研究の応用が飛躍的に広がり、三井化学と共同でアメリカでの実用化を目指して国際特許に出願している。

以上のように、本プロジェクトでは実用化につながる様々な技術、材料が開発され、特許出願が行われている(「14 その他の研究成果等」参照)。

12 キーワード(当該研究内容をよく表していると思われるものを8項目以内で記載してください。)

- |                     |                        |                    |
|---------------------|------------------------|--------------------|
| (1) <u>分子技術</u>     | (2) <u>光スイッチ機能蛍光分子</u> | (3) <u>不斉合成触媒</u>  |
| (4) <u>FMO分子軌道法</u> | (5) <u>光駆動分子アクセプター</u> | (6) <u>水の光分解触媒</u> |
| (7) <u>機能性金属錯体</u>  | (8) <u>バイオプローブ</u>     |                    |

13 研究発表の状況(研究論文等公表状況。印刷中も含む。)

上記、11(4)に記載した研究成果に対応するものには\*を付すこと。

<雑誌論文>

No	査読	著書名	論文表題	雑誌名	発行年	ページ
1.	※	K. Okuwaki, <u>Y. Mochizuki</u> , H. Doi, T. Ozawa,	<u>Fragment Molecular Orbital-based Parameterization Procedure for Mesoscopic Structure Prediction of Polymeric Materials</u> (* 論 1) (DOI:10.1021/acs.jpcc.7b08461)	J. Phys. Chem. B (122)	2018	338-347
2.	※	土居英男, 奥脇弘次, <u>望月祐志</u>	<u>FMO 計算に基づく <math>\chi</math> パラメータ算定 システム FCEWS</u> (* 論 2) (DOI: 10.2477/jccj.2017-0048)	J. Comp. Chem. Jpn.	2018	in press
3.	※	土居英男, 齊藤天菜, 奥脇弘次, 内藤貴充, <u>望月祐志</u>	<u>散逸粒子動力学(DPD)プログラム CAMUS の新規開発と性能評価</u> (* 論 3)	J. Comp. Chem. Jpn. (16)	2018	126-128
4.	※	Kaneko, H., Ikawa, T., Yamamoto, Y., Arulmozhiraja, S., <u>Tokiwa, H.</u> , Akai, S.	3-(Triflyloxy)benzynes Enable the Regiocontrolled Cycloaddition of Cyclic Ureas to Synthesize 1,4-Benzodiazepine Derivatives	SynLett	2018	accepted
5.	※	Kobayashi, K.; Kunimura, R.; Takagi, H.; Hirai, M.; Kogen, H.; Hirota, H. <u>Kuroda, C.</u>	Total Synthesis of Highly Oxygenated Bisabolane Sesquiterpene Isolated from <i>Ligularia lankongensis</i> : Relative and Absolute Configurations of the Natural Product	J. Org. Chem (83)	2018	703-715
6.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; <u>Suzuki, N.</u>	<u>Moment Analysis of Mass Transfer Kinetics in Micellar Electrokinetic Chromatography Systems</u> (* 論 6)	Anal. Sci. (34)	2018	In press
7.	※	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	<u>The Synthesis of a Novel Bulky Primary Alkyl Group and Its Application Toward the Kinetic Stabilization of a Tetraalkyldisilene</u> (* 論 7) (DOI:10.1246/bcsj.20170422)	Bull. Chem. Soc. Jpn.	2018	In press

8.	※	Yukimoto, M.; Nishino, R.; Suzuki, F.; Ishihara, M.; Sugamata, K.; <u>Minoura, M.</u>	<u>Synthesis of a Peripherally Extended Triptycyl Group as an Aliphatic Steric Protection Group and Its Application to the Kinetic Stabilization of an Aliphatic Sulfenic Acid</u> ( * 論 8) (DOI: 10.1246/cl.171230)	Chem. Lett.	2018	In press
9.	※	<u>Irie, M.</u> ; <u>Morimoto, M.</u>	Photoswitchable turn-on mode fluorescent diarylethenes: strategies for controlling the switching response (DOI: 10.1246/bcsj.20170365)	Bull. Chem. Soc. Jpn.	2018	In press
10.	※	<u>Oyama, H. T.</u> ; Nakayama, R.; Takase, K.; Furuta, M.	Drastic Improvement in Thermal Stability of Polymer Alloys by Formation of Daughter Micelles at the Reactive Interface (DOI:10.1016/j.polymer.2017.12.061)	Polymer	2018	In press
11.	※	<u>Niihori Y.</u> ; Shima, D.; Yoshida, K.; Hamada, K.; Nair, L. V.; Hossain, S.; Kurashige, W.; Negishi, Y.;	High-performance Liquid Chromatography Mass Spectrometry of Gold and Alloy Clusters Protected by Hydrophilic Thiolates (DOI: 10.1039/C7NR07840D)	Nanoscale	2018	In press
12.	※	<u>望月祐志,</u> <u>奥沢明</u>	<u>フラグメント分子軌道(FMO)計算の結果の自動解析の試み</u> ( * 論 12)	計算工学 (22)	2017	3539- 3542
13.	※	Doi, H.; Okuwaki, K.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Ozawa, T.; Yasuoka, K.	<u>Dissipative particle dynamics (DPD) simulations with fragment molecular orbital (FMO) based effective parameters for 1-Palmitoyl-2-oleoyl phosphatidyl choline (POPC) membrane</u> ( * 論 13) (DOI: 10.1016/j.cplett.2017.07.032)	Chem. Phys. Lett. (684)	2017	427-432
14.	※	Komeiji, Y.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Fukuzawa, K.</u>	Explicit solvation of a single-stranded DNA, a binding protein, and their complex: a suitable protocol for fragment molecular orbital calculation (DOI: 10.1273/cbij.17.72)	CBI-J, (17)	2017	72-84
15.	※	川田修太郎, 袴田真由,	ベンゼンを基本骨格に持つ正イオン内包ペプチドの理論的計算	J. Comp. Chem. Jpn.	2017	77-79

		<u>望月祐志</u>	(DOI: 10.2477/jccj.2017-0014)	(16)		
16.	※	中野達也, <u>望月祐志</u> , 福澤薫, 沖山佳生, 渡邊千鶴	Bond detached atom (BDA)を共有しているフラグメント間の相互作用エネルギーの補正に関する試み (DOI: 10.2751/jcac.18.143)	J. Comp. Aided Chem. (18)	2017	143-148
17.	※	<u>望月祐志</u> , 坂倉耕太, 秋永宜伸, 加藤幸一郎, 渡邊啓正, 沖山佳生, 中野達也, <u>古明地勇人</u> , 奥沢明, <u>福澤薫</u> , 田中成典	<u>FMO プログラム ABINIT-MP の開発状況と機械学習との連携</u> (* 論 17) (DOI:10.2477/jccj.2017-0051)	J. Comp. Chem. Jpn. (16)	2017	119-122
18.	※	<u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算による新規抗インフルエンザ薬の合理的設計開発(* 論 18)	別冊 Bio Clinica『感染症・ワクチンと慢性炎症』 Vol.6 No.2	2017	148-154
19.	※	Sladek, V.; Kona, J.; <u>Tokiwa, H.</u>	<u>In silico analysis of interaction pattern switching in ligand - receptor binding in Golgi <math>\alpha</math>-mannosidase II induced by inhibitors protonation state</u> (* 論 19) (DOI:10.1039/C7CP01200D)	PhysChem-ChemPhys (19)	2017	12527-12537
20.	※	Konishi, H.; Matsubara, M.; Mori, K.; Tokiwa, T.; Arulmozhiraja, S.; Yamamoto, Y.; Ishikawa, Y.; Hashimoto, H.; Shigeta, Y.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Manabe, K.	<u>Mechanistic Insight into Weak-Base-Catalyzed Generation of Carbon Monoxide from Phenyl Formate and Its Application to Catalytic Carbonylation at Room Temperature without Use of External Carbon Monoxide Gas</u> (* 論 20) (DOI:10.1002/adsc.201700751)	Adv. Synth. Catal. (359)	2017	3592-3601
21.	※	Motoyama, T.; Nakano, S.; Yamamoto, Y.;	<u>Product release mechanism associated with structural changes in monomeric L-threonine</u>	Biochemistry (56)	2017	5758-5770

		<u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y.; Ito, S.	3-dehydrogenase( * 論 21) (DOI:10.1021/acs.biochem.7b00832)			
22.	※	Suzuki, Y.; Iwata, N.; Dobashi, K.; Takashima, R.; Arulmozhiraja, S.; Ishitsubo, E.; Matsuo, N.; <u>Tokiwa, H.</u>	Alkanoylation of Quinazoline by Nucleophilic Aromatic Substitution: Combined Experimental and Computational Study (DOI: 10.1016/j.tet.2017.11.071)	Tetrahedron (74)	2017	392-400
23.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Sakata, K.; Yoshioka, K.; Uraguchi, D.; Ooi, T.	<u>Origin of High Regio-, Diastereo-, and Enantioselectivities in 1,6-Addition of Azlactones to Dienyl N-Acylpyrroles: A Computational Study( * 論 23)</u>	J. Org. Chem. (82)	2017	541-548
24.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Inaba, M.; Gotoh, R.; Ueki, Y.; Matsui, K.	<u>Multinuclear zinc bisamidinate catalyzed asymmetric alkylation of <math>\alpha</math>-ketoesters and its unique chemoselectivity( * 論 24)</u>	Chem. Commun (53)	2017	7513- 7516
25.	※	Iwata, M.; Kamijoh, Y.; Yamamoto, E.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Nagasawa, K.	<u>Total Synthesis of Pyrrole-Imidazole Alkaloid (+)-Cylindradine B( * 論 25)</u>	Org. Lett. (19)	2017	420-423.
26.	※	Tanaka, N.; <u>Tsutsumi, R.</u> ; Uraguchi, D.; Ooi, T.	<i>N</i> -Sulfonyl $\alpha$ -imino ester-derived chiral oxaziridines: catalytic asymmetric synthesis and application as a modular chiral organic oxidant (DOI: 10.1039/c7cc02502e)	Chem. Commun. (53)	2017	6999– 7002
27.	※	Kato, T.; Hirota, H.; <u>Kuroda, C.</u> ; Gong, X.; Ohsaki, A.	New Eremophilane-type Sesquiterpenes from <i>Ligularia cymbulifera</i>	Nat. Prod. Commun. (12)	2017	1165-116 7
28.	※	<u>Kuroda, C.</u> ; Inagaki, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Hanai, R.; Yamada, H.;	Chemical diversity in <i>Ligularia oligonema</i>	Nat. Prod. Commun. (12)	2017	1161- 1164.

		Nagano, H.; Gong, X.				
29.	※	Saito, Y.; Ichihara, M.; Takashima, Y.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Hanai, R.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Chemical Constituents of Hybrids of <i>Ligularia cyathiceps</i> and <i>L. lamarum</i> / <i>L. subspicata</i> Collected in China: Structures of Subspicatin M, N, O1, and O2, and Related Compounds (DOI: 10.1016/j.phytochem.2017.04.015)	Phytochemistry (140)	2017	69-76
30.	※	Saito, Y.; Hidaka, M.; Fukuda, A.; Okamoto, Y.; Nakashima, K.; Tori, M.; Hanai, R.; Gong, X.; Watanabe, E.; <u>Kuroda, C.</u>	Intra-specific diversity of the chemical composition of <i>Ligularia lamarum</i> in the Hengduan Mountains, China: the structures of four new eremophilanes and a new seco-eremophilane (DOI: 10.1016/j.phytol.2017.04.026)	Phytochemistry Letters (20)	2017	139-145
31.	※	Otomo, I.; Watanabe, K.; <u>Kuroda, C.</u> ; Kobayashi, K.	Chain Length of Amphipathic-Type Thioester Dramatically Affects Reactivity in the Aqueous Amidation Reaction with Cysteine Ester (DOI: 10.1055/s-0036-1588519)	SynOpen (1)	2017	59-62
32.	※	<u>Kuroda, C.</u> ; Kobayashi, R.; Nagata, A.; Nakadozono, Y.; Itoh, T.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Hanai, R.; Gong, X.	Terpenoids and Phenylpropanoids in <i>Ligularia duciformis</i> , <i>L. kongkalingensis</i> , <i>L. nelumbifolia</i> , and <i>L. limprichtii</i> (DOI: 10.3390/molecules22122062)	Molecules (22)	2017	2062
33.	※	<u>Wada, T.</u> ; Nishimura, S.; Mochizuki, T.; Ando, T.; Miyazato, Y.	<u>Mechanism of Water Oxidation Catalyzed by a Dinuclear Ruthenium Complex Bridged by Anthraquinone</u> (* 論 33) (DOI:10.3390/catal7020056)	Catalysts (7)	2017	56
34.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; <u>Suzuki, N.</u>	<u>Moment Analysis Theory for Size Exclusion Capillary Electrochromatography with Chemical Reaction of Intermolecular</u>	Anal. Sci. (33)	2017	1147-1154

			Interaction( * 論 34) (DOI: 10.2116/analsci.33.1147)			
35.	※	<u>Suzuki, N.</u> ; <u>Miyabe, K.</u>	<u>Evaluation of Migration Time and Variance for Accurate Kinetic Study Based on Affinity Capillary Electrophoresis( * 論 35)</u> (DOI: 10.1021/acs.analchem.7b02598)	Anal. Chem. (89)	2017	10487-10495.
36.	※	Kawamata, M.; Sugai T.; <u>Minoura, M.</u> ; Maruyama, Y.; Furukawa, K.; Holstrom, C.; Nemykin, V. N.; Nakano, H.; Matano, Y.	Nitrogen-Bridged Metallodiazaporphyrin Dimers: Synergistic Effects of Nitrogen Bridges and meso-Nitrogen Atoms on Structure and Properties (DOI: 10.1002/asia.201700204.)	Chem. Asian J. (12)	2017	816-821
37.	※	Nakada, M.; Kuwabara, T.; Furukawa, S.; Hada, M.; <u>Minoura, M.</u> ; Saito, M.	Synthesis and Reactivity of a Ruthenocene-type Complex Bearing an Aromatic $\pi$ -Ligand with the Heaviest Group 14 Element (DOI: 10.1039/C6SC04843A)	Chem. Sci. (8)	2017	3092-3097
38.	※	Sudoh, K.; Satoh, T.; Amaya, T.; Furukawa, K.; <u>Minoura, M.</u> ; Nakano, H.; Matano, Y.	Syntheses, Properties, and Catalytic Activities of Metal(II) Complexes and Free Bases of Redox-Switchable $20\pi$ , $19\pi$ , and $18\pi$ 5,10,15,20-Tetraaryl-5,15-diazaporphyrinoids (DOI: 10.1002/chem.201703664)	Chem. Eur. J. (23)	2017	16364-16373
39.	※	Saito, M.; Akiba, T.; Furukawa, S.; <u>Minoura, M.</u> ; Hada, M.; Yoshikawa, H. Y.	Anisotropic Crystals Based on a Main-Group Coordination Polymer with Alignment of Rigid $\pi$ Skeletons (DOI: 10.1021/acs.organomet.7b00217)	Organometal lics (36)	2017	2487-2490
40.	※	Guo, S.; <u>Suzuki, N.</u> ; Fujiki, M.	Oligo- and Polyfluorenes Meet Cellulose Alkyl Esters: Retention, Inversion, and Racemization of Circularly Polarized Luminescence (CPL) and Circular Dichroism (CD) via Intermolecular C-H/O=C Interactions	Macromolecules (50)	2017	1778-1789

			(DOI: 10.1021/acs.macromol.6b02762)			
41.	※	Guo, S.; Kamite, H.; <u>Suzuki, N.</u> ; Wang, L.; Ohkubo, A., Fujiki, M.	Ambidextrous Chirality Transfer Capability from Cellulose Tris(phenylcarbamate) to Non-helical Chain-like Luminophores: Achiral Solvent Driven Helix-helix Transition of Oligo- and Polyfluorenes Revealed by Sign Inversion of Circularly Polarized Luminescence (CPL) and Circular Dichroism (CD) Spectra	Biomacromolecules	2017	
42.	※	Tanaka, S.; <u>Nakazono, T.</u> ; Yamauchi, K.; Sakai K.	Photochemical H <sub>2</sub> Evolution Catalyzed by Porphyrin-based Cubic Cages Singly and Doubly Encapsulating PtCl <sub>2</sub> (4,4'-dimethyl-2,2'-bipyridine) (DOI:org/10.1246/cl.170692)	Chem. Lett. (46)	2017	1573- 1575.
43.	※	Takijiri, K.; Morita, K.; <u>Nakazono, T.</u> ; Sakai K.; Ozawa, H.	Highly Stable Chemisorption of Dyes with Pyridyl Anchors over TiO <sub>2</sub> : Application in Dye Sensitized Photoelectrochemical Water Reduction in Aqueous Media	Chem. Commun. (53)	2017	3042- 3045
44.	※	Sugizaki, Y.; Ozawa, K.; <u>Edamoto, K.</u>	<u>Growth of ultrathin titanium oxide films on Ag(110)</u> ( * 論 44) (DOI: 10.7567/JJAP.56.085501)	Jpn. J. Appl. Phys. (56)	2017	085501 1-5.
45.	※	Sugizaki, Y.; Motoyama, H.; <u>Edamoto, K.</u> ; Ozawa, K.	Electronic structure of Fe <sub>2</sub> P(10-10) studied by soft X-ray photoelectron spectroscopy and X-ray absorption spectroscopy (DOI: 10.1016/j.susc.2017.05.010)	Surf. Sci. (664)	2017	50-55.
46.	※	Ichikawa, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	Diastereoselective photocyclization of a photochromic diarylethene having a benzo[ <i>b</i> ]phosphole <i>P</i> -oxide group (DOI: 10.1016/j.dyepig.2016.10.010)	Dyes Pigm. (137)	2017	214-220
47.	※	Arai, Y.; Ito, S.; Fujita, H.; Yoneda, Y.; Kaji, T.; Takei, S.; Kashihara, R.;	One-colour control of activation, excitation and deactivation of a fluorescent diarylethene derivative in super-resolution microscopy (DOI: 10.1039/C6CC10073B)	Chem. Commun. (137)	2017	214-220

		<u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u> ; Miyasaka, H.				
48.	※	Takagi, Y.; <u>Morimoto, M.</u> ; Kashihara, R.; Fujinami, S.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie, M.</u>	Turn-on mode fluorescent diarylethenes: Control of the cycloreversion quantum yield (DOI: 10.1016/j.tet.2017.03.040)	Tetrahedron (73)	2017	4918-4924
49.	※	Roubinet, B.; Weber, M.; Shojaei, H.; Bates, M.; Bossi, M. L.; Belov, V. N.; <u>Irie, M.</u> ; Hell, S. W.	<u>Fluorescent photoswitchable diarylethenes for biolabeling and single-molecule localization microscopies with optical superresolution</u> ( * 論 49) (DOI: 10.1021/jacs.7b00274)	J. Am. Chem. Soc. (139)	2017	6611-6620
50.	※	Sotome, H.; Nagasaka, T.; Une, K.; Okui, C.; Ishibashi, Y.; Kamada, K.; Kobatake, S.; <u>Irie, M.</u> ; Miyasaka, H.	Efficient cycloreversion reaction of a diarylethene derivative in higher excited states attained by off-resonant simultaneous two-photon absorption (DOI: 10.1021/acs.jpcclett.7b01388)	J. Phys. Chem. Lett. (8)	2017	3272-3276
51.	※	<u>Morimoto, M.</u> ; Sumi, T.; <u>Irie, M.</u>	Photoswitchable fluorescent diarylethene derivatives with thiophene 1,1-dioxide groups: Effect of alkyl substituents at the reactive carbons (DOI: 10.3390/ma10091021)	Materials (10)	2017	1021
52.	※	Kashihara, R.; <u>Morimoto, M.</u> ; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie, M.</u>	<u>Fluorescence photoswitching of a diarylethene by irradiation with single-wavelength visible light</u> ( * 論 52) (DOI: 10.1021/jacs.7b10697)	J. Am. Chem. Soc. (139)	2017	16498-16501
53.	※	Sotome, H.; Nagasaka, T.; Une, K.; Morikawa, S.; Katayama, T.;	Cycloreversion reaction of a diarylethene derivative at higher excited states attained by two-color, two-photon femtosecond pulsed excitation	J. Am. Chem. Soc. (139)	2017	17159-17167

		Kobatake, S.; <u>Irie, M.</u> ; Miyasaka, H.	(DOI: 10.1021/jacs.7b09763)			
54.	※	Tanaka, R.; <u>Matsushita, N.</u>	Crystal structure of bis(1-ethylpyridinium) dioxonium hexacyanidoferrate(II) (DOI:10.1107/S2056989017000810)	Acta Crystallogr., Sect. E: Crystallogr. Commun. (E73)	2017	219-222
55.	※	Konno, Y.; <u>Matsushita, N.</u>	Dichlorido( <i>o</i> -phenylenediamine)pall adium(II) (DOI:10.1107/S2414314617001444)	IUCrData (2)	2017	x170144
56.	※	<u>Matsushita, N.</u> ; Noguchi, W.; Tanaka, R.	Potassium tetracyanidoaurate(III) monohydrate: a redetermination (DOI:10.1107/S2414314617003820)	IUCrData (2)	2017	x170382
57.	※	Tanaka, R.; <u>Matsushita, N.</u>	A charge-transfer salt composed of methyl viologen and hexacyanidoferrate(II) (DOI:10.1107/S2053229617007616)	Acta Crystallogr., Sect. C: Struct. Chem. (C73)	2017	476-480
58.	※	Konno, Y.; <u>Matsushita, N.</u>	Crystal structure of dichlorido(1,2-phenylenediamine- $\kappa^2$ <i>N,N'</i> )platinum(II)	Acta Crystallogr., Sect. E: Crystallogr. Commun. (E73)	2017	1009- 1012
59.	※	<u>Matsushita, N.</u> ; Taira, A.; Taoka, Y	A one-dimensional bromide-bridged Pt <sup>II</sup> /Pt <sup>IV</sup> mixed-valence complex with a 2-bromoethanesulfonate counter-ion (DOI:10.1107/S2056989017009598)	Acta Crystallogr., Sect. E: Crystallogr. Commun. (E73)	2017	1108- 1112
60.	※	Ikemoto, K.; Sakamoto, Y.; Tanaka, R.; Ogata, K.; <u>Matsushita, N.</u> ; Nakamura, S.	Unusual Ionic Bond and Solubility Mechanism of Na <sub>n</sub> PQQ ( <i>n</i> = 0–4) Crystals (DOI:10.1021/acs.cgd.7b00324)	<i>Crystal Growth &amp; Design</i> , (17)	2017	4118- 4123
61.	※	Kida, J.; Imato, K.; Goseki, R.; <u>Morimoto, M.</u> ;	Photoregulation of retro-Diels-Alder reaction at the center of polymer chains (DOI: 10.1246/cl.170251)	Chem. Lett. (46)	2017	992-994

		Otsuka, H.				
62.	※	Hatano, E.; <u>Morimoto, M.</u> ; Imai, T.; Hyodo, K.; Fujimoto, A.; Nishimura, R.; Sekine, A.; Yasuda, N.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	<u>Photosalient phenomena that mimic Impatiens are observed in hollow crystals of diarylethene with a perfluorocyclohexene ring</u> ( * 論 62) (DOI: 10.1002/anie.201706684)	Angew. Chem. Int. Ed. (56)	2017	12576-12580
63.	※	Yamaguchi, T.; Nakagawa, T.; Ozeki, T.; Fukuda, M.; <u>Morimoto, M.</u> ; Takami, S.	Thermal decomposition product of 1,2-bis(2-methyl-1-benzofuran-3-yl) perfluorocyclopentene (DOI: 10.1016/j.tetlet.2017.10.017)	Tetrahedron Lett. (58)	2017	4447-4449
64.	※	<u>Oyama, H. T.</u> ; Tanishima, D., Maekawa, S.	<u>Change in thermal transitions and water uptakes of poly(L-lactic acid) blends upon hydrolytic degradation</u> ( * 論 64) (DOI: 10.1016/j.dib.2016.11.088)	Data-in-Brief (10)	2017	377-380
65.	※	<u>Uetani, K.</u> ; Okada, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	<u>In-plane anisotropic thermally conductive nanopapers by drawing bacterial cellulose hydrogels</u> ( * 論 65) (DOI: 10.1021/acsmacrolett.7b00087)	ACS Macro Lett. (6)	2017	345-349
66.	※	<u>Oyama, H. T.</u> ; Tanishima, D.; Ogawa, R.	Biologically safe poly(L-lactic acid) blends with tunable degradation rate: Microstructure, degradation mechanism, and mechanical properties (DOI: 10.1021/acs.biomac.7b00016)	Biomacromolecules (18)	2017	1281-1292.
67.	※	Akutsu, M.; Koyasu, K.; Atobe, J.; Miyajima, K.; <u>Mitsui, M.</u> ; Tsunoyama, H.; Nakajima, A.	Geometric and electronic properties of Si-atom doped Al clusters: Robustness of binary superatoms against charging (DOI: 10.1039/C7CP03409A)	Phys. Chem. Chem. Phys. (19)	2017	20401-20411
68.	※	Harthcock, C.;	Electronic Spectra and Excited-State	J. Chem.	2017	134311

		Zhang, J.; Kong, W.; <u>Mitsui, M.</u> ; Ohshima, Y.	Dynamics of Acridine and Its Hydrated Clusters (DOI: 10.1063/1.4979631).	Phys. (146)		
69.	※	<u>Mitsui, M.</u> ; Unno, A.; Mori, K.	Methodology for Discriminating Between Competitive Photophysical Processes in Photoblinking: Application to the Fluorescence Blinking of Single Dye Molecules Adsorbed on TiO <sub>2</sub> (DOI: 10.1246/cl.170127)	Chem. Lett. (46)	2017	866–869
70.	※	<u>Mitsui, M.</u> ; Fukui, H.; Takahashi, R.; Takakura, Y.; Mizukami, T. .	Single-Molecule Fluorescence Spectroscopy of Perylene Diimide Dyes in a $\gamma$ -Cyclodextrin Film: Manifestation of Photoinduced H-Atom Transfer via Higher Triplet ( $n, \pi^*$ ) Excited States (DOI: 10.1021/acs.jpca.6b11353)	J. Phys. Chem. A (121)	2017	1577-1586
71.	※	Wang, Y.; <u>Uetani, K.</u> ; Liu, S.; Zhang, X.; Wang, Y.; Lu, P.; Wei, T.; Fan, Z.; Shen, J.; Yu, H.; Li, S.; Zhang, Q.; Li, Q.; Fan, J.; Yang, N.; Wang, Q.; Liu, Y.; Cao, J.; Li, J.; Chen, W.	Multifunctional Bionanocomposite Foams with a Chitosan Matrix Reinforced by Nanofibrillated Cellulose (DOI: 10.1002/cnma.201600266)	ChemNano-Mat (3)	2017	98–108
72.	※	Tokuda, K.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Komeiji, Y.</u>	Hydration of ligands of influenza virus neuraminidase studied by the fragment molecular orbital method (Selected Paper) (DOI: 10.1016/j.jmgm.2016.08.004)	J. Mol. Graphics Model. (69)	2016	144-153
73.	※	川田修太郎, 坂口正貴, 米倉伊吹, 奥脇弘次, <u>望月祐志</u> , <u>福澤薫</u>	ペプチド類のフラグメント分子軌道計算 (DOI: 10.2477/jccj.2016-0032)	J. Comp. Chem. Jpn. (15)	2016	51-52

74.	※	<u>望月祐志</u> , 中村昇太, <u>山中正浩</u> , 山田康之, 工藤光子, <u>常盤広明</u> , 川上勝, 北本俊二	化学・生命科学系の理学教育における 3D プリンタの活用事例 (DOI: 10.2477/jccj.2016-0034)	J. Comp. Chem. Jpn. (15)	2016	66-67
75.	※	川田修太郎, <u>望月祐志</u> , 中野克洋	C <sub>5</sub> Ch <sub>5</sub> および C <sub>6</sub> Ch <sub>6</sub> (Ch=S, Se, Te) の分子構造と芳香族性の評価 (DOI: 10.2477/jccj.2016-0042)	J. Comp. Chem. Jpn. (15)	2016	87-91
76.	※	齊藤天菜, <u>望月祐志</u> , 山崎大, 石村和也	Intel Xeon Phi 上での SMASH による並列化 DFT 計算の性能評価 (DOI: 10.2477/jccj.2016-0047)	J. Comp. Chem. Jpn. (15)	2016	92-96.
77.	※	Yamada, H.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Okiyama, Y.; <u>Komeiji, Y.</u>	Fragment molecular orbital (FMO) calculations on DNA by a scaled third-order Moeller-Plesset perturbation (MP2.5) scheme (DOI: 10.1016/j.comptc.2016.12.008)	Comp. Theor. Chem. (1101)	2016	46-54
78.	※	Sriwilaijaroen, N.; Magesh, S.; Imamura, A.; Ando, H.; Ishida, H.; Sakai, M.; Ishitsubo, E.; Hori, T.; Moriya, S.; Ishikawa, T.; Kuwata, K.; Odagiri, T.; Tashiro, M.; Hiramatsu, H.; Tsukamoto, K.; Miyagi, T.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Kiso, M.; Suzuki, Y.	<u>A Novel Potent and Highly Specific Inhibitor against Influenza Viral N1-N9 Neuraminidases: Insight into Neuraminidase-inhibitor Interactions</u> (* 論 78) (DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b01863)	J. Med. Chem. (59)	2016	4563-4577
79.	※	Arulmozhiraja, S.;	<u>Comparative Binding Analysis of Dipeptidyl Peptidase IV (DPP-4)</u>	PLoS One (11)	2016	e0166275

		Matsuo, N.; Ishitsubo, E.; Okazaki, S.; Shimano, H.; <u>Tokiwa, H.</u>	<u>with Antidiabetic Drugs - An Ab Initio Fragment Molecular Orbital Study</u> ( * 論 79) (DOI: 10.1371/journal.pone.0166275)			
80.	※	Nakano, S.; Yasukawa, K.; Tokiwa, T.; Ishikawa, T.; Ishitsubo, E.; Matsuo, N.; Ito, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y.	Origin of Stereoselectivity and Substrate/ligand Recognition in an FAD-Dependent R-Selective Amine Oxidase (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b09328)	J. Phys. Chem. B, (120)	2016	10736-10743
81.	※	Momiyama, N.; Funayama, K.; Noda, H.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akasaka, N.; Ishida, S.; Iwamoto, T.; Terada, M.	<u>Hydrogen Bonds-Enabled Design of a C<sub>1</sub>-Symmetric Chiral Brønsted Acid Catalyst</u> ( * 論 81) (DOI: 10.1021/acscatal.5b02079)	ACS Catalysis (6)	2016	949-956
82.	※	Kato, M.; Yasui, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Nagasawa, K.	Synthesis of (+)- <i>trans</i> -Dihydrolycoricidine by an Organocatalytic Enantioselective Friedel-Crafts Reaction (DOI: 10.1002/ajoc.201500469)	Asian J. Org. Chem. (5)	2016	380-388.
83.	※	Imayoshi, A.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Sato, M.; Yoshida, K.; Furuta, T.; Ueda, Y.; Kawabata, T.	<u>Insights into the Molecular Recognition Process in Organocatalytic Chemoselective Monoacylation of 1,5-Pentanediol</u> ( * 論 83) (DOI:10.1002/adsc.201600010)	Adv. Synth. Catal. (358)	2016	1337-1344
84.	※	Baba, T.; Yamamoto, J.; Hayashi, K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Kawabata, T.; Furuta, T.	<u>Catalytic discrimination between formyl groups in regio- and stereoselective intramolecular crossaldol reactions</u> ( * 論 84) (DOI:10.1039/C5SC04594K)	Chem. Sci. (7)	2016	3791-3797
85.	※	Horiguchi, K.; Yamamoto, E.;	<u>Dynamic Kinetic Resolution Approach for the Asymmetric</u>	Chem. Eur. J. (22)	2016	8078-8083

		Saito, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Synthesis of Tetrahydrobenzodiazepines Using Transfer Hydrogenation by Chiral Phosphoric Acid</u> ( * 論 85) (DOI:10.1002/chem.201601611)			
86.	※	Momiyama, N.; Funayama, K.; Noda, H.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akasaka, N.; Ishida, S.; Iwamoto, T.; Terada, M.	Hydrogen Bonds-Enabled Design of a C <sub>1</sub> -Symmetric Chiral Brønsted Acid Catalyst (DOI: 10.1021/acscatal.5b02079)	ACS Catalysis (6)	2016	949-956
87.	※	Kato, M.; Yasui, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Nagasawa, K.	Synthesis of (+)- <i>trans</i> -Dihydrolycoricidine by an Organocatalytic Enantioselective Friedel-Crafts Reaction (DOI: 10.1002/ajoc.201500469)	Asian J. Org. Chem. (5)	2016	380-388
88.	※	Imayoshi, A.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Sato, M.; Yoshida, K.; Furuta, T.; Ueda, Y.; Kawabata, T.	Insights into the Molecular Recognition Process in Organocatalytic Chemoselective Monoacylation of 1,5-Pentanediol (DOI:10.1002/adsc.201600010)	Adv. Synth. Catal. (358)	2016	1337-1344
89.	※	Baba, T.; Yamamoto, J.; Hayashi, K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Kawabata, T.; Furuta, T.	Catalytic discrimination between formyl groups in regio- and stereoselective intramolecular crossaldol reactions (DOI:10.1039/C5SC04594K)	Chem. Sci. (7)	2016	3791-3797
90.	※	Horiguchi, K.; Yamamoto, E.; Saito, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	Dynamic Kinetic Resolution Approach for the Asymmetric Synthesis of Tetrahydrobenzodiazepines Using Transfer Hydrogenation by Chiral Phosphoric Acid (DOI:10.1002/chem.201601611)	Chem. Eur. J. (22)	2016	8078-8083
91.	※	Momiyama, N.; Tabuse, H.; Noda, H.; <u>Yamanaka, M.</u> ;	<u>Molecular Design of a Chiral Bronsted Acid with Two Different Acidic Sites: Regio-, Diastereo-, and Enantioselective Hetero-Diels Alder</u>	J. Am. Chem. Soc. (138)	2016	11353-11359

		Fujinami, T.; Yamanishi, K.; Izumiseki, A.; Funayama, K.; Egawa, F.; Okada, S.; Adachi, H.; Terada, M..	<u>Reaction of Azopyridinecarboxylate with Amidodienes Catalyzed by Chiral Carboxylic Acid Monophosphoric Acid</u> ( * 論 91)			
92.	※	<u>Kuroda, C.</u> ; Shibayama, C.; Inoue, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Saito, Y.; Hanai, R.; Gong, X.	Chemical Lineages of <i>Ligularia fischeri</i>	Nat. Prod. Commun. (11)	2016	139-143
93.	※	Okamoto, Y.; Taniguchi, M.; Terada, K.; Nakashima, K.; Gong, X.; Hanai, R.; Tori, M.; <u>Kuroda, C.</u>	Diversity in Chemical Constituents of <i>Ligularia longihastata</i> Collected in China	Nat. Prod. Commun. (11)	2016	145-148
94.	※	Okamoto, Y.; Taniguchi, M.; Nakashima, K.; Gong, X.; Hanai, R.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Chemical Constituents of <i>Ligularia wilsoniana</i> Collected in Chongqing, China	Nat. Prod. Commun. (11)	2016	149-152
95.	※	Tsukada, H.; Kawabe, H.; Ohtaka, A.; Saito, Y.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Kagechika, H.; Hirota, H.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Ohsaki, A.	Two New Diterpenoids from <i>Salvia przewarskii</i>	Nat. Prod. Commun. (11)	2016	159-161
96.	※	Saito, Y.; Takashima, Y.;	Three New Eremophilanes from <i>Ligularia</i> Hybrid Collected in China	Nat. Prod. Commun.	2016	901-904

		Okamoto, Y.; Gong, X.; Hanai, R.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, C.		(11)		
97.	※	Hanai, R.; Tanabe, S.; Aoyama, N.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Zhang, N., Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Chemical and Genetic Study of two <i>Ligularia</i> Hybrids in Shangrila County, Yunnan Province, China	Nat. Prod. Commun. (11)	2016	1057- 1060
98.	※	Shimizu, A.; Hanai, R.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Yu, J.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Chemical Constituents in Hybrids of <i>Ligularia tongolensis</i> and <i>L.</i> <i>cymbulifera</i> : Chemical Introgression in <i>L. tongolensis</i> (DOI: 10.1002/cbdv.201500227)	Chem. Biodiversity (13)	2016	837-844.
99.	※	Ishizuka, T.; Watanabe, A.; Kotani, H.; Hong, D.; Satonaka, K.; <u>Wada, T.</u> ; Shiota, Y.; Yoshizawa, K.; Ohara, K.; Yamaguchi, K.; Kato, K.; Fukuzumi, S.; Kojima, T.	Homogeneous Photocatalytic Water Oxidation with a Dinuclear CoIII–Pyridylmethylamine Complex (DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b02336)	Inorg. Chem. (55)	2016	1154– 1164
100.	※	Miyazato, Y.; <u>Wada, T.</u> ; Ohba, M.; <u>Matsushita, N.</u>	<u>Synthesis and Characterization of an Ru<sub>2</sub>(III, IV) Complex Containing Pyrophosphate Bridge( * 論 100)</u> (DOI: 10.1246/cl.160721).	Chem. Lett. (45)	2016	1388- 1390
101.	※	<u>Wada, T.</u> ; Hiraide, T.; Miyazato, Y.	<u>Water Oxidation Catalyzed by a Ruthenium Complex with an Ru-C bond( * 論 101)</u> (DOI:10.1002/slct.201600716)	Chem. Select (1)	2016	3045- 3048
102.	※	Miyazato, Y.; Asato, E.;	Synthesis and Characterization of a Di- $\mu$ -oxalato Tetracopper(II)	Bull. Chem. Soc. Jpn.	2016	430–436

		Ohba, M.; <u>Wada, T.</u>	Complex with Tetranucleating Macrocyclic Ligand (DOI:10.1246/bcsj.20150338)	(89)		
103.	※	<u>Miyabe, K.</u>	Moment Theory for Kinetic Study of Chromatography (DOI: 10.1016/j.trac.2016.01.003)	Trends in Anal. Chem. (81)	2016	79-86
104.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; <u>Suzuki, N.</u>	<u>Moment Analysis Theory for Kinetic Study of Intermolecular Interaction by Affinity Capillary Electrophoresis</u> ( * 論 104) (DOI: 10.1246/bcsj.20160068)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (89)	2016	746-753
105.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; <u>Suzuki, N.</u>	<u>Kinetic Study of Solute Permeation across Surfactant Micelle/Bulk Solvent Interface by Moment Analysis - Chromatographic Capillary Electrophoresis (MA-CCE)</u> ( * 論 105) (DOI: 10.1246/bcsj.20160185)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (89)	2016	1212- 1218.
106.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; <u>Suzuki, N.</u> ; Shimazaki, Y.	<u>Determination of Association and Dissociation Rate Constants in Inclusion Complex System between Thymol and Sulfated-<math>\beta</math>-cyclodextrin by Moment Analysis - Affinity Capillary Electrophoresis</u> ( * 論 106) (DOI: 10.1246/bcsj.20160193)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (89)	2016	1219- 1224.
107.	※	Satoh T.; Matano Y.; <u>Minoura M.</u> ; Nakano H.; Furukawa K.	Redox-Switchable $20\pi$ -, $19\pi$ -, and $18\pi$ -Electron 5,10,15,20-Tetraaryl-5,15-diazaporph hyrin -oid Nickel(II) Complexes (DOI: 10.1002/anie.201510734)	Angew. Chem. Int. Ed. (55)	2016	2235- 2238
108.	※	Murai, T.; Maekawa, Y. ; Hirai, Y. ; Kuwabara, K. ; <u>Minoura, M.</u>	Phosphonoselenoic acid esters from the reaction between phosphoroselenoyl chlorides and Grignard reagents: synthetic and stereochemical aspects (DOI: 10.1039/C6RA00318D)	RSC Adv. (6)	2016	15180- 15183
109.	※	Yamaki, Y.; Nakamura, T.; Suzuki, S.; Yamamura, M.; <u>Minoura, M.</u> ; Nabeshima, T.	A Self-Assembled Rectangular Host with Terpyridine-Platinum(II) Moieties That Binds Unsubstituted Pentacene in Solution (DOI: 10.1002/ejoc.201600058)	Eur. J. Org. Chem. (9)	2016	1678- 1683

110.	※	<u>Suzuki, N.</u> ; Matsuda, T.; Nagai, T.; Yamazaki, K.; Fujiki, M.	Investigation of the intra-CH/ $\pi$ interaction in dibromo-9,9'-di-alkylfluorenes (DOI: 10.1021/acs.cgd.6b01290)	Cryst. Growth Des. (16)	2016	6593–6599
111.	※	Nakabayashi, K.; Kitamura, S.; <u>Suzuki, N.</u> ; Guo, S.; Fujiki, M.; Imai, Y.	Non-Classically Controlled Signs in a Circularly Polarised Luminescent Molecular Puppet: The Importance of the Wire Structure Connecting Binaphthyl and Two Pyrenes	Eur. J. Org. Chem. (2016)	2016	64-69
112.	※	Ozawa, K.; Suzuki, M.; Tochikubo, R.; Kato, H.; Sugizaki, Y.; <u>Edamoto, K.</u> Mase, K.	Electron-donor dye molecule on ZnO(10-10), (0001), and (000-1) studied by photoelectron spectroscopy and X-ray absorption spectroscopy (DOI: 10.102/acs.jpcc.6b00454)	J. Phys. Chem. C (120)	2016	8653-8662
113.	※	Nakamura, T.; Sugizaki, Y.; Ishida, S.; <u>Edamoto, K.</u> ; Ozawa, K.	Growth of ultrathin vanadium oxide films on Ag(100) (DOI: 10.7567/JJAP.55.075501)	Jpn. J. Appl. Phys. (55)	2016	075501 1-5
114.	※	Ichikawa, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie, M.</u>	Photochromism of diarylethene derivatives having benzophosphole and benzothiophene groups (DOI: 10.1016/j.dyepig.2015.11.023)	Dyes Pigm. (126)	2016	186-193
115.	※	Nakai, H.; Matsuba, K.; Akimoto, M.; Nozaki, T.; Matsumoto, T.; Isobe, K.; <u>Irie, M.</u> ; Ogo, S.	Photoinduced bending of rod-like millimetre-size crystals of a rhodium dithionite complex with n-pentyl moieties (DOI: 10.1039/C6CC00059B)	Chem. Commun. (52)	2016	4349-4352
116.	※	Ishibashi, Y.; Umesato, T.; Fujiwara, M.; Une, K.; Yoneda, Y.; Sotome, H.	Solvent Polarity Dependence of Photochromic Reactions of a Diarylethene Derivative As Revealed by Steady-State and Transient Spectroscopies (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b08504)	J. Phys. Chem. C (120)	2016	1170-1177

		Katayama, T.; Kobatake, S.; Asahi, T.; <u>Irie, M.</u> ; Miyasaka, H.			
117.	※	Fetoh, A.; Cosquer, G.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u> ; El-Gammal, O.; El-Reash, G. A.; Breedlove, B. K.; Yamashita, M.	Photo-activation of single molecule magnet behavior in a manganese-based complex (DOI: 10.1038/srep23785)	Sci. Rep. (6)	2016 23785
118.	※	Yatoo, M. A.; Cosquer, G.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u> ; Breedlove, B. K.; Yamashita, M.	1D chains of lanthanoid ions and a dithienylethene ligand showing slow relaxation of the magnetization (DOI: 10.3390/magnetochemistry2020021)	Magneto-Chemistry (2)	2016 21
119.	※	Bälter, M.; Li, S.; Morimoto, M.; Tang, S.; Hernando, J.; Guirado, G.; <u>Irie, M.</u> ; Raymo, F. M.; Andréasson, J.	Emission color tuning and white-light generation based on photochromic control of energy transfer reactions in polymer micelles (DOI: 10.1039/C6SC01623E)	Chem. Sci. (7)	2016 5867-5871
120.	※	<u>Morimoto, M.</u> ; Kashihara, R.; Mutoh, K.; Kobayashi, Y.; Abe, J.; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie, M.</u>	Turn-on mode fluorescence photoswitching of diarylethene single crystals (DOI: 10.1039/C6CE00725B)	CrystEng-Comm. (18)	2016 7241-7248
121.	※	Roubinet, B.; Bossi, M. L.; Alt, P.; Leutenegger, M.; Shojaei, H.; Schnorrenberg,	<u>Carboxylated photoswitchable diarylethenes for biolabeling and super-resolution RESOLFT microscopy</u> (* 論 121) (DOI: 10.1002/anie.201607940)	Angew. Chem. Int. Ed. (55)	2016 15429-15433

		S.; Nizamov, S.; <u>Irie, M.</u> ; Belov, V. N.; Hell, S. W.			
122.	※	Nakai, H.; Matsuda, K.; Akimoto, M.; Nozaki, T.; Matsumoto, T.; Isobe, K.; <u>Irie, M.</u> ; Ogo, S.	Photoinduced bending of a rod-like millimetre-size crystals of a rhodium dithionite complex with <i>n</i> -pentul moieties (DOI: 10.1039/c6cc00059b)	Chem. Commun (52)	2016 4349-4352
123.	※	Ishibashi, Y.; Umemoto, T.; Fujiwara, M.; Une, K.; Yoneda, Y.; Sotome, H.; Katayama, T.; Kobatake, S.; Asahi, T.; <u>Irie, M.</u> ; Miyasaka, H.	Solvent polarity dependence of photochromic reactions of a diarylethene derivative as revealed by steady-state and transient spectroscopies (DOI: 10.1021/acs.jpcc5b.08504)	J. Phys. Chem. C. (120)	2016 1170-1177
124.	※	Fetoh, A.; Cosquer, G.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u> ; El-Reash, G.A.; Breedlove, B.K.; Yamashita, M.	Photoactivation of single-molecule magnets behavior in a manganese-based complex (DOI: 10.1038/srep23785)	Scientific Reports (6)	2016 Article 23785.
125.	※	森本正和, <u>入江正浩</u>	光駆動分子結晶アクチュエーター：分子マシンをめざす1つの試み (DOI: 10.5059/yukigoseikyokaiishi.74.1217)	有機合成-化学協会誌 (74)	2016 1217-1224
126.	※	Takase, K.; Hyodo, K.; <u>Morimoto, M.</u> ; Kojima, Y.; Mayama, H.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	Photoinduced reversible formation of a superhydrophilic surface by crystal growth of diarylethene (DOI: 10.1039/C6CC01638C)	Chem. Commun. (52)	2016 6885-6887

127.	※	Hatano, E.; <u>Morimoto, M.</u> ; Hyodo, K.; Yasuda, N.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	<u>Photosalient effect of a diarylethene with a perfluorocyclohexene ring</u> ( * 論 127) (DOI: 10.1002/chem.201603020)	Chem. Eur. J. (22)	2016	12680- 12683
128.	※	Fujinaga, N.; Nishikawa, N.; Nishimura, R.; Hyodo, K.; Yamazoe, S.; Kojima, Y.; Yamamoto, K.; Tsujioka, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	Photoinduced topographical changes on microcrystalline surfaces of diarylethenes (DOI: 10.1039/C6CE00718J)	CrystEng- Comm (18)	2016	7229- 7235
129.	※	<u>Uetani, K.</u> ; Okada, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Thermally Conductive and Optically Transparent Flexible Films with Surface-Exposed Nanocellulose Skeletons (DOI: 10.1039/C6TC03318K)	J. Mater. Chem. C (4)	2016	9697- 9703
130.	※	<u>Oyama, H. T.</u> ; Tanishima, D., Maekawa, S.	<u>Poly(malic acid-co-L-lactide) as a superb degradation accelerator for poly(L-lactic acid) at physiological conditions</u> ( * 論 130) (DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2016.10.016)	Polym. Degrad. Stabil. (134)	2016	265-271
131.	※	<u>Mitsui, M.</u> ; Higashi, K.; Hirumi, Y.; Kobayashi, K.	Effects of Supramolecular Encapsulation on Photophysics and Photostability of a 9,10-Bis(arylethynyl)anthracene-Based Chromophore Revealed by Single-Molecule Fluorescence Spectroscopy (DOI: 10.1021/acs.jpca.6b08734)	J. Phys. Chem. A (120)	2016	8317- 8325
132.	※	Takaki, Y.; Ozawa, R.; Kajitani, T.;	Synthesis and Self-assembly of Cyclic 2,7-Anthrylene Ethynylene 1,3-Phenylene Ethynylene Trimer	Chem. Eur. J. (22)	2016	16760- 16764

		Fukushima, T.; <u>Mitsui, M.</u> ; Kobayashi, K.	with a Planar Conformation (DOI: 10.1002/chem.201603627)			
133.	※	<u>Mitsui, M.</u> ; Unno, A.; Azechi, S.	Understanding Photoinduced Charge Transfer Dynamics of Single Perylenediimide Dyes in a Polymer Matrix by Bin-time Dependence of Their Fluorescence Blinking Statistics	J. Phys. Chem. C (120)	2016	15070- 15081
134.	※	Chen, W.; Zhang, Q.; <u>Uetani, K.</u> ; Li, Q.; Lu, P.; Cao, J.; Wang, Q.; Liu, Y.; Li, J.; Quan, Z.; Zhang, Y.; Wang, S.; Meng, Z.; Yu, H.	Sustainable Carbon Aerogels Derived from Nanofibrillated Cellulose as High-performance Absorption Materials (DOI: 10.1002/admi.201600004) (* 論 134)	Adv. Mater. Interfaces	2016	1600004
135.	※	坂口正貴, <u>望月祐志</u> , 渡邊千鶴, <u>福澤薫</u>	赤色蛍光タンパク質 DsRed の色 素部周辺における水分子ならびに 隣接アミノ酸残基の構造の励起エ ネルギーへの影響評価 (DOI:10.2477/jccj.2015-0033)	J. Comp. Chem. Jpn. (14)	2015	155-163
136.	※	<u>Wada, T.</u> ; Enami, K.; Kojima, R.; Okada, T.; Ishikawa, Y.; Miyazato, Y.; <u>Horn, E.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	<u>Reversible structural change</u> <u>accompanying two-electron redox</u> <u>reaction of Pt(tacn) (tacn=</u> <u>1,4,7-triazacyclononane)</u> <u>complexes</u> (* 論 136)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (88)	2015	1230- 1237
137.	※	Kato, K.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	Modeling of hydroxyapatite-peptide interaction based on fragment molecular orbital method (DOI:10.1016/j.cplett.2015.03.057)	Chem. Phys. Lett. (629)	2015	58-64
138.	※	Fujiwara, T.; Mori, H.; <u>Komeiji, Y.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	Fragment molecular orbital-based molecular dynamics study on hydrated Ln(III) ions (DOI:10.7566/JPSCP.5.011001)	JPS-Conf. Ser. (5)	2015	011001- 1-8
139.	※	Ando, H.;	Hydration effects on	Mol. Phys.	2015	319-326

		Shigeta, Y.; Baba, T.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Nakano, M.	enzyme-substrate complex of nylon oligomer hydrolase: inter-fragment interaction energy study by the fragment molecular orbital method (DOI:10.1080/00268976.2014.941311)	(113)		
140.	※	<u>Fukuzawa, K.</u> ; Kurisaki, I.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Tanaka, S.; <u>Komeiji, Y.</u>	Explicit solvation modulates intra- and inter-molecular interactions within DNA: electronic aspects revealed by the ab initio fragment molecular orbital (FMO) method (DOI: 10.1016/j.comptc.2014.11.020)	Comput. Theor. Chem. (1054)	2015	29-37
141.	※	Watarai, Y.; Ishizawa, M.; Ikura, T.; Zacconi, FC; Uno, S.; Ito, N.; Mourino, A.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Makishima, M.; Yamada, S.	Synthesis, Biological Activities and X-ray Crystal Structural Analysis of 25-Hydroxy-25(or 26)-adamantyl-17-[20(22),23-diynyl]-21-norvitamin D Compounds (DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00792)	J. Med. Chem. 58(24)	2015	9510-9521
142.	※	Suhara, Y.; Hirota, Y.; Hanada, N.; Nishina, S.; Eguchi, S.; Sakane, R.; Nakagawa, K.; Wada, A.; Takahashi, K.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Okan T.;	Synthetic Small Molecules Derived from Natural Vitamin K Homologues that Induce Selective Neuronal Differentiation of Neuronal Progenitor Cells (DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b00999)	J. Med. Chem. 58(17)	2015	9510-9521
143.	※	Nakano, S.; Okazaki, S.; Ishitsubo, E.; Kawahara, N.; Komeda, H.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y.	Structural and computational analysis of peptide recognition mechanism of class-C type penicillin binding protein, alkaline D-peptidase from Bacillus cereus DF4-B (DOI: 10.1038/srep13836)	Sci. Rep. (5)	2015	13836

144.	※	<u>Tokiwa, H.</u>	Possibility of New Medicinal Chemistry Based on "Wet-Dry" Interfaced Pharmaceutical Category (DOI: 10.1248/yakushi.15-00175-F)	Yakugakuzas shi 135(9)	2015	1001- 1002
145.	※	Onoda, K.; Sawada, H.; Morita, D.; Fujii, K.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Kuroda, T.; Miyachi, H.	Anti-MRSA activity of isoplagiochin-type macrocyclic bis(bibenzyl)s is mediated through cell membrane damage (DOI:10.1016/j.bmc.2015.04.047)	Bio. Med. Chem. 23(13)	2015	3309- 3316
146.	※	Fukushima, K.; Takahashi, T.; Ueyama, H.; Takaguchi, M.; Ito, S.; Oishi, K.; Minami, A.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Takimoto, T.; Suzuki.; T.	Amino acid substitutions contributing to $\alpha$ 2,6-sialic acid linkage binding specificity of human parainfluenza virus type 3 hemagglutinin-neuraminidase (DOI: 10.1016/j.febslet.2015.03.036)	FEBS Lett. 589(11)	2015	1278- 1282
147.	※	Kawata, K.; Morishita, K.; Yamada, S.; Nakayama, M.; Kobayashi, T.; Furusawa, Y.; Arimoto- Kobayashi, S.; Oohashi, T.; Makishima, M.; Naitou, H.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Tai, A.; Kakuta, K.	RXR Partial Agonist Produced by Side-Chain Repositioning of Alkoxy RXR Full Agonist Retains Anti-type 2 Diabetes Activity without the Adverse Effects (DOI: 10.1021/jm501863r)	J. Med. Chem. 58(2)	2015	912-926
148.	※	Odagi, M.; Furukori, K.; Yamamoto, Y.; Sato, M.; Iida, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ;	<u>Origin of Stereocontrol in Guanidine-Bisurea Bifunctional Organocatalyst That Promotes <math>\alpha</math>-Hydroxylation of Tetralone-Derived <math>\beta</math>-Ketoesters: Asymmetric Synthesis of <math>\beta</math>- and</u>	J. Am. Chem. Soc. (137)	2015	1909- 1915

		Nagasawa, K.	<u><math>\gamma</math>-Substituted Tetralone Derivatives via Organocatalytic Oxidative Kinetic Resolution</u> (* 論 148) (DOI: 10.1021/ja511149y)			
149.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Yoshida, U.; Sato, M.; Shigeta, T.; Yoshida, K.; Furuta, T.; Kawabata, T.	<u>Origin of High <i>E</i>-Selectivity in 4-Pyrrolidinopyridine-Catalyzed Tetrasubstituted <math>\alpha,\alpha'</math>-Alkenediol: A Computational and Experimental Study</u> (* 論 149) (DOI: 10.1021/jo5029453)	J. Org. Chem. (80)	2015	3075-3082
150.	※	Zhu, C.; Saito, K.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	Benzothiazoline: Versatile Hydrogen Donor for Organocatalytic Transfer Hydrogenation (DOI: 10.1021/ar500414x)	Acc. Chem. Res. (48)	2015	388-398
151.	※	Arai, T.; Ogawa, H.; Awata, A.; Sato, M.; Watabe, M.; <u>Yamanaka, M.</u>	PyBidine-Cu(OTf) <sub>2</sub> -Catalyzed Asymmetric [3+2] Cycloaddition with Imino Esters: Harmony of Cu-Lewis Acid and Imidazolidine-NH Hydrogen Bonding in Concerto Catalysis (DOI: 10.1002/anie.201410782)	Angew. Chem. Int. Ed. (54)	2015	1595-1599
152.	※	Odagi, M.; Takayama, K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Nagasawa, K.	Development of Guanidine-Bisurea Bifunctional Organocatalysts with a Chiral Pyrrolidine Moiety and Application to $\alpha$ -Hydroxylation of Tetralone-Derived $\beta$ -Keto Esters (DOI: 10.3390/molecules200712590)	Molecules (20)	2015	12590-12598
153.	※	Arai, T.; Watanabe, O.; Yabe, S.; <u>Yamanaka, M.</u>	Catalytic Asymmetric Iodocyclization of <i>N</i> -Tosyl Alkenamides using Aminoiminophenoxy Copper Carboxylate: A Concise Synthesis of Chiral 8-Oxa-6-Azabicyclo[3.2.1]octanes (DOI: 10.1002/anie.201505748)	Angew. Chem. Int. Ed. (54)	2015	12767-12771
154.	※	Kato, M.; Hirao, S.; Nakano, K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Sohtome, Y.;	Entropy-Driven 1,2-Type Friedel-Crafts Reaction of Phenols with <i>N</i> - <i>tert</i> -Butoxycarbonyl Aldimines (DOI: 10.1002/chem.201503280.)	Chem. Eur. J. (21)	2015	18606-18612

		Nagasawa, K.				
155.	※	Shimizu, A.; Inoue, K.; Ichihara, M.; Hanai, R.; Saito, Y.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Chemotypes of <i>Ligularia vellerea</i> , its hybrids, and <i>L. melanothyrsa</i>	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	9-12
156.	※	Shirai, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Kawahara, T.; Gong, X.; Noyama, T.; Watanabe, E.; <u>Kuroda, C.</u>	Diversity in the Flavonoid Composition of <i>Stellera chamaejasme</i> in the Hengduan Mountains	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	53-56
157.	※	<u>Kuroda, C.</u> ; Inagaki, K.; Chao, X.; Inoue, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; Hanai, R.	<u>Chemical and Genetic Diversity of <i>Ligularia hodgsonii</i> in China</u> ( * 論 157)	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	823-826
158.	※	Taniguchi, M.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Constituents of <i>Ligularia brassicoides</i> Collected in China: A New Diels-Alder Adduct of Eremophilan-10 $\beta$ -ol and Methacrylic Acid	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	827-830
159.	※	Saito, Y.; Otsubo, T.; Iwamoto, Y.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Four New Sesquiterpenoids from <i>Ligularia subspicata</i> Collected in China; Isolation of a Bakkane-type Lactone, an Eremophilane-type Lactone, and Two Ortho Esters	Nat. Prod. Commun. (10)	2015	831-833
160.	※	Otomo, I.; <u>Kuroda, C.</u>	Effect of the Position of Reaction-site in Amphipathic-Type Thioester in Aqueous Amidation	Adv. Chem. Eng. Sci. (5)	2015	311-316

			Reaction (DOI: org/10.4236/aces.2015.53032)			
161.	※	Hirai, M.; Miyazaki, R.; Mitsui, K.; Kiuchi, K.; Onuki, H.; Hirota, H.; <u>Kuroda, C.</u>	<u>Synthesis and NMR Spectroscopic Elucidation of Four Diastereoisomers of Oxygenated Bisabolane Side Chain( * 論 161)</u> (DOI: 10.1002/hlca.201400395)	Helv. Chim. Acta (98)	2015	1035- 1060
162.	※	Saito, Y.; Iga, S.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Terpenoids from <i>Ligularia virgaurea</i> collected in China: the first example of two bakkane derivative with an anhydride-type ring C and nineteen new chemical constituents (DOI: 10.1016/j.tet.2015.09.011)	Tetrahedron (71)	2015	8428- 8435
163.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Kamiya, S.	<u>Kinetic Study of Intermolecular Interaction between 2-Phenoxypropionic Acid and β-Bromo-cyclodextrin Affixed on Stationary Phase by Liquid Chromatography( * 論 163)</u>	Anal. Sci. (31)	2015	743-749
164.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Takahashi, R.; Shimazaki, Y.	Kinetic Study of Interaction between Solute Molecule and Surfactant Micelle (DOI: 10.2116/analsci.31.1019)	Anal. Sci. (31)	2015	1019- 1025
165.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Shimazaki, Y.	Moment Analysis of Affinity kinetics in Inclusion Complex System between Thymol and Sulfated-β-cyclodextrin by Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE) (DOI: 10.1246/bcsj.20150203)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (88)	2015	1603- 1611
166.	※	Saito, M.; Nakada, M.; Kuwabara, T.; <u>Minoura, M.</u>	A reversible two-electron redox system involving a divalent lead species (DOI: 10.1039/C4CC09856K)	Chem. Commun. (51)	2015	4674- 4676
167.	※	Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.; <u>Edamoto, K.</u> ; Matsunami, M.;	Electronic structure of Ni <sub>2</sub> P(0001) studied by resonant photoelectron spectroscopy (DOI: 10.1380/ejssnt.2015.93)	e-J. Surf. Sci. Nanotech. (13)	2015	93-98

		Hajiri, T.; Kimura, S.				
168.	※	Sumi, T.; Kaburagi, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; Une, K.; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie, M.</u>	<u>Fluorescent photochromic diarylethene that turns on with visible light</u> (DOI: 10.1021/acs.orglett.5b02361)	Org. Lett. (17)	2015	4802-4805
169.	※	Ohshima, S.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	<u>Light-driven bending of diarylethene mixed crystals</u> (* 論文 169) (DOI: 10.1039/C5SC01994J)	Chem. Sci. (6)	2015	5746-5752
170.		Cosquer, G.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u> ; Fetoh, A.; Breedlove, B. K.; Yamashita, M.	Photo-control of the magnetic properties of Dy(III) and Ho(III) homometal coordination polymers bridged by a diarylethene ligand (DOI: 10.1039/C4DT03093A)	Dalton Trans. (44)	2015	5996-6002
171.		Wu, T.; Johnsen, B.; Qin, Z.; <u>Morimoto, M.</u> ; Baillie, D.; <u>Irie, M.</u> ; Branda, N. R	Two-colour fluorescent imaging in organisms using self-assembled nano-systems of upconverting nanoparticles and molecular switches (DOI: 10.1039/C5NR03058G)	Nanoscale (7)	2015	11263-11266
172.		<u>Irie, M.</u>	Discovery and development of photochromic diarylethenes (DOI: 10.1515/pac-2015-0208)	Pure Appl. Chem. (87)	2015	617-626.
173.	※	<u>Matsushita, N.</u>	Redetermination of the crystal structure of <i>catena</i> -poly[[[bis(ethylenediamine)-platinum(II)]- $\mu$ -iodido-[bis(ethylenediamine)platinum(IV)]- $\mu$ -iodido] tetrakis(octane-1-sulfonate) dihydrate] (DOI: 10.1107/S2056989015016801)	Acta Cryst. Sect. E (E72)	2015	1155-1158

174.	※	<u>Matsushita, N.</u> ; Taira, A.	“A one-dimensional chloride-bridged Pt <sup>II</sup> /Pt <sup>IV</sup> mixed-valence complex with a 4-[(4-hydroxyphenyl)diaz-en-yl]benzenesulfonate counter-ion (DOI: 10.1107/S2053229615019877)	Acta Cryst. Sect. C (C72)	2015	1033-1036
175.	※	Kodama, R.; Sumaru, K.; Morishita, K.; Kanamori, T.; Hyodo, K.; Kamitanaka, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	A diarylethene as the SO <sub>2</sub> gas generator upon UV irradiation (DOI: 10.1039/C4CC07790C)	Chem. Commun. (51)	2015	1736-1738
176.	※	Uetani, K.; Okada, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Thermal conductive properties of nonwoven nanocellulose sheets (DOI: 10.1021/acs.biomac.5b00617)	Biomacromolecules (16)	2015	535-549
177.	※	<u>Oyama, H. T.</u> ; Abe, S.	Stereocomplex poly(lactic acid) alloys with superb heat resistance and toughness (DOI: 10.1021/acssuschemeng.5b00832)	ACS Sustainable Chem. Eng. (3)	2015	3245-3252
178.	※	Uetani, K.; Okada, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	<u>Crystallite Size Effect on Thermal Conductive Properties of Nonwoven Nanocellulose Sheets</u> ( * 論 178) (DOI: 10.1021/acs.biomac.5b00617)	Biomacromolecules (16)	2015	2220-2227
179.	※	<u>Mitsui, M.</u> ; Kawano, Y.; Mori, K.; Wakabayashi, N.	Correlations between photovoltaic characteristics, adsorption number, and regeneration kinetics in dye-sensitized solar cells revealed by scanning photocurrent microscopy (DOI: 10.1021/acs.langmuir.5b01581)	Langmuir (31)	2015	7158-7165
180.	※	Yamamoto, J.; <u>Mochizuki, Y.</u>	Optimal damping algorithm for unrestricted Hartree-Fock calculations (DOI: 10.1273/cbij.14.14)	Chem-Bio Informatics J. (14)	2014	14-33
181.	※	Kato, Y.; Fujiwara, T.; <u>Komeiji, Y.</u> ;	Fragment molecular orbital-based molecular dynamics (FMO-MD) simulations on hydrated Cu(II) ion	Chem-Bio Informatics J.	2014	1-13

		Nakano, T.; Mori, H.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u>	(DOI: 10.1273/cbij.14.1)	(14)		
182.	※	Anzaki, S.; Watanabe, C.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Tanaka, S.	Interaction energy analysis on specific binding of influenza virus hemagglutinin to avian and human sialosaccharide receptors: Importance of mutation-induced structural change (DOI: 10.1016/j.jmgm.2014.07.004)	J. Mol. Graph. Model. (53)	2014	48-58
183.	※	Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Komeiji, Y.</u> ; Okiyama, Y.; <u>Fukuzawa, K.</u>	<u>Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems</u> ( * 論 183) (DOI: 10.1039/c4cp00316k)	Phys. Chem. Chem. Phys. (16)	2014	10310-10344
184.	※	<u>Fukuzawa K.</u> ; Watanabe C.; Kurisaki I.; Taguchi N.; <u>Mochizuki Y.</u> ; Nakano T.; Tanaka S.; <u>Komeiji Y.</u>	Accuracy of the fragment molecular orbital (FMO) calculations for DNA: Total energy, molecular orbital, and inter-fragment interaction energy (DOI: 10.1016/j.comptc.2014.02.002)	Comp. Theor. Chem. (1034)	2014	7-16
185.	※	Saitow M.; Ida T.; <u>Mochizuki Y.</u>	Improved description of the orbital relaxation effect by practical use of the self-energy (DOI: 10.1002/qua.24625)	Intern. J. Quant. Chem.(114)	2014	577-586
186.	※	甘利真司, <u>望月祐志</u> , 加藤昭史, <u>福澤薫</u> , 渡邊千鶴, 沖山佳生, 田中成典, 中野達也	フラグメント分子軌道法を用いた spin-component-scaled MP2 法に基づくタンパクーリガンド相互作用クラスター解析	CBI 学会誌 2 巻 4 号	2014	17-25
187.	※	Tanaka S.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Komeiji, Y.</u> ; Okiyama, Y.; <u>Fukuzawa, K.</u>	<u>Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems</u> ( * 論 187) (DOI: 10.1039/C4CP00316K)	Phys. Chem. Chem. Phys. (16)	2014	10310-10344

188.	※	Nakano S.; Okazaki S.; <u>Tokiwa H.</u> ; Asano Y.	Binding of NAD <sup>+</sup> and L-threonine induces stepwise structural and flexibility changes in Cupriavidus necator L-threonine dehydrogenase (DOI: 10.1074/jbc.M113.540773)	J. Bio. Chem. (289)	2014	10445-10454
189.	※	Abe, T.; Sando, A.; Teraoka, F; <u>Otsubo, T.</u> ; Morita, K; <u>Tokiwa, H.</u> ; <u>Ikeda, K.</u> ; Suzuki, T.; Hidari, K. IPJ	Computational design of a sulfoglucuronide derivative fitting into a hydrophobic pocket of dengue virus E protein (DOI:10.1016/j.bbrc.2014.04.122)	Biochem. Biophys. Res. Comm. 449(1)	2014	32-37
190.	※	Kudo ,T.; Ishizawa, M.; Maekawa, K.; Nakabayashi, M.; Watarai, Y.; Uchida, H.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Ikura, T.; Ito, N.; Makishima, M.; Yamada, S.	Combination of Triple Bond and Adamantane Ring on the Vitamin D Side Chain Produced Partial Agonists for Vitamin D Receptor (DOI:10.1021/jm401989c)	J. Med. Chem. 57(10)	2014	4073-4087
191.	※	Tanaka, T.; Gamo, K.; Oyama, T.; Ohashi, M.; Waki, M.; Matsuno, K.; Matsuura, N.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Miyachi, H.	Molecular dynamics study-guided identification of cyclic amine structures as novel hydrophobic tail components of hPPAR $\gamma$ agonists (DOI:10.1016/j.bmcl.2014.06.023)	Bioorg. Med. Chem. Lett. 24(16)	2014	4001-4006
192.	※	Ikawa, T.; Kaneko, H.; Masuda, S.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Akai, S.	Trifluoromethanesulfonyloxy-Group-Directed Regioselective (3+2) Cycloadditions of Benzyne for the Synthesis of Functionalized Benzo-Fused Heterocycles (DOI: 10.1039/C4OB01627K)	Org. Biomol. Chem. (13)	2014	520-526
193.	※	Kanomata, K.; Toda, Y.; Shibata, Y;	<u>Secondary stereocontrolling interactions in chiral Bronsted acid catalysis: study of a</u>	Chem. Sci. (5)	2014	3515-3523

		<u>Yamanaka, M.</u> ; <u>Tsuzuki, S.</u> ; Gridneva, I. D.; Terada, M.	<u>Petasis-Ferrier-type rearrangement catalyzed by chiral phosphoric acids</u> ( * 論 193) (DOI: 10.1039/C4SC00611A)			
194.	※	Yoshida, M.; Kubara, A.; Nagasawa, Y.; Hara, S.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>Asymmetric Michael Addition of <math>\beta</math>-Ketoesters to Enones Catalyzed by the Lithium Salt of a Primary <math>\beta</math>-Amino Acid</u> ( * 論 194) (DOI:10.1002/ajoc.201400024)	Asian J. Org. Chem. (4)	2014	523-529
195.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Morishima, M.; Shibata, Y.; Higashibayashi, S.; Sakurai, H.	DFT Studies of Mechanism and Origin of Stereoselectivity of Palladium-Catalyzed Cyclotrimerization Reactions Affording <i>syn</i> -Tris(norborneno)benzenes (DOI: 10.1021/om500322b)	Organo-Metallic (33)	2014	3060-3068
196.	※	<u>Yamanaka, M.</u> ; Shibata, Y.	<u>Theoretical Studies on Mechanisms and Origins of Stereocontrol in Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Asymmetric Reactions</u> ( * 論 196) (DOI: 10.5059/yukigoseikyokaishi.72.580)	J. Syn. Org. Chem. (72)	2014	580-595
197.	※	Saito, K.; Horiguchi, K.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Chiral Phosphoric-Acid-Catalyzed Transfer Hydrogenation of Ethyl Ketimine Derivatives by Using Benzothiazoline</u> ( * 論 197) (DOI:10.1002/chem.201402763)	Chem. Eur. J. (20)	2014	7616-7620
198.	※	Arai, T.; Sugiyama, N.; Masu, H.; Kado, S.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>Trinuclear <math>Zn_3(OAc)_4 \cdot 3,3'</math>-bis(aminoimino)binaphthoxide Complex for Highly Efficient Catalytic Asymmetric Iodolactonization</u> ( * 論 198) (DOI:10.1039/C4CC02415J)	Chem. Comm. (50)	2014	8287-8290
199.	※	Mori, K.; Kurihara, K.; Yabe, S.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	Double C(sp <sup>3</sup> )-H Bond Functionalization Mediated by Sequential Hydride Shift/Cyclization Process: Diastereoselective Construction of Polyheterocycles (DOI:10.1021/ja412706d)	J. Am. Chem. Soc. (136)	2014	3744-3747
200.	※	Yu J.; <u>Kuroda, C.</u> ; Gong, X.	Natural Hybridization and Introgression between <i>Ligularia cymbulifera</i> and <i>L. tongolensis</i> (Asteraceae, Senecioneae) in Four	Plos One	2014	e115167

			Different Locations (DOI: 10.1371/journal.pone.0115167)			
201.	※	Saito, Y.; Sasaki, Y.; Ohsaki, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Structures of Six New Compounds from <i>Ligularia brassicoides</i> (DOI:10.1016/j.tet.2014.10.003)	Tetrahedron (70)	2014	9726- 9730
202.	※	Saito, Y.; Ichihara, M.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Twelve new compounds from <i>Ligularia melanothyrsa</i> ; isolation of melanothyrsins A-E, normelanothyrsin A, and other eremophilane sesquiterpenoids (DOI: 10.1016/j.tet.2014.02.080)	Tetrahedron (70)	2014	2621- 2628
203.	※	Saito, Y.; Mukai, T.; Iwamoto, Y.; Baba, M.; Takiguchi, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Kawahara, T.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Germacranolides and their diversity of <i>Eupatorium heterophyllum</i> collected in China (DOI: org/10.1248/cpb.c14-00426)	Chem. Pharm. Bull. (62)	2014	1092- 1099
204.	※	Saito, Y.; Kamada, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Isolation and structure of three bislactones, eremopetasitenin B4, eremofarfugins F, and G, from <i>Ligularia przewalskii</i> and revision of the structure of an epoxy-lactone isolated from <i>Ligularia intermedia</i> (DOI: 10.1246/cl.140745)	Chem. Lett. (43)	2014	1740- 1742
205.	※	Saito, Y.; Sasaki, Y.; Komiyama, T.; Ohsaki, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Structure and Cytotoxic Evaluation of 12-Oxygenated Eremophilanes from <i>Ligularia lingiana</i> (DOI: 10.1016/j.tet.2014.06.030)	Tetrahedron (40)	2014	5878- 5883
206.	※	Shimizu, A.; Watanabe, S.;	<u>Chemical and Genetic Study on</u> <u>Hybrid of <i>Ligularia subspicata</i> and</u>	Chem. Biodiversity	2014	1438- 1448

		Hanai, R.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	<u><i>L. cyathiceps</i> Collected in Yunnan Province of China</u> ( * 論 206) (DOI: 10.1002/cbdv.201400133)	(11)		
207.	※	<u>黒田智明</u> , 花井亮, 通 元夫, 岡本育子, 齋藤義紀, 永野肇, 大崎愛弓, 廣田洋, 河原孝行, 龔 洵	中国横断山脈地域に生育するキク科 <i>Ligularia</i> 属植物の生産するフラノエレモフィラン化合物の多様性 (DOI: org/10.5059/yukigoseikyokaishi.72.717)	有機合成化学協会誌 (72)	2014	717-725
208.	※	Shimizu, A.; Suzuki, Y.; Hanai, R.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	<u>Chemical and genetic similarity and diversity of <i>Ligularia anoleuca</i> and <i>L. fischeri</i> collected in the Hengduan Mountains of China</u> ( * 論 208) (DOI: 10.1016/j.phytochem.2014.03.019)	Phyto-Chemistry (102)	2014	137-144
209.	※	Hirota, H.; Horiguchi, Y.; Kawaii, S.; Hanai, R.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	The First Isolation of Furanoeremophilane from <i>Ligularia nelumbifolia</i>	Nat. Prod. Commun. (40)	2014	325-327
210.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Murata, Y.	Moment Analysis of Chromatographic Behavior of Separation Media for Fast HPLC (DOI: 10.2116/analsci.30.277)	Anal. Sci (30)	2014	277-283
211.	※	<u>Miyabe, K.</u>	<u>Moment Equations for Chromatography Based on Langmuir Type Reaction Kinetics</u> ( * 論 211) (DOI: 10.1016/j.chrom.2014.06.052)	J. Chromatogr. A (1356)	2014	171-179
212.	※	Murai, T.; Hayashi, T.; Yamada, K.; Maekawa, Y.; <u>Minoura, M.</u>	Fluorinative hydrolysis of phosphorothioic acid esters with a binaphthyl group through axis-to-center chirality transfer leading to the formation of P-chiral phosphorothioic monofluoridic acid salts (DOI:10.1039/C4CC05198J)	Chem. Commun. (50)	2014	12473-12475
213.	※	Kuwabara, T.; Guo, J.-D.;	Enhancement of stannylene character in stannole dianion equivalents	Organo-Metallic	2014	2910-2913

		Nagase, S.; <u>Minoura, M.</u> ; Herber, R. H.; Saito, M.	evidenced by NMR and Mossbauer spectroscopy and theoretical studies of newly synthesized silyl-substituted dilithiostannoles (DOI:10.1021/om5003717)	(33)		
214.	※	Daicho, Y.; Watanabe, Y.; Kano, N.; Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u> ; Kawashima, T.	<u>Aziridine formation with retention of configuration from a pentacoordinated 1,2-thiazetidine bearing two chiral centers at the 3- and 4-positions</u> ( * 論 214) (DOI:10.1246/bcsj.20140132)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (87)	2014	1005-1012
215.		Daicho, Y.; Kano, N.; Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u> ; Kawashima, T.	<u>Synthesis, Structure, and Thermolysis of Tetracoordinated <math>\lambda</math>4,2-Selenazetidines Bearing Two Chiral Centers at the 3- and 4-Positions</u> ( * 論 215) (DOI:10.1002/hc.21177)	Heteroat. Chem. (25)	2014	492-499
216.	※	Saito, M.; Matsumoto, K.; Fujita, M.; <u>Minoura, M.</u>	Unexpected Dehalogenation Reactions of Dichloroborane Bearing a NCN-Pincer Ligand: Formation of a Borenium Salt (DOI:10.1002/hc.21211)	Heteroat. Chem (25)	2014	354-360
217.	※	Pop, L.-C.; Kurokawa, N.; Ebata, H.; Tomizawa, K.; Tajima, T.; Ikeda, M.; Yoshioka, M.; Biesemans, M.; Willem, R.; <u>Minoura, M.</u> ; Saito, M.	Synthesis and Structures of Monomeric Group 14 Triols and Their Reactivity (DOI: 10.1139/cjc-2013-0496)	Can. J. Chem. (92)	2014	542-548
218.	※	<u>Edamoto, K.</u> ; Imanishi, S.; Masuda, S.; Kakefuda, Y.; Ozawa, K.	Angle-resolved photoemission study of Ni <sub>2</sub> P(10 $\bar{1}$ 0): Change in the surface electronic structure induced by P segregation	e-J. Surf. Sci. Nanotech. (12)	2014	175-178
219.	※	Sugizaki, Y.; Ishida, S.; Kakefuda, Y.; <u>Edamoto, K.</u> ; Matsunami, M.;	Soft X-ray photoelectron spectroscopy study of Fe <sub>2</sub> P(0001) (DOI: 10.1016/susc.2014.01.012)	Surf. Sci. (624)	2014	21-24

		Hajiri, T.; Kimura, S.				
220.	※	Ozawa, K.; Mimori, Y.; Kato, H.; Emori, M.; Sakama, H.; Imanishi, S.; <u>Edamoto, K.</u> ; Mase, K.	Shockley surface state on $\alpha$ -brass (111) and its response to oxygen adsorption (DOI: 10.1016/j.susc.2013.12.012)	Surf. Sci. (623)	2014	6-12
221.	※	Ozawa, K.; Mimori, Y.; Kato, H.; Imanishi, S.; <u>Edamoto, K.</u> ; Mase, K.	Photoelectron spectroscopy study of interaction of oxygen with the (111) surface of a Cu-Zn alloy (DOI: 10.1016/j.susc.2013.12.011)	Surf. Sci. (623)	2014	1-5
222.	※	Takefuda, Y.; Munakata, S.; <u>Edamoto, K.</u> ; Igari, Y.; Komeda, T.	The interaction of gold nanoparticles with a TiO <sub>2</sub> film formed on Si(100) (DOI: 10.7567/JJAP.53.075002)	Jpn. J. Appl. Phys. (53)	2014	075002 1-4
223.	※	Sumi, T.; Takagi, Y.; Yagi, A.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	<u>Photoirradiation wavelength dependence of cycloreversion quantum yields of diarylethenes</u> ( * 論 223) (DOI: 10.1039/c4cc00396a)	Chem. Commun. (50)	2014	3928- 3930
224.	※	Ichikawa, T.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	Asymmetric photoreaction of a diarylethene in hydrogen-bonded cocrystals with chiral molecules (DOI: 10.1039/c3pp50239b)	Photochem. Photobiol. Sci. (13)	2014	199-204
225.	※	Pinkowicz, D.; Ren, M.; Zheng, L.-M.; Sato, S.; Hasegawa, M.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u> ; Breedlove, B. K.; Cosquer, G.; Katoh, K.; Yamashita, M.	<u>Control of the single-molecule magnet behavior of lanthanide-diarylethene photochromic assemblies by irradiation with light</u> ( * 論 225) (DOI: 10.1002/chem.201402647)	Chem. Eur. J. (20)	2014	12502- 12513
226.	※	Fukaminato, T.; Hirose, T.;	<u>Molecular design strategy toward diarylethenes that photoswitch with</u>	J. Am. Chem. Soc.	2014	17145- 17154

		Doi, T.; Hazama, M.; Matsuda, K.; <u>Irie, M.</u>	visible light( * 論 226) (DOI: 10.1021/ja5090749)	(136)		
227.	※	Wakabayashi, M.; Yokojima, S.; Fukaminato, T.; Shiino, K.-I.; <u>Irie, M.</u> ; Nakamura, S.	Anisotropic dissymmetry factor, g: Theoretical investigation on single molecule chiroptical spectroscopy (DOI: 10.1021/jp409559t)	J. Phys. Chem. A (118)	2014	5046- 5057
228.	※	<u>Irie, M.</u> ; Fukaminato, T.; Matsuda, K.; Kobatake, S.	Photochromism of diarylethene molecules and crystals: Memories, switches, and actuators (DOI: 10.1021/cr500249p)	Chem. Rev. (114)	2014	12174- 12277
229.	※	Sugahara, A.; Tanaka, N.; Okazawa, A.; <u>Matsushita, N.</u> ; Kojima, N.	Photochromic Property of Anionic Spiropyran Having Sulfonate-Substituted Indoline Moiety (DOI: 10.1246/cl.130904)	Chem. Lett. (43)	2014	281-283
230.	※	Yagai, S.; Iwai, K.; Yamauchi, M.; Karatsu, T.; Kitamura, A.; Uemura, S.; <u>Morimoto, M.</u> ; Wang, H.; Würthner, F.	Photocontrol over self-assembled nanostructures of $\pi$ - $\pi$ stacked dyes supported by the parallel conformer of diarylethene (DOI: 10.1002/anie.201310773)	Angew. Chem. Int. Ed. (53)	2014	2602- 2606
231.	※	Yamaguchi, T.; Kamihashi, Y.; Ozeki, T.; Uyama, A.; Kitai, J.; Kasuno, M.; Sumaru, K.; Kimura, Y.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; <u>Morimoto, M.</u> ; Uchida, K.	Photochromic reaction of diarylethenes having phenol moiety as an aryl ring (DOI: 10.1246/bcsj.20130252)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (87)	2014	528-538
232.	※	Yamaguchi, T.; Hosaka, M.; Shinohara, K.;	Photochromism and fluorescence properties of 1,2-bis(2-alkyl-1-benzothiophene-	J. Photochem. Photobiol. A	2014	44-51

		Ozeki, T.; Fukuda, M.; Takami, S.; Ishibashi, Y.; Asahi, T.; <u>Morimoto, M.</u>	3-yl)perhydrocyclopentenes (DOI: 10.1016/j.jphotochem.2014.04.007)	(285)		
233.	※	Tatsumi, Y.; Fujinaga, N.; Kasuno, M.; <u>Morimoto, M.</u> ; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.	A photo- and halochromic multicolor switching system consisting of diarylethene and malachite green moieties (DOI: 10.1039/C4NJ00434E)	New J. Chem. (38)	2014	5706-5714
234.	※	Shimizu, Y.; Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Synthesis of silica xerogels using silane monomer and poly(dimethylsiloxane) as precursors	Polym. Prep. Jpn. (63)	2014	2743-2744
235.	※	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u> ; Usugi, S.	Effects of molecular weight and catalyst on stereoblock formation <i>via</i> solid state polycondensation of poly(lactic acid) (DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2014.02.006)	Eur Polym. J. (54)	2014	62-70
236.	※	Nara, S.; <u>Oyama, H. T.</u>	Effects of partial miscibility on the structure and properties of novel high performance blends composed of poly( <i>p</i> -phenylene sulfide) / poly(phenylsulfone) (DOI:10.1038/pj.2014.21)	Polymer J. (46)	2014	568-575
237.	※	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Monolithic porous poly(lactic acid) (PLA) with stereocomplex crystals	Polym. Prep. Jpn. (63)	2014	3753-3754
238.	※	Tanishima, D.; <u>Oyama, H. T.</u> ; Maekawa, S.; Usugi, S.	Water-disintegrative and biodegradable blends containing poly(L-lactic acid)	Polym. Prep. Jpn. (63)	2014	3739-3740
239.	※	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u> ; Usugi, S	Effects of molecular weight and catalyst on stereoblock formation <i>via</i> solid state polycondensation of poly(lactic acid) (DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2014.02.006)	Eur. Polym. J. (54)	2014	62-70
240.	※	<u>Mitsui, M.</u> ;	<u>Enhanced Photostability of an</u>	Photochem.	2014	1130-

		Higashi, K.; Takahashi, R.; Hirumi, Y.; Kobayashi, K.	<u>Anthracene-based Dye due to Supramolecular Encapsulation: A New Type of Photostable Fluorophore for Single-molecule Study</u> ( * 論 240) (DOI: 10.1039/C4PP00065J)	& Photobiol. Sci., (13)		1136
241.	※	Hosoya, N.; Takegami, R.; Suzumura, J.; Yada, Y.; Miyajima, K.; <u>Mitsui, M.</u> ; Knickelbein, M. B.; Yabushita, S.; Nakajima, A.	“Formation and Electronic Structures of Organoeuropium Sandwich Nanowires (DOI: 10.1021/jp5011007)	J. Phys. Chem. A (118)	2014	8298-8308
242.	※	Hirumi, Y.; Tamaki, K.; Namikawa, T.; Kamada, K.; <u>Mitsui, M.</u> ; Suzuki, K.; Kobayashi, K.	Encapsulation with Protrusion of Cruciform 9,10-Bis(arylethynyl)anthracene Derivatives in a Self-assembled Boronic Ester Cavitand Capsule: Photochemical and Photophysical Properties (DOI: 10.1002/asia.201400042)	Chem. Asian J. (9)	2014	1282-1290
243.	※	<u>Uetani, K.</u> ; Ata, S.; Tomonoh, S.; Yamada, T.; Yumura, M.; Hata, K.	Elastomeric Thermal Interface Materials with High Through-Plane Thermal Conductivity from Carbon Fiber Fillers Vertically Aligned by Electrostatic Flocking (DOI: 10.1002/adma.201401736)	Adv. Mater. (26)	2014	5857-5862
244.	※	Kawai, T.; Watanabe, M.; <u>Uetani, K.</u> ; Fukushima, Y.; Sueyoshi, K.; Kubo, T.; Kitagawa, F.; Yaho, H.; Otsuka, K.	Hydrophilic Interaction Electrokinetic Chromatography Using Bio-based Nanofillers (DOI: 10.1002/elps.201300558)	Electrophoresis (35)	2014	1517-1528
245.	※	Chen, W.; Abe, K.; <u>Uetani, K.</u> ; Yu, H.;	Individual Cotton Cellulose Nanofibers: Pretreatment and Fibrillation Technique (DOI: 10.1007/s10570-014-0172-z)	Cellulose (21)	2014	1517-1528

		Liu, Y.; Yano, H.				
246.	※	<u>Uetani, K.</u> ; Watanabe, Y.; Abe, K.; Yano, H.	Influence of Drying Method and Precipitated Salts on Pyrolysis for Nanocelluloses (DOI: 10.1007/s10570-014-0242-2)	Cellulose (21)	2014	1631- 1639
247.	※	Watanabe, C.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Okiyama, Y.; Tsukamoto, T.; Kato, A.; Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Nakano, T.	<u>Three- and four-body corrected fragment molecular orbital calculations with a novel subdividing fragmentation method applicable to structure-based drug design</u> ( * 論 247) (DOI: 10.1016/j.jmgm.2013.01.006)	J. Mol. Gr. Mod. (41)	2013	31-42
248.	※	<u>Komeij, Y.</u> ; Fujiwara, T.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u>	Dynamic fragmentation with static fragments (DF/SF) algorithm designed for ab initio fragment molecular orbital based-molecular dynamics (FMO-MD) simulations for polypeptides (DOI: 10.1273/cbij.13.45)	CBI-J. (13)	2013	45-57
249.		<u>望月祐志</u>	<u>FMO 法における電子相関計算</u> ( * 論 249) (DOI: 10.11546/cicsj.31.62)	日本化学会 情報化学部 会誌 (31)	2013	64-72
250.	※	Sawada, H.; Onoda, K.; Morita, D.; Ishitsubo, E.; Matsuno, K.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Kuroda, T.; Miyachi, H.	Structure-anti-MRSA activity relationship of macrocyclic bis(bibenzyl) derivatives (DOI:10.1016/j.bmcl.2013.10.069)	Bioorg. Med. Chem. Lett. 23(24),	2013	6563- 6568

251.	※	Nakabayashi, M.; Tsukahara, Y.; Iwasaki- Miyamoto, Y.; Mihori- Shimazaki, M.; Yamada, S.; Inaba, S.; Oda, M.; Shimizu, M.; Makishima, M.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Ikura, T.; Ito, N.	Vitamin D Receptor Mutants R270L and W282R Bound to 1,25-Dihydroxyvitamin D3 and Synthetic Ligands (DOI:10.1021/jm400537h)	J. Med. Chem. 56(17)	2013	6745- 6760
252.	※	Minami, A.; Ishibashi, S.; <u>Ikeda, K.</u> ; Ishitsubo, E.; Hori, T.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Taguchi, R.; Ieno, D.; <u>Otsubo, T.</u> ; Matsuda, Y.; Sai, S.; Inada, M.; Suzuki, T.	Catalytic preference of Salmonella typhimurium LT2 sialidase for N-acetylneuraminic acid residue over N-glycolylneuraminic acid residue (DOI:10.1016/j.fob.2013.05.002)	FEBS Open Bio. (3)	2013	231- 236
253.	※	Akai, S.; Takagi, A.; Ikawa, T.; Kurita, Y.; Saito, K.; Azechi, K.; Egi, M.; Itoh, Y.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Kita, Y.	Generation of 3-Borylbenzynes, Their Regioselective Diels-Alder Reactions, and Theoretical Analysis (DOI:10.1016/j.tet.2013.03.016)	Tetrahedron 69(21)	2013	4338- 4352
254.	※	Katsuyama, I.; Chouthaiwale, P.V.; Cui, H.-L.; Ito, Y.; Sando, A.;	Substituent-dependent reactivity in aldehyde transformations: 4-(phenylethynyl)benzaldehydes versus simple benzaldehydes (DOI:10.1016/j.tet.2013.03.056)	Tetrahedron 69(20)	2013	4098- 4104

		<u>Tokiwa, H.</u> ; Tanaka, F.				
255.	※	Ikawa, T.; Takagi, A.; Goto, M.; Aoyama, Y.; Ishikawa, Y.; Itoh, Y.; Fujii, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Akai, S.	Regiocomplementary Cycloaddition Reactions of Boryl- and Silylbenzynes with 1,3-Dipoles: Selective Synthesis of Benzo-Fused Azole Derivatives (DOI:10.1021/jo302802b)	J. Org. Chem. 78(7)	2013	2965-2983
256.	※	Yoshida, M.; Nagasawa, Y.; Kubara, A.; Hara, S.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>Mechanistic study of asymmetric Michael addition of malonates to enones catalyzed by a primary amino acid lithium salt</u> ( * 論 256) (DOI:10.1016/j.tet.2013.09.066)	Tetrahedron (69)	2013	10003-10008
257.	※	Mori, K.; Ichikawa, Y.; Kobayashi, M.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Prediction of suitable catalyst by <sup>1</sup>H NMR: asymmetric synthesis of multisubstituted biaryls by chiral phosphoric acid catalyzed asymmetric bromination</u> ( * 論 257) (DOI:10.1039/c3sc52142g)	Chem. Sci. (4)	2013	4235-4239
258.	※	Saito, K.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Chiral Phosphoric Acid-Catalyzed Oxidative Kinetic Resolution of Indolines Based on Transfer Hydrogenation to Imines</u> ( * 論 258) (DOI:10.1021/ja406004q)	J. Am. Chem. Soc. (135)	2013	11740-11743
259.	※	Nishino, R.; Furuta, T.; Kan K.; Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Sasamori, T.; Tokitoh, N.; Kawabata, T.	<u>Investigation of the Carboxylate Position during the Acylation Reaction Catalyzed by Biaryl DMAP Derivatives with an Internal Carboxylate</u> ( * 論 259) (DOI: 10.1002/anie.201300665)	Angew. Chem. Int. Ed. (52)	2013	6445-6449
260.	※	Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u>	<u>DFT Study of Mechanism and Origin of Enantioselectivity in Chiral BINOL-Phosphoric Acid Catalyzed Transfer Hydrogenation of Ketimine and <math>\alpha</math>-Imino Ester Using Benzothiazoline</u> ( * 論 260) (DOI: 10.1021/jo4002195)	J. Org. Chem. (78)	2013	3731-3736
261.	※	Mori, K.;	<u>Enantioselective Synthesis of</u>	J. Am.	2013	3964-

		Ichikawa, Y.; Kobayashi, M.; Shibata, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Akiyama, T.	<u>Multisubstituted Biaryl Skeleton by Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Desymmetrization/Kinetic Resolution Sequence</u> ( * 論 261) (DOI: 10.1016/j.tet.2013.09.066)	Chem. Soc. (135)		3970
262.	※	Itoh, Y.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Mikami, K.	Theoretical Study on the Regioselectivity of Baeyer-Villiger Reaction of $\alpha$ -Me-, -F-, -CF <sub>3</sub> -Cyclohexanones (DOI: 10.1039/c3sc52142g)	J. Org. Chem.	2013	146-153
263.	※	Ishikawa, Y.; Miyamoto, K.; <u>Horn, E.</u>	Crystal structure of <i>trans</i> -diacetonitrile diaqua( <i>N,N,N',N'</i> -tetramethylethylenediamine) nickel(II) diiodide, [Ni( <i>tmen</i> )(CH <sub>3</sub> CN) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] <sub>2</sub> <sup>+</sup> ·2I <sup>-</sup> , C <sub>10</sub> H <sub>26</sub> I <sub>2</sub> N <sub>4</sub> NiO <sub>2</sub> (DOI: 10.1524/ncrs.2013.0049 )	Z. Kristallogr. NCS. (228)	2013	167-168
264.	※	Ishikawa, Y.; Miyamoto, K.; <u>Horn, E.</u>	Crystal structure of $\mu_3$ -fluoro-tri- $\mu_2$ -fluoro- <i>tris</i> (tetramethylethylenediamine nickel(II)) fluoride trihydrate, [Ni <sub>3</sub> ( <i>tmen</i> ) <sub>3</sub> F <sub>3</sub> ] <sup>+</sup> ·F <sup>-</sup> ·3H <sub>2</sub> O, C <sub>18</sub> H <sub>54</sub> F <sub>6</sub> N <sub>6</sub> Ni <sub>3</sub> O <sub>3</sub> (DOI: 10.1524/ncrs.2013.0019 )	Z. Kristallogr. NCS (228)	2013	126-128
265.	※	Wang, J.-F.; Gong, X.; Chiang, Y.-C.; <u>Kuroda, C.</u>	Phylogenetic patterns and disjunct distribution in <i>Ligularia hodgsonii</i> Hook. (Asteraceae) (DOI: 10.1111/jbi.12114)	J. Bio-geography (40)	2013	1741-1754
266.	※	Saito, Y.; Ichihara, M.; Takiguchi, K.; Tanio, Y.; Okamoto, Y.; Hanai, R.; <u>Kuroda, C.</u> ; Kawahara, T.; Gong, X.; Tori, M.	Chemical and Genetic Diversity of <i>Cremanthodium lineare</i> (DOI: 10.1016/j.phytochem.2013.08.009)	Phyto-chemistry (96)	2013	184-190
267.	※	Saito, Y.; Taniguchi, M.; Komiyama, T.; Ohsaki, A.;	Four new compounds from <i>Ligularia virgaurea</i> : isolation of eremophilane and noreremophilane sesquiterpenoids and the absolute	Tetrahedron (69)	2013	8505-8510

		Okamoto, Y.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	configuration of 2 $\alpha$ -hydroxyremophil-11-en-9-one by CD spectrum and DFT calculation (DOI: 10.1016/j.tet.2013.06.104)			
268.	※	Saito, Y.; Iwamoto, Y.; Okamoto, Y.; Kawahara, T.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u> ; Tori, M.	Eight New Alkyne and Alkene Derivatives from Four <i>Saussurea</i> Species Collected in China	Nat. Prod. Commun. (8)	2013	631-634
269.	※	<u>Wada, T.</u> ; Maki, H.; Imamoto, T.; Yuki, H.; Miyazato, Y.	<u>Four-electron reduction of dioxygen catalyzed by dinuclear cobalt complexes bridged by bis(terpyridyl)anthracene( * 論 269)</u> (DOI: 10.1039/c2cc36528f)	Chem. Commun. 49 (39)	2013	4394- 4396
270.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Isogai, R.	<u>Estimation of Molecular Diffusivity in Liquid Phase Systems on the Basis of the Absolute Rate Theory( * 論 270)</u> (DOI: 10.2116/analsci.29.467)	Anal. Sci. (29)	2013	467-472
271.	※	<u>Miyabe, K.</u> ; Matsumoto, Y.; Ando, N.; Teratani Y.	<u>Measurement of Pore Diffusivity in Separation Media for High Performance Liquid Chromatography( * 論 271)</u> (DOI: 10.2116/analsci.29.315)	Anal. Sci. (29)	2013	315-323
272.	※	Fuku-en, S.-i.; Yamamoto, J.; <u>Minoura, M.</u> ; Kojima, S.; Yamamoto, Y.	Synthesis of New Dipyrido- Annulated <i>N</i> -Heterocyclic Carbenes with Ortho Substituents (DOI: 10.1021/ic402301u)	Inorg. Chem. (52)	2013	11700- 11702
273.	※	Saito, M.; Akiba, T.; Kaneko, M.; Kawamura, T.; Abe, M.; Hada, M.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis, Structure, and Reactivity of Lewis Base Stabilized Plumbacyclopentadienylidenes (DOI: 10.1002/chem.201303672)	Chem., Eur. J. (19)	2013	16946- 16953
274.	※	Sashida, H.; Kaname, M.; <u>Minoura, M.</u>	Studies on Chalcogen-containing Heterocycles. Part 38: Regio- and Stereoselective Tandem Addition- iodocyclization of 2-Ethynylphenyl Isothiocyanates with <i>N</i> - and <i>O</i> -	Tetrahedron (69)	2013	6478- 6487

			Nucleophiles Affording 4-(Iodoalkylidene)benzo[d][1,3]thiazines (DOI: 10.1016/j.tet.2013.05.069)			
275.	※	<u>Edamoto, K.</u>	The electronic properties of nickel phosphide surfaces: Angle-resolved and resonant photoemission studies (DOI: 10.1016/j.apsusc.2012.09.055)	Appl. Surf. Sci. (269)	2013	7-11
276.	※	Shoji, Y.; Yagi, A.; Horiuchi, M.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	<u>Photochromic diarylethene derivatives bearing hydrophilic substituents</u> ( * 論 276) (DOI: 10.1002/ijch.201300018)	Isr. J. Chem. (53)	2013	303-311
277.	※	Takami, S.; Shimizu, A.; Shimizu, K.; Miyoshi, R.; Yamaguchi, T.; <u>Irie, M.</u>	Photochromic performance of 1-thiazolyl-2-vinylcyclopentene derivatives having a phenyl- or 4-methoxyphenyl-substituted olefin (DOI: 10.1246/bcsj.20130091)	Bull. Chem. Soc. Jpn. (86)	2013	1059-1064
278.	※	Mori, H.; Kojima, R.; Mochizuki, Y.; Uenohara, W.; Umezawa, I.; <u>Matsushita, N.</u>	Importance of spin-orbit coupling effect and solvent effect in electronic transition assignments of Pt <sup>II</sup> complexes: in the case of <i>cis/trans</i> -[Pt <sup>II</sup> Cl <sub>2</sub> (NH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] (DOI: 10.1016/j.molstruc.2012.11.027)	J. Mol. Struct. (1035)	2013	218-223
279.	※	Yoda, Y.; Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Generation of polylactic acid-based urethanes containing stereocomplex crystals	Polym. Prep. Jpn (62)	2013	2064-2065

<図書>

No	著者名	書名	出版社	発行年	総頁数
1.	<u>望月祐志</u> , 高田彰二, 林重彦, 等	計算科学ロードマップ白書 第三版( * 図書 1)	理化学研究所 計算科学研究機構	2017	421
2.	<u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M</u> et al.	Photon-working switches (Turn-on mode fluorescent diarylethenes)	Springer	2017	464
3.	<u>上谷幸治郎</u> 等	放熱・高耐熱材料の特性向上と熱対策技術	技術情報協会	2017	682

		(ナノセルロースによる熱伝導性「紙」材料の開発)			
4.	<u>上谷幸治郎</u> 等	工業材料 2017年8月号:セルロースナノファイバーが切り拓く新素材・新技術 (セルロースナノファイバーによる伝熱材料)	日刊工業新聞	2017	
5.	<u>上谷幸治郎</u> 等	繊維学会誌 (平成29年度年次大会報告⑩セルロースナノファイバー)	繊維学会	2017	541
6.	<u>Uetani, K.</u> , Hatori, K.	Science and Technology of Advanced Materials (Thermal conductivity analysis and applications of nanocellulose materials)	IOP Publishing	2017	1004
7.	BKumar, B.; <u>Niihori, Y.</u> ; Kurashige, W.; Negishi, Y.	Descriptive Inorganic Chemistry Researches of Metal Compounds (Controlled Thiolate-Protected Gold and Alloy Clusters)	InTech's publishing	2017	220
8.	奥山 格・石井昭彦・ <u>箕浦真生</u>	有機化学 改訂2版	丸善出版(株)	2016	423
9.	<u>Morimoto, M.</u> ; Kobatake, S.; <u>Irie, M.</u> ; Bisoyi, H. K.; Li, Q.; Wang, S.; Tian, H.	Photochromic Materials - Preparation, Properties and Applications (Photochromic bulk materials)	Wiley-VCH	2016	421
10.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u> ・伊藤雄三	高熱伝導樹脂の設計と開発 (断熱材から伝熱材へ ~ナノセルロースの挑戦~)	シーエムシー出版	2016	212
11.	<u>上谷幸治郎</u> 磯貝明 等	ナノセルロースの製造技術と応用展開 (ナノセルロースのキラリティと単繊維の構造)	シーエムシー・リサーチ	2016	245
12.	<u>上谷幸治郎</u> 等	図解よくわかるナノセルロース (スプレードライによるナノセルロースの集合体)	日刊工業新聞社	2015	208
13.	<u>Wada, T.</u> ; Tanaka, K.; Muckerman, J. T.; Fujita, E.; et al.	<u>Water Oxidation by Ruthenium Complexes with Non-Innocent Ligands</u> ( * 図書 13) (Molecular Water Oxidation Catalysis)	Wiley & Sons, Ltd.	2014	282

14.	<u>宮部寛志</u> , 橋本剛, 早下隆士, 等	クロマトグラフィー分離機構のモ ーメント解析理論(ぶんせき No. 11)	日本分析化学会	2014	51
15.	<u>Irie, M.</u> ; Kobayashi, S.; Müllen, K.; et al.	Photochromic Polymers (Encyclopedia of Polymeric Nanomaterials)	Springer	2014	2672
16.	<u>三井正明</u> , 中林孝和, 等	光化学の事典-だれでもわかる 光化学の初歩-	朝倉書店	2014	418
17.	<u>Irie, M.</u> ; Yokoyama, Y.; Seki, T.; et al.	Photomechanical Response of Diarylethene Single Crystals (New Frontiers in Photochromism)	Springer	2013	293

<学会発表>

No.	発表者名	発表表題	学会名	開催地	発表年月
1.	新庄永治, 奥脇 弘次, 土居英 男, <u>望月祐志</u> , 郡司美穂子, 古 石誉之, <u>福澤 薫</u> , 米持悦生	<u>DPD シミュレーションによる 脂質膜構成メカニズムの解 明(*学1)</u>	日本薬学会第 138 年会	ホテル金沢 (金沢市)	2018/3
2.	松尾直也・關文 緒・前仲勝実・ 竹田誠・ <u>常盤広 明</u>	<u>イヌジステンパーウイルスの 株間の感染性の違いに着目 したウイルスタンパク質と受 容体の相互作用解析(*学 2)</u>	日本薬学会第 138 年会	ホテル金沢 (金沢市)	2018/3
3.	山本雄大・松尾 直也・Sundaram Arulmozhiraja・ Vladimir Sladek・島野仁・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算を用い た新規 SPPARMα (K-877) の in silico 解析	日本薬学会第 138 年会	ホテル金沢 (金沢市)	2018/3
4.	清水奏・宮下由 里奈・松尾直 也・中野祥吾・ 伊藤創平・沼本 修孝・伊倉貞 吉・伊藤暢聡・ 加来田博貴・ <u>常 盤広明</u>	hRXR α/リガンド Cβ1-PMN の パーシャルアゴニスト活性の 起源は何か?	日本薬学会第 138 年会	ホテル金沢 (金沢市)	2018/3
5.	山本雄大・ Sundaram	<u>構造および配列を基盤とした 遊離脂肪酸受容体</u>	日本薬学会第 138 年会	ホテル金沢 (金沢市)	2018/3

	Arulmozhiraja・Vladimir Sladek・速水耕介・韓力・辻智子・中野祥吾・伊藤創平・渡邊康雄・山田静雄・ <u>常盤広明</u>	(FFAR1/FFAR4) と PUFA との相互作用解析(*学5)			
6.	宮下由里奈・山本雄大・中野祥吾・伊藤創平・沼本修孝・伊倉貞吉・伊藤暢聡・関谷元博・島野仁・ <u>常盤広明</u>	NADH 依存型脂質代謝関連蛋白質の新規分子設計に基づく分子基盤(*学6)	日本薬学会第138年会	ホテル金沢(金沢市)	2018/3
7.	松田留理子・宮下由里奈・中野祥吾・伊藤創平・島野仁・ <u>常盤広明</u>	第四次革新的手法による難解析性タンパク質の構造および機能解析(*学7)	日本薬学会第138年会	ホテル金沢(金沢市)	2018/3
8.	奥脇弘次, 土居英男, <u>望月祐志</u> , 小沢拓, 泰岡顕治, <u>福澤薫</u>	FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション環境の構築(*学8)	高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会	臨海副都心センター(江東区)	2018/3
9.	津島悟, 阿部鷹也, 奥脇弘次, <u>望月祐志</u> , <u>古明地勇人</u> , <u>福澤薫</u> , 中野達也, 沖山佳生, 三好永作	MD-FMO 連携計算による DNA-ウラニル系の相互作用解析	第65回応用物理学会春季学術講演会	早稲田大学(新宿区)	2018/3
10.	奥脇弘次, 土居英男, <u>望月祐志</u> , 小沢拓, 泰岡顕治, <u>福澤薫</u>	FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション環境のナノバイオ系への応用(*学10)	第65回応用物理学会春季学術講演会	早稲田大学(新宿区)	2018/3
11.	<u>古明地勇人</u> , 沖山佳生, <u>望月祐志</u> , <u>福澤薫</u>	フラグメント分子軌道法(FMO法)による一本鎖DNAと結合タンパク質の相互作用解析	第65回応用物理学会春季学術講演会	早稲田大学(新宿区)	2018/3
12.	<u>山中正浩</u>	The Interplay between	日本化学会第98	日本大学	2018/3

		<u>Experiment and Computation: Rational Design of Chiral Space in Asymmetric Catalysis</u> (*学 12)	春季年会	(船橋市)	
13.	<u>栗田朋実、堤亮祐、山中正造</u>	<u>亜鉛ビスアミジナート触媒による<math>\alpha</math>-ケトエステルの不斉アルキル化反応における反応場制御</u> (*学 13)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
14.	<u>金子知真、神作八起、鈴木望、藤木道也、山中正造</u>	<u>キラルビスアミジン-フルオレセイン超分子錯体の円偏光発光(CPL)特性に対する置換基効果</u> (*学 14)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
15.	<u>森悠斗、吉戒直彦、山中正造</u>	<u>Co触媒によるシクロプロパンの開裂を含む分子内ヒドロアシル化 反応の理論的検討</u> (*学 15)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
16.	<u>木村朱里、堤亮祐、山中正造</u>	<u>カルボキサミド構造を有する新規 2,2'-ビピリジン型不斉配位子の開発</u> (*学 16)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
17.	<u>中野克洋、川口昌輝、細谷圭介、小田木陽、長澤和夫、山中正造</u>	<u>グアニジン-チオウレア触媒を用いたエントロピー依存的な不斉アザ-フリーデル-クラフツ反応における立体制御機構の理論的解析</u> (*学 17)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
18.	<u>中野克洋、川口昌輝、細谷圭介、小田木陽、山中正造、長澤和夫</u>	<u>グアニジン-チオウレア触媒を用いたエントロピー依存的な不斉アザ-フリーデル-クラフツ反応の立体制御機構に対する実験的検証</u> (*学 18)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
19.	<u>神作八起、鈴木望、藤木道也、山中正造</u>	Handedness Tunable Circularly Polarized Luminescence of Hydrogen-Bonded Supramolecular system	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
20.	<u>矢崎恭史、堤亮祐、山中正造</u>	<u>アミジニウム-カルボキシレート塩橋に基づく新規超分子不斉触媒の開発</u>	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
21.	<u>永田貴也、玉木温子、清川謙介、山中正造、南方聖司</u>	<u>ホウ素エノラートの不斉求電子的シアノ化</u> (*学 21)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
22.	<u>生島匠、中藺孝志、和田 亨</u>	<u>ビス(ビピリジルフェニル)アントラセンで架橋されたルテニ</u>	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3

		ウム錯体による二酸化炭素還元反応			
23.	<u>有馬弘晃</u> 、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	二核コバルト-ポリピリジル錯体触媒による酸素還元反応における架橋配位子の影響	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
24.	<u>小岩井 茜</u> 、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	プロトン解離能を有するビベンズイミダゾールを二座配位子とした二核ルテニウム錯体の水の酸化反応	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
25.	<u>熊谷優吾</u> 、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	光合成酸素発生中心の仕組みを模倣したルテニウム錯体の水の酸化反応に対する触媒活性	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
26.	<u>西野龍平</u> ・ <u>箕浦真生</u>	<u>トリプチシル骨格を有する安定なジスチベンの反応性</u> (* 学 26)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
27.	<u>後藤亮平</u> ・ <u>行本万里子</u> ・ <u>箕浦真生</u>	<u>トリプチシル骨格を有するテトラアルキルジゲルメンの合成</u> (* 学 27)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
28.	<u>李 尚姫</u> ・ <u>箕浦真生</u>	<u>かさ高い置換基を窒素上に有する 1,4-ジアザジエンの合成と反応</u> (* 学 28)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
29.	<u>鈴木文陽</u> ・ <u>箕浦真生</u>	<u>トリプチシル骨格を有する安定なゲルミレンの合成と反応</u> (* 学 29)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
30.	<u>Yukimoto, M.;</u> <u>Minoura, M.</u>	<u>Kinetic Stabilization of Highly Reactive Group 14 Elements Compounds Utilizing Triptycyl Framework</u> (* 学 30)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
31.	<u>箕浦真生</u>	結晶構造解析で困ったときは: 空間群決定と双晶解析の実例を中心に (招待講演)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
32.	<u>枝元一之</u> 、 <u>本山寛大</u> 、 <u>杉崎裕一</u> 、 <u>小澤健一</u>	軟 X 線光電子分光による Fe <sub>2</sub> P の表面電子状態の評価	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
33.	<u>田中李叶子</u> 、 <u>松下信之</u>	Crystal structure construction of organic salts comprising proton, H <sup>+</sup> , as a counter cation	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
34.	<u>白井大貴</u> 、 <u>松下信之</u>	ヨウ素架橋一次元白金錯体長鎖アルカンスルホン酸塩	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3

		における混合原子価状態と分子ファスナー効果			
35.	<u>割石寛之</u> 、 <u>松下信之</u>	<i>o</i> -フェニレンジアミン誘導体を配位子源とした新規レドックス活性白金(II)錯体の合成	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
36.	<u>岩井良太</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	Turn-on 型蛍光性ジアリールエテンにおける置換基効果	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
37.	<u>上谷幸治郎</u>	ナノファイバーフィルムに見出された伝熱特性と応用可能性 (依頼講演)	日本化学会第 98 春季年会	日本大学 (船橋市)	2018/3
38.	<u>Nakazono, T.</u> ; <u>Wada, T.</u>	<u>Photochemical and Electrochemical Water Oxidation Mechanisms of Cobalt porphyrins</u> ( * 学 38) (招待講演)	International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC)	Siem Reap, (Cambodia)	2018/3
39.	<u>Oyama, H. T.</u> ; Kimura, M.; Nakamura, Y.; Ogawa, R.	<u>Effects of salts and pH on hydrolytic degradation of poly(L-lactic acid) blends</u> ( * 学 39)	The 255th American Chemical Society National Meeting & Exposition,	New Orleans Convention Center (USA)	2018/3
40.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>北野基弥</u> ・ <u>大山秀子</u> ・ <u>田子敬勉</u> ・ <u>羽鳥仁人</u>	セルロースナノペーパーの伝熱における応力依存性	第 68 回日本木材学会年次大会	京都府立大学 (京都市)	2018/3
41.	<u>上谷幸治郎</u>	セルロースの伝熱特性を測る！熱伝導性バイオナノファイバーの発見と特性評価 (招待講演)	株式会社ベテル 技術セミナー	リファレンス新有楽町ビル (千代田区)	2018/3
42.	<u>奥脇弘次</u> 、 <u>土居英男</u> 、 <u>望月祐志</u>	<u>FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用</u> ( * 学 42) (依頼講演)	第 5 回材料系ワークショップ	秋葉原 UDX (千代田区)	2018/2
43.	<u>上谷幸治郎</u>	熱を伝えるセルロースナノファイバー (招待講演)	先端的低炭素化技術開発(ALCA)シンポジウム	東京ビッグサイト (江東区)	2018/2
44.	<u>常盤広明</u>	<u>ウイルスタンパク質を指向したタンパク質の効率的構造変化経路探索法の開発とその応用</u> ( * 学 44)	7th Negative Strand Virus-Japan Symposium	サザンビーチホテル&リゾート 沖縄(糸満市)	2018/1
45.	<u>松尾直也</u> ・ <u>關文緒</u> ・ <u>前仲勝実</u> ・	<u>イヌジステンパーウイルスの株間の感染性の違いに着目</u>	7th Negative Strand	サザンビーチホテル&リゾート	2018/1

	竹田誠・ <u>常盤広明</u>	した新規 in silico 手法によるウイルス H と動物 SLAM の相互作用解析(*学 45)	Virus-Japan Symposium	沖縄(糸満市)	
46.	松田留理子・ <u>常盤広明</u>	第四次革新的手法と最新の計算化学を基盤とする計算皮膚科学の可能性	第 8 回化粧品開発展	幕張メッセ(千葉市)	2018/1
47.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>岡田拓巳</u> ・ <u>大山秀子</u> 、	ナノセルロースの配向集積に基づく熱制御性の発現(*学 47)	第 13 回バイオマ科学会議	東北大学(仙台市)	2018/1
48.	松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・關文緒・竹田誠・ <u>常盤広明</u>	第四次革新的手法を用いたウイルスおよび宿主動物の共進化メカニズムの解明	2017 年度生命科学系学会合同年次大会	神戸ポートアイランド(神戸市)	2017/12
49.	西野龍平・行本万里子・ <u>箕浦真生</u> 、	トリプチル骨格を活用した高反応性典型元素化学種の速度論的安定化	第 44 回有機典型元素化学討論会	東京工業大学(目黒区)	2017/12
50.	<u>Suzuki, N.</u> ; Matsuda, T.; Nagai, T.; Yamazaki, K.; Fujiki, M.	Investigation of Weak CH/ $\pi$ Interaction in the Structure of Dibromo-9,9-dialkylfluorenes (招待講演)	Energy Materials Nanotechnology Asia (EMN Asia) Meeting on Computation and Theory	Dubai, (UAE)	2017/12
51.	小山祐樹、渡邊誠一郎、橋本彩加、 <u>新堀佳紀</u> 、 <u>根岸雄一</u>	逆相高速液体クロマトグラフィーを駆使したチオラート保護合金クラスターの原子精度精密分離	第 27 回日本 MRS 年次大会	横浜市開港記念館(横浜市)	2017/12
52.	島大佑、吉田佳奈、浜田幸太、 <u>新堀佳紀</u> 、 <u>根岸雄一</u>	イオンペアクロマトグラフィー及び親水性相互作用クロマトグラフィーを用いた親水性金クラスターの高分解能分離	第 27 回日本 MRS 年次大会	横浜市開港記念館(横浜市)	2017/12
53.	吉田佳奈、 <u>新堀佳紀</u> 、島大佑、 <u>根岸雄一</u>	LC/MS を駆使した親水性チオラート保護金クラスターの高分解能分離と化学組成分布の評価	第 27 回日本 MRS 年次大会	横浜市開港記念館(横浜市)	2017/12
54.	土居英男、齊藤天菜、奥脇弘次、内藤貴充、 <u>望月祐志</u>	散逸粒子動力学(DPD)シミュレーションのためのプログラム開発と性能評価(*学 54)	第 31 回分子シミュレーション討論会	金沢商工会議所(金沢市)	2017/11
55.	安部友樹也、星健夫、藤田貴敏、 <u>望月祐志</u>	生体模倣高分子系でのエキシトン波束ダイナミクス	第 31 回分子シミュレーション討論会	金沢商工会議所(金沢市)	2017/11
56.	津島悟、 <u>望月祐</u>	ウラニルイオンと DNA の相	極限環境生物学	つくばセンター	2017/11

	<u>志, Andre</u> Rossberg, <u>古明</u> <u>地勇人</u>	相互作用	会	(つくば市)	
57.	清水奏・宮下由里奈・山本雄大・中野祥吾・伊藤創平・沼本修孝・伊倉貞吉・伊藤暢聡・加来田博貴・ <u>常盤広明</u>	パーシャルアゴニストが結合したhRXR $\alpha$ 受容体複合体に関する構造生物学および計算化学的解析	第28回日本レチノイド研究会学術集会	神戸薬科大学(神戸市)	2017/11
58.	中野克洋、権藤匠洋、百武龍一、川端猛夫、 <u>山中正造</u>	<u><math>\alpha\beta\gamma\delta</math>不飽和ケトンを用いた位置選択的</u> <u>aza-Morita-Baylis-Hillman</u> <u>反応に関する理論的解析(*学58)</u>	第10回有機触媒シンポジウム	東北大学(仙台市)	2017/11
59.	川口昌輝、中野克洋、小田木陽、 <u>山中正造</u> 、長澤和夫	<u>グアニジン-ウレア触媒を用いた一置換型1,4-ナフトキノ誘導体に対する不斉エポキシ化反応(*学59)</u>	第10回有機触媒シンポジウム	東北大学(仙台市)	2017/11
60.	熊谷優吾、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	<u>光合成酸素発生中心の仕組みを模倣した単核ルテニウム錯体による酸素発生反応(*学60)</u>	第50回酸化反応討論会	神奈川大学(横浜市)	2017/11
61.	熊谷優吾、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	フェノール部位を導入した単核ルテニウム錯体による水の酸化反応とそのpH依存性	第50回酸化反応討論会	神奈川大学(横浜市)	2017/11
62.	<u>Nakazono, T.</u>	<u>Mechanism of Water Oxidation Catalyzed by Cobalt Porphyrins(*学62)</u> (招待講演)	Cutting-Edge Researches in Coordination Chemistry and Photochemistry	Okazaki Conference Center, (岡崎市)	2017/11
63.	<u>宮部寛志</u>	<u>モーメント理論による分子間相互作用および界面透過現象の速度解析(*学63)</u> (依頼講演)	第37回キャピラリー電気泳動シンポジウム	東北大学(仙台市)	2017/11
64.	<u>Edamoto, K.</u>	Surface electronic structures of transition metal phosphides: Soft X-ray photoelectron spectroscopy and X-ray absorption spectroscopy studies (招待講演)	Progress in Applied Surface, Interface and Thin Film Science – Solar Renewable Energy News V	Florence, (Italy)	2017/11

65.	<u>松下信之</u>	<u>金属錯体と有機アクセプターからなる電荷移動塩の結晶構造と発光特性(*学65)</u>	日本結晶学会平成29年度年会	JMS アステールプラザ(広島市)	2017/11
66.	田中李叶子, 星川晃範, 大原高志, <u>松下信之</u>	遊離プロトンを含む有機カチオンと鉄錯体からなるベイポクロミック電荷移動塩の粉末中性子結晶構造解析	日本結晶学会平成29年度年会	JMS アステールプラザ(広島市)	2017/11
67.	<u>Morimoto, M.</u>	Photochromism and mechanical performance of diarylethene single crystals (招待講演)	The 39th Progress In Electromagnetics Research Symposium (PIERS 2017 in Singapore)	Singapore, (Singapore)	2017/11
68.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>岡田拓巳</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>ナタデココを用いた熱流制御ナノペーパー(*学68)</u>	第38回熱物性シンポジウム	産業技術総合研究所(つくば市)	2017/11
69.	羽鳥仁人・栗野孝昭・大槻哲也・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>岡田拓巳</u> ・ <u>大山秀子</u> ・ <u>長野方星</u>	<u>配向同定システムによるセルロースナノファイバー含有材料の繊維配向評価(*学69)</u>	第38回熱物性シンポジウム	産業技術総合研究所(つくば市)	2017/11
70.	真藤祐二・ <u>大山秀子</u> ・石田恭久	界面制御がコンポジットの熱特性に及ぼす影響について	第26回ポリマー材料フォーラム	大阪国際交流センター	2017/11
71.	<u>大山秀子</u>	非相溶性高分子ブレンドの界面反応と生成する共重合体の多様性 (招待講演)	高分子学会主催 第93回千葉地域活動高分子研究交流講演会	出光会館(千葉県市原市)	2017/11
72.	<u>三井正明</u> , 水上俊成・井上翔太・小林健二	1分子計測による多重極子色素の固体環境下での発光挙動の解明	第36回固体・表面光化学討論会	滋賀県立大学(彦根市)	2017/11
73.	<u>望月祐志</u> , 坂倉耕太, 秋永宜伸, 加藤幸一郎, 渡邊啓正, 沖山佳生, 中野達也, <u>古明地勇人</u> , 奥沢明, <u>福澤薫</u> , 田中成典	<u>FMOプログラム ABINIT-MPの開発状況と機械学習との連携(*学73)</u>	日本コンピュータ化学会 年会: 2017 秋季年会	くまもと県民交流館パレア(熊本市)	2017/10
74.	土居英男, 齊藤天菜, 奥脇弘次, 内藤貴充,	<u>散逸粒子動力学(DPD)プログラム CAMUS の新規開発と性能評価(*学74)</u>	日本コンピュータ化学会 年会: 2017 秋季年会	くまもと県民交流館パレア(熊本市)	2017/10

	<u>望月祐志</u>				
75.	齊藤天菜, <u>望月祐志</u> , 石村和也, 渡邊啓正, 坂倉耕太, 佐藤伸哉, 土居英男	Xeon Phi KNL 環境での MO 計算プログラムの性能評価-その2	日本コンピュータ化学会 年会: 2017 秋季年会	くまもと県民交流館パレア (熊本市)	2017/10
76.	<u>望月祐志</u>	<u>計算化学と機械学習の連携に関する取り組み例</u> ( * 学 76) (依頼講演)	Vinas ユーザー会議 2017	東京コンファレンスセンター (品川区)	2017/10
77.	邊啓正, 坂倉耕太, 佐藤伸哉, <u>望月祐志</u>	ABINIT-MP プログラムの OFP での性能評価 (依頼講演)	第3回 JCAHPC セミナー	東京大学 (柏市)	2017/10
78.	松尾直也・樋口玲爾・中野祥吾・伊藤創平・關文緒・竹田誠・ <u>常盤広明</u>	<u>Rational designs of artificial viral proteins using a novel multiple sequence analysis</u> ( * 学 78)	第 65 回日本ウイルス学会学術集会	大阪国際会議場 (大阪市)	2017/10
79.	清水奏・宮下由里奈・山本雄大・中野祥吾・伊藤創平・沼本修孝・伊倉貞吉・伊藤暢聡・加来田博貴・ <u>常盤広明</u>	<u>RXR<math>\alpha</math>/パーシャルアゴニスト複合体に対する構造生物学および理論化学の融合解析</u> ( * 学 79)	第 35 回メディシナルケミストリーシンポジウム	名古屋大学豊田講堂 (名古屋市)	2017/10
80.	竹田誠・關文緒・ <u>常盤広明</u> ・松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・前仲勝実・高田礼人・丸山正・大石和恵,	<u>学際的ネオウイルス学アプローチによるモルビリウイルスと哺乳動物共進化の解明</u> ( * 学 80)	新学術領域「ネオウイルス学」第 3 回領域班会議	ラフォーレ修善寺 (伊豆市)	2017/10
81.	<u>Yamanaka, M.</u>	<u>The interplay between experiment and computation: Rational design of bis-2-aminothiazoline as a new chiral scaffold</u> ( * 学 81)	The 7th Sino-Japanese Symposium on Organic Chemistry for Young Scientists	Shanghai institute of Organic Chemistry (China)	2017/10
82.	<u>Wada, T</u>	<u>Mechanism of Water Oxidation Catalyzed by Dinuclear Ruthenium Complexes</u> ( * 学 82)	Japan-Italy Bilateral Symposium on Artificial	Tokyo Institute of Technology (Japan)	2017/10

			Phoptosynthesis Using Metal Complexes		
83.	<u>Edamoto, K.</u> ; Motoyama, H.; Sugizaki, Y.; Ozawa, K.	Characterization of Fe <sub>2</sub> P(10 $\bar{1}$ 0): Soft X-ray Photoelectron Spectroscopy Study	The 8 <sup>th</sup> International Symposium on Surface Science	Tsukuba, (Japan)	2017/10
84.	Motoyama, H.; Sugizaki, Y.; <u>Edamoto, K.</u> ; Ozawa, K	Evolution of the c(2×2) structure on Fe <sub>2</sub> P(10 $\bar{1}$ 0) induced by P segregation	The 8 <sup>th</sup> International Symposium on Surface Science	Tsukuba, (Japan)	2017/10
85.	Sugizaki, Y.; Motoyama, H.; <u>Edamoto, K.</u>	The electronic structure of a (1×1) VO on Ag(100) using soft X-ray photoelectron spectroscopy	The 8 <sup>th</sup> International Symposium on Surface Science	Tsukuba, (Japan)	2017/10
86.	三井伸也, BURKE David, 田代省平, <u>松下信之</u> , 塩谷光彦	ハロゲン配位子が異なる同形の環状三核 Pd(II)錯体集積型多孔性結晶を用いたコア/シェル型複合結晶の合成と細孔ハイブリッド化	第7回 CSJ 化学フェスタ 2017	タウンホール船堀(江戸川区)	2017/10
87.	渡邊誠一郎、 <u>新堀佳紀</u> 、小山祐樹、根岸雄一	逆相高速液体クロマトグラフィーによる合金クラスターの原子精度精密分離とその電子構造の解明	第7回 CSJ 化学フェスタ 2017	タウンホール船堀(江戸川区)	2017/10
88.	高木隼次郎、Lakshmi V. Nair, Sakiat Hossain、若山彰太、 <u>新堀佳紀</u> 、藏重亘、根岸雄一	白金クラスター (Pt <sub>17</sub> (CO) <sub>12</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>8</sub> ) の精密合成とその電子・幾何構造の解明	第7回 CSJ 化学フェスタ 2017	タウンホール船堀(江戸川区)	2017/10
89.	吉田佳奈、 <u>新堀佳紀</u> 、島大佑、根岸雄一	種々の親水性チオラート保護金クラスターの精密分離と化学組成分布の評価	第7回 CSJ 化学フェスタ 2017	タウンホール船堀(江戸川区)	2017/10
90.	<u>Uetani, K.</u> , Okada, T., <u>Oyama, H. T.</u>	<u>Thermally Conductive Cellulose Nanopapers</u> ( * 学 90)	The 4th International Cellulose Conference ICC2017	Kyushu University (Japan)	2017/10
91.	<u>上谷幸治郎</u>	木材細胞壁に学ぶ機能性伝熱材料の開発 (招待講演)	積水化学自然に学ぶものづくりフォーラム 2017	イイノホール&カンファレンスセンター (千代田区)	2017/10

92.	奥脇弘次, 土居英男, <u>望月祐志</u> , 小沢拓, 泰岡顕治	<u>FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用(*学92)</u>	高分子材料のマルチスケールシミュレーションフロントィア	湘南国際村センター (三浦郡)	2017/9
93.	津島悟, <u>望月祐志</u> , <u>古明地勇人</u> , 阿部鷹也, 奥脇弘次, 森寛敏, 田中成典	Ca(II)および Eu(III)が結合したカルモデュリンの動的挙動の理論的解析	第78回応用物理学会秋期学術講演会	福岡国際会議場 (福岡市)	2017/9
94.	星健夫, 安部友樹也, 大平健太郎, 福島孝治, 藤田貴敏, <u>望月祐志</u>	<u>大規模電子状態計算とデータ科学による有機デバイス材料研究(*学94)</u>	第78回応用物理学会秋期学術講演会	福岡国際会議場 (福岡市)	2017/9
95.	奥脇弘次, 土居英男, <u>望月祐志</u> , 新庄永治, <u>福澤薫</u> , 米持悦生, 小沢拓, 泰岡顕治	<u>FMO-DPD 連携シミュレーション手法の開発とベシクル形成への応用(*学95)</u>	第78回応用物理学会秋期学術講演会	福岡国際会議場 (福岡市)	2017/9
96.	<u>望月祐志</u> , 渡邊啓正, 坂倉耕太, 佐藤伸哉	OakForest-PACS 上での FMO 計算プログラム ABINIT-MP のパフォーマンス (依頼講演)	ポスト「京」重点課題⑥・⑧ HPC ものづくり統合ワークショップ	東京大学 (目黒区)	2017/9
97.	津島悟, <u>望月祐志</u> , <u>古明地勇人</u> , 鷹尾康一郎	Eu(III)とカルモデュリンの相互作用についての計算化学的研究	日本原子力学会 2017 秋の大会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
98.	Yamamoto, Y., Sladek, V., Takei, K., Nakagawa, Y., Shimano, H., <u>Tokiwa, H.</u>	IN SILICO BINDING ANALYSIS OF NOVEL SEECTIVE PEROXISOME PROLIFERATOR-ACTIVATED RECEPTOR $\alpha$ MODULATORS (SPPARM $\alpha$ )	The 11 <sup>th</sup> European Conference on Theoretical and Computational Chemistry EUCCO-TCC	Barcelona, (Spain)	2017/9
99.	Sladek, V., Yamamoto, Y., Takei, K., Nakagawa, Y., Shimano, H., <u>Tokiwa, H.</u>	IN SILICO BINDING ANALYSIS OF PGC-1 $\alpha$ INTERACTION WITH PEROXISOME PROLIFERATOR-ACTIVATED RECEPTOR $\alpha$ MODULATORS	The 11 <sup>th</sup> European Conference on Theoretical and Computational Chemistry EUCCO-TCC	Barcelona, (Spain)	2017/9
100.	Matsuo, N.,	Elucidating coevolution	The 16th Awaji	Kobe,	2017/9

	Nakano, S., Ito, S., Seki, F., Takeda, M., <u>Tokiwa, H.</u>	mechanism of morbillivirus with mammals using the fourth revolutionary method based on a novel protein multiple sequence method	International Forum on Infection and Immunity	(Japan)	
101.	<u>望月祐志, 古明地勇人, 齊藤天菜, 藤本真悠, 飯島潤, 阿部鷹也, 奥脇弘次, 土居英男, 奥沢明, 牧村健, 中西貴哉, 福澤薫, 田中成典</u>	<u>FMO 計算結果の機械学習による解析(*学 101)</u>	第 11 回分子科学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
102.	奥脇弘次, 土居英男, <u>望月祐志</u> , 小沢拓, 泰岡顕治	<u>FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用(*学 102)</u>	第 11 回分子科学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
103.	山中詩織・ <u>新堀佳紀</u> ・ <u>三井正明</u>	CsPbI <sub>3</sub> ナノ結晶凝集体の発光プリンキングと光子アンチバンチング挙動	第 11 回分子科学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
104.	小山祐樹、渡邊誠一郎、 <u>新堀佳紀</u> 、根岸雄一	チオラート保護合金クラスターにおける異性化反応の原子精度での観測: 高分解能化された逆相高速液体クロマトグラフィーの活用	第 11 回分子科学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
105.	島大佑、吉田佳奈、 <u>新堀佳紀</u> 、根岸雄一	LC/MS を用いた親水性金および合金クラスターの高分解能分離と評価	第 11 回分子科学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
106.	石川雄太郎, 奥脇弘次, 土居英男, <u>望月祐志</u> , 佐藤弘一	<u>タイヤゴム素材に関する計算化学的研究(*学 106)</u>	第 66 回高分子討論会	愛媛大学 (松山市)	2017/9
107.	根岸雄一、小山祐樹、島大佑、渡邊誠一郎、吉田佳奈、 <u>新堀佳紀</u>	逆相高速液体クロマトグラフィーを駆使した金属ナノクラスターの原子精度精密分離	第 66 回高分子討論会	愛媛大学 (松山市)	2017/9
108.	小山祐樹、渡邊誠一郎、 <u>新堀佳紀</u> 、根岸雄一	高速液体クロマトグラフィーを駆使した二成分金属クラスターの精密分離および物性解明	第 66 回高分子討論会	愛媛大学 (松山市)	2017/9
109.	島大佑、吉田佳	LC/MS の導入による親水性	第 66 回高分子討	愛媛大学	2017/9

	奈、 <u>新堀佳紀</u> 、 <u>根岸雄一</u>	チオラート保護金クラスターの高分解能分離と組成分布評価	論会	(松山市)	
110.	松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・關文緒・竹田誠・ <u>常盤広明</u>	<u>第四次革新的手法に基づく宿主動物およびウイルスの共進化メカニズムの解明</u> (*学 110)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9
111.	宮下由里奈・山本雄大・中野祥吾・伊藤創平・沼本修孝・伊倉貞吉・伊藤暢聡・関谷元博・島野仁・ <u>常盤広明</u>	<u>NADH 依存型脂質代謝関連タンパク質の相互作用解析</u> (*学 111)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9
112.	清水奏・宮下由里奈・山本雄大・中野祥吾・伊藤創平・沼本修孝・伊倉貞吉・伊藤暢聡・加来田博貴・島野仁・ <u>常盤広明</u>	<u>レチノイド X 受容体とパーシヤルアゴニストに関する相互作用解析</u> (*学 112)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9
113.	増田匠吾・松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・ <u>常盤広明</u>	<u>レクチン/糖鎖複合体に対する高精度第一原理計算の適用</u> (*学 113)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9
114.	樋口玲爾・松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・ <u>常盤広明</u>	<u>新規アミノ酸配列解析手法を用いたインフルエンザ HA 様人工タンパク質の理論的設計</u> (*学 114)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9
115.	松田留理子・山本雄大・Sundaram Arulmozhiraja・Vladimir Sladek・中野祥吾・伊藤創平・島野仁・ <u>常盤広明</u>	<u>脂肪酸の鎖長の違いに着目したヘテロ組成細胞膜モデルの構築</u> (*学 115)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9
116.	小山実穂・宮下由里奈・Vladimir	<u>生活習慣病標的タンパク質複合体に対する結合解析</u> (*学 116)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9

	Sladek・山本雄大・松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・沼本修孝・伊倉貞吉・伊藤暢聡・島野仁・ <u>常盤広明</u>				
117.	石川雄規・山本雄大・松尾直也・津吹政可・加藤大志・竹田誠・ <u>常盤広明</u>	<u>ウイルス表面タンパク質と新規抗ウイルス薬候補化合物との理論的相互作用解析</u> (*学 117) (優秀発表賞受賞)	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学薬学部(港区)	2017/9
118.	伊藤匡史・松尾直也・加来田博貴・ <u>常盤広明</u>	位置異性体間で生じるレチノイド X 受容体に対するアゴニスト活性の違いに関する理論的解析	第 61 回日本薬学会関東支部大会	慶応義塾大学(港区)	2017/9
119.	齋藤義紀、岡本育子、市原麻由、高島由利子、田邊沙也子、青山奈央、清水杏菜、渡辺静、張 寧寧、龔 洵、花井亮、通 元夫、 <u>黒田智明</u>	中国雲南省産香格里拉天池産 <i>Ligularia</i> 雑種の化学成分と ITS 塩基配列	第 59 回天然有機化合物討論会	札幌市民ホール(札幌市)	2017/9
120.	<u>黒田智明</u> 、稲垣航、岡本育子、通 元夫、花井亮、山田ひろか、永野 肇、龔 洵、	中国雲南省産 <i>Ligularia oligonema</i> のフラノエレモフィラン成分	第 61 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	金沢工業大学(野々市市)	2017/9
121.	齋藤義紀、日高基貴、福田あかね、岡本育子、中島勝幸、通 元夫、花井亮、龔 洵、渡邊永治、 <u>黒田智明</u>	中国四川省産 <i>Ligularia lamarum</i> のケモタイプと交雑	第 61 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	金沢工業大学(野々市市)	2017/9
122.	八百板康範、岡本育子、花井	中国雲南省産 <i>Ligularia vellerea</i> と <i>L. subspicata</i> の交	第 61 回香料テルペンおよび精油	金沢工業大学(野々市市)	2017/9

	亮、 <u>黒田智明</u> 、 <u>龔 洵</u>	雑種の LC/MS メタボローム解析	化学に関する討論会		
123.	福島裕貴、池上大輔、 <u>黒田智明</u>	$\omega$ -ホルミルアリルシランの水 中閉環反応における立体化学	第 61 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	金沢工業大学 (野々市市)	2017/9
124.	通 元夫、藤原美保、汐崎優子、齋藤義紀、中島勝幸、岡本育子、龔 洵、花井 亮、 <u>黒田智明</u>	中国産 <i>Ligularia hookeri</i> の化学成分	第 61 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	金沢工業大学 (野々市市)	2017/9
125.	渡邊大祐、加藤隆大、廣田洋、龔 洵、 <u>黒田智明</u> 、大崎愛弓	<i>Ligularia cymbulifera</i> の成分探索”	第 61 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	金沢工業大学 (野々市市)	2017/9
126.	齋藤義紀、市原麻由、高島由利子、岡本育子、龔 洵、花井 亮、 <u>黒田智明</u> 、通 元夫	中国雲南省産 <i>Ligularia cyathiceps</i> と <i>L. lamarum</i> / <i>L. subspicata</i> との雑種の化学成分	第 61 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	金沢工業大学 (野々市市)	2017/9
127.	有馬弘晃、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	<u>アントラセン、キサントン及びアントラキノンで架橋された二核コバルト錯体触媒による酸素還元反応における架橋配位子の影響(* 学 127)</u>	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
128.	小岩井茜、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	<u>プロトン解離可能なビイミダゾールを二座配位子とした二核ルテニウム錯体による電気化学的水の酸化反応(* 学 128)</u>	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
129.	Miyazato, Y.; <u>Wada, T</u>	Preparation and Characterization of Pyrophosphate-Bridged Diiron Complexes"	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
130.	<u>Nakazono, T.</u> ; <u>Wada, T.</u> ; Gewirth, A.; Sakai, K.	<u>Mechanistic Studies of Water Oxidation Reactions Catalyzed by Cobalt Tetraphenylporphyrins and</u>	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9

		The Derivatives(*学 130)			
131.	熊谷優吾、 <u>中藺孝志</u> 、 <u>和田亨</u>	光合成酸素発生中心の仕組みを模倣した単核ルテニウム錯体の合成とその酸化還元挙動の検討(*学 131)	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
132.	田中李叶子、 <u>松下信之</u>	分子骨格の異なるビオロゲンと鉄錯体からなる電荷移動塩の結晶構造比較	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
133.	品川裕作、 <u>松下信之</u>	テトラシアニドパラジウム錯体と極性基を含む有機アクセプターからなる電荷移動塩の結晶構造と二色性および発光特性(*学 133)	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
134.	白井大貴、重永海帆、 <u>松下信之</u>	ハロゲン架橋一次元白金錯体長鎖アルカンスルホン酸塩における混合原子価状態と分子ファスナー効果	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
135.	割石寛之、佐久間嶺央、浦上弥生、大川紫穂、 <u>松下信之</u>	<i>o</i> -フェニレンジアミン誘導体を配位子源とした新規レドックス活性白金(II)錯体の合成	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
136.	三井伸也、田代省平、BURKE David、 <u>松下信之</u> 、塩谷光彦	Pd <sup>II</sup> マクロサイクル集積型コア-シェル結晶細孔内への色素分子の取り込みとその挙動	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
137.	渡邊誠一郎、 <u>新堀佳紀</u> 、小山祐樹、根岸 雄一	逆相高速液体クロマトグラフィーを用いた 10, 11, 12 族ドープ合金クラスターの高分解能分離とその電子構造の解明	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
138.	吉田佳奈、 <u>新堀佳紀</u> 、島大佑、根岸雄一	親水性相互作用クロマトグラフィーを駆使した親水性チオラート保護金クラスターの精密分離と組成分布解析	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
139.	高木隼次郎、Lakshmi V. Nair, Sakiat Hossain、若山彰太、 <u>新堀佳紀</u> 、藏重亘、根岸雄一	白金クラスター (Pt <sub>17</sub> (CO) <sub>12</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>8</sub> ) の精密合成とその電子・幾何構造の解明	錯体化学会第 67 回討論会	北海道大学 (札幌市)	2017/9
140.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>鈴木望</u> ・ <u>島崎裕紀</u>	モーメント理論ーアフィニティキャピラリー電気泳動法による	第 34 回シクロデキストリンシンポ	愛知学院大学 (名古屋市)	2017/9

		る分子間相互作用の速度解析(*学 140)	ジウム		
141.	<u>宮部寛志・鈴木望</u>	界面活性剤ミセル界面における溶質透過の速度解析(*学 141)	第 68 回コロイドおよび界面化学討論会	神戸大学 (神戸市)	2017/9
142.	高木隼次郎、 Lakshmi V. Nair, Sakiat Hossain、若山彰 太、 <u>新堀佳紀</u> 、 藏重亘、根岸雄 一	白金クラスター (Pt <sub>17</sub> (CO) <sub>12</sub> (PPh <sub>3</sub> ) <sub>8</sub> )の精密合成とその電子・幾何構造の 解明	第 68 回コロイド および界面化学 討論会	神戸大学 (神戸市)	2017/9
143.	<u>宮部寛志・鈴木望</u> ・渡辺寿	モーメント解析ー導電クロマトグラフィー(MA-EKC)による界面活性剤ミセル界面における溶質透過の速度解析(*学 143)	日本分析化学会 第 66 年会	東京理科大学 (葛飾区)	2017/9
144.	根岸雄一、小山 祐樹、島大佑、 渡邊誠一郎、吉 田佳奈、 <u>新堀佳紀</u>	逆相高速液体クロマトグラフィーを駆使した金属ナノクラスターの原子精度精密分離	日本分析化学会 第 66 年会	東京理科大学 (葛飾区)	2017/9
145.	小山祐樹、渡邊 誠一郎、 <u>新堀佳紀</u> 、 根岸雄一	高速液体クロマトグラフィーを駆使した合金クラスターの化学組成制御技術の開発	日本分析化学会 第 66 年会	東京理科大学 (葛飾区)	2017/9
146.	島大佑、吉田佳 奈、 <u>新堀佳紀</u> 、 根岸雄一	親水性相互作用クロマトグラフィーを用いた LC/MS による親水性金クラスターの組成分布評価	日本分析化学会 第 66 年会	東京理科大学 (葛飾区)	2017/9
147.	<u>Miyabe, K.;</u> <u>Suzuki, N.;</u> Shimazaki, Y.; Takahashi, R.	<u>Kinetic Study of Solute Permeation at Interfacial Boundary of Surfactant Micelles by Moment Analysis - Chromatographic Capillary Electrophoresis</u> (*学 147)	23rd International Symposium on Separation Sciences (ISSS2017),	Vienna, (Austria)	2017/9
148.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	<u>安定なテトラアルキルジシレンの合成と構造</u> (*学 148)	第 28 回基礎有機化学討論会	九州大学 (福岡市)	2017/9
149.	西野龍平・ <u>箕浦真生</u>	<u>初めての安定なアルキル置換ジスチベンの合成</u> (*学 149)	第 28 回基礎有機化学討論会	九州大学 (福岡市)	2017/9
150.	神作八起、 <u>鈴木望</u> 、藤木道也、 <u>山中正浩</u>	Handedness and Wavelength Tunable Circularly Polarized Luminescence of Hydrogen-B	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9

		onded Chiral Bisamidine Supramolecular Assembly			
151.	片山哲郎・木下賢・上本健太・碓井悠大・柴山大樹・奥畑智貴・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u> ・玉井尚登	フェムト秒過渡吸収分光法を用いた半導体ナノ粒子-フォトクロミック分子系の励起子ダイナミクス	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
152.	檜原遼太・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・伊都将司・宮坂博・ <u>入江正造</u>	単一可視光源によるジアリアルエテン蛍光の可逆光スイッチ	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
153.	瀬戸浦健仁・メモン・ムルタザ・光石杜朗・伊都将司・阿部二郎・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u> ・宮坂博	Reversible switching of radiation force acting on optically-trapped microparticles induced by photochromic reactions	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
154.	藤田己・新井悠平・伊都将司・米田勇佑・梶貴博・竹井敏・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u> ・宮坂博	ジアリアルエテン誘導体の単一波長蛍光スイッチング: 機構と応用	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
155.	木下賢・上本健太・碓井悠大・片山哲郎・玉井尚登・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	半導体量子ドット-ジアリアルエテン系の励起子ダイナミクスに及ぼす配位子効果と発光スイッチング	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
156.	碓井悠大・木下賢・上本健太・片山哲郎・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u> ・玉井尚登	半導体ナノプレートレットの合成とジアリアルエテン誘導体による発光制御	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
157.	上本健太・木下賢・碓井悠大・片山哲郎・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u> ・玉井尚登	CdTe 量子ドット-ジアリアルエテンハイブリッド系の励起子ダイナミクスと吸着数依存性	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
158.	長坂龍洋・五月	フェムト秒 2 光子励起による	2017 年光化学討論会	東北大学	2017/9

	<u>女光・森本正和・入江正浩</u> ・宮坂博	蛍光性ジアリールエテン誘導体の開環反応ダイナミクス	論会	(仙台市)	
159.	高須翔也・須見貴樹・ <u>森本正和・入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテンの光反応量子収率に対する反応点置換基の効果	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
160.	中込湧士郎・井上 翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	D- $\pi$ -A 構造を有するスターバースト色素を用いた色素増感太陽電池	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
161.	水上俊成・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	“D- $\pi$ -A- $\pi$ -D 型四重極子色素の単一分子分光 : 発光特性に対する環境とコンフォメーションの影響	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
162.	斎藤祐太・ <u>三井正明</u>	有機無機ペロブスカイト太陽電池の光電流-発光顕微計測	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
163.	高橋遼・小林令奈・森京介・ <u>三井正明</u>	MK-2 色素を用いた色素増感太陽電池のレーザー走査光電流-発光顕微計測	2017 年光化学討論会	東北大学 (仙台市)	2017/9
164.	<u>森本正和</u>	フォトクロミック分子・分子結晶の光反応と物性 (招待講演)	日本物理学会 2017 年秋季大会	岩手大学 (盛岡市)	2017/9
165.	<u>上谷幸治郎</u> ・岡田拓巳・ <u>大山秀子</u>	天然セルロースの伝熱における結晶子サイズ効果と熱流制御材料 (* 学 165)	第 78 回応用物理学会秋期学術講演会	福岡国際会議場 (福岡市)	2017/9
166.	<u>上谷幸治郎</u> ・岡田拓巳・ <u>大山秀子</u>	高結晶性ナノセルロース集積体における伝熱機構と熱輸送制御性 (* 学 166)	第 66 回高分子討論会	愛媛大学 (松山市)	2017/9
167.	Yamamoto, Y., Sladek, V., Arulmozhiraja, S., Hayamizu, K., Nakano, S., Ito, S., Watanabe, Y., Yamada, S., <u>Tokiwa, H.</u>	Molecular basis of ligand interaction of GPR40/GPR120 based on FMO calculations with multiple sequence analysis	11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017)	Munich, (Germany)	2017/8
168.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	<u>Synthesis of a Stable Disilene Having Bulky CH<sub>2</sub> Substituents on the Si=Si Double Bond</u> (* 学 168)	The 18th International Symposium on Silicon Chemistry in conjunction	Shandong University (China)	2017/8

			with the 6th Asian Silicon Symposium		
169.	<u>Edamoto, K.</u>	<u>Growth of ultrathin titanium oxide films on Ag surfaces( * 学 169)</u>	Energy Materials Nanotechnology Meeting on Titanium Oxides 2017	Lyon, (France)	2017/8
170.	杉崎裕一、本山 寛大、 <u>枝元一 之</u> 、小澤健一	Ag(100)上における(1×1)VO の電子状態	第 37 回表面科学 学術講演会	横浜市立大学 (横浜市)	2017/8
171.	本山寛大、杉崎 裕一、 <u>枝元一 之</u> 、小澤健一	複合表面分析法による Fe <sub>2</sub> P(10-10)面のキャラクタリ ゼーション	第 37 回表面科学 学術講演会	横浜市立大学 (横浜市)	2017/8
172.	<u>上谷幸治郎</u> ・岡 田拓巳・ <u>大山秀 子</u>	セルロースナノペーパーにお ける構造依存的伝熱特性	第 84 回紙パルプ 研究発表会	東京大学 (文京区)	2017/8
173.	<u>Oyama H. T.</u> ; Nakamura, Y.; Ogawa, R.	<u>Effects of high-order structure of poly(L-lactic acid) blend monoliths on their hydrolytic degradation( * 学 173)</u>	The 254th America Chemical Society National Meeting & Exposition	Washington, DC (USA)	2017/8
174.	S. Tsushima, S. Samsonov, B.Drobot, J. Raff, <u>Y. Komeiji</u> , <u>Y. Mochizuki</u> , Actinides	Site-specific binding affinity of Eu(III) towards Ca-binding protein calmodulin: A combined spectroscopic and theoretical study	Actinides 2017 Conf	Sendai, (Japan)	2017/7
175.	松尾直也・樋口 玲爾・中野祥 吾・伊藤創平・ <u>常盤広明</u>	<u>第四次革新的手法を用いた インフルエンザ HA 様人工タ ンパク質の理論設計( * 学 175)</u>	創薬懇話会 2017 in 加賀	瑠璃光 (加賀市)	2017/7
176.	小山実穂・宮下 由里奈・松田瑠 璃子・清水奏・ 島野仁・ <u>常盤広 明</u>	<u>新規高脂血症治療薬の高精 度 in silico 解析( * 学 176)</u>	創薬懇話会 2017 in 加賀	瑠璃光 (加賀市)	2017/7
177.	山本雄大・石川 雄規・伊藤匡 史・松尾直也・ 竹田誠・ <u>常盤広 明</u>	<u>高精度第一原理計算を用い た構造未知たんぱく質を標 的とした合理的創薬手法の 開発と抗ウイルス薬への応 用( * 学 177)</u>	創薬懇話会 2017 in 加賀	瑠璃光 (加賀市)	2017/7

178.	Kansaku, Y.; <u>Suzuki, N.</u> ; Fujiki, M.; <u>Yamanaka, M.</u>	Handedness and Wavelength Tunable Circularly Polarized Luminescence of Hydrogen-Bonded Chiral Bisamidine Supramolecular Assembly	29th International Symposium on Chirality	Waseda University (Japan)	2017/9
179.	<u>Nakazono, T.</u> ; Sakai, K.; <u>Wada, T.</u>	<u>Photochemical and Electrochemical Oxygen Evolution Reactions Catalyzed by Cobalt Porphyrins</u> ( * 学 179)	T. 6th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC6)	Melbolne, (Australia)	2017/7
180.	<u>箕浦真生</u>	What we talk about when we talk about love –Chemistry and Crystals (招待講演)	第 52 回有機反応若手の会	涼風荘 (津市)	2017/7
181.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>岡田拓巳</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>ナノセルロース集積体の伝熱異方性と熱流制御材料</u> ( * 学 181)	第 24 回セルロース学会年次大会	岐阜大学 (岐阜市)	2017/7
182.	齊藤天菜, <u>望月祐志</u> , 石村和也, 渡邊啓正, 坂倉耕太, 佐藤伸哉	Xeon Phi KNL 環境での MO 計算プログラムの性能評価	日本コンピュータ化学会 2017 年春季年会	東京工業大学 (目黒区)	2017/6
183.	Nishino, R.; <u>Minoura, M.</u>	<u>Synthesis and Reductive Coupling Reaction of a Dichlorostibine Bearing Extended Triptycyl Group</u> ( * 学 183)	12th International Conference on Heteroatom Chemistry	Vancouver, (Canada)	2017/6
184.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	<u>Synthesis and Reaction of A Stable Disilene Bearing Triptycylmethyl Frameworks</u> ( * 学 184 )	12th International Conference on Heteroatom Chemistry	Vancouver, (Canada)	2017/6
185.	Saito, M.; Furukawa, S.; Fujita, M.; Suzuki, T.; Kanatomi, Y.; <u>Minoura, M.</u> ; Hatanaka, M.; Morokuma, K.; Ishimura, K.	Double Aromaticity in a Hexaselanylbenzene Dication	12th International Conference on Heteroatom Chemistry	Vancouver, (Canada)	2017/6
186.	<u>鈴木望</u> ・木下真理子・渡邊寿・ <u>宮部寛志</u>	キャピラリー電気泳動法を利用する分子間相互作用の速度解析	第 15 回ホスト・ゲスト・超分子化学シンポジウム	立命館大学 (草津市)	2017/6

			(SHGSC2017),		
187.	<u>Matsushita, N.</u>	<u>Luminescent charge-transfer salts composed of tetracyanidoplatinate(II) and viologens</u> ( * 学 187)	The International Symposium on Pure & Applied Chemistry 2017, Invited Talk	Ho Chi Minh, (Vietnam)	2017/6
188.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>岡田拓巳</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>面内異方性を持つ伝熱セルロースナノペーパー</u> ( * 学 188) (若手優秀発表賞受賞)	平成 29 年度繊維学会年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2017/6
189.	<u>渡邊和浩</u> ・ <u>大山秀子</u> ・ <u>奈良早織</u> ・ <u>西田卓哉</u> ・ <u>田中幸治</u>	<u>ポリフェニレンスルフィドの熔融結晶化温度の制御</u> (優秀ポスター賞受賞)	第 28 回プラスチック成形加工学会年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2017/6
190.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>岡田拓巳</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>セルロースナノペーパーにおける構造依存的伝熱特性</u> ( * 学 190) (若手優秀発表賞口頭発表部門受賞)	第 84 回紙パルプ研究発表会	東京大学 (文京区)	2017/6
191.	<u>大山秀子</u>	<u>ポリフェニレンスルフィドの熔融結晶化温度の自由制御</u> (招待講演)	第 55 回高分子材料自由討論会	ブリヂストン奥多摩園 (青梅市)	2017/6
192.	<u>上谷幸治郎</u>	<u>天然ナノ繊維の流動場制御による高指向性伝熱特性の発現</u> (招待講演)	第 6 回新化学技術研究奨励賞受賞講演	新化学技術推進協会 (千代田区)	2017/6
193.	<u>上谷幸治郎</u>	<u>表面協奏的制御法による異方性ナノコロイドの秩序構造発現</u> (招待講演)	平成 28 年度助成研究発表交流会	花王 芸術・科学財団 (中央区)	2017/6
194.	<u>上谷幸治郎</u>	<u>セルロースナノファイバーの新規伝熱特性と応用可能性</u> (招待講演)	CMC リサーチセミナー	ちよだプラットフォームスクウェア (千代田区)	2017/6
195.	<u>奥脇弘次</u> , <u>土居英男</u> , <u>望月祐志</u> , <u>小沢拓</u> , <u>泰岡顕治</u>	<u>FMO 計算に基づくマルチスケールシミュレーション手法の開発と先導的応用</u> ( * 学 195)	理論化学討論会	京都大学 (京都市)	2017/5
196.	<u>石川雄太郎</u> , <u>奥脇弘次</u> , <u>土居英男</u> , <u>望月祐志</u> , <u>佐藤弘一</u>	<u>タイヤゴム素材に関する計算化学的研究</u> ( * 学 196)	日本ゴム協会 2017 年年次大会	名古屋市中小企業振興会館 (名古屋市)	2017/5
197.	Matsuo, N.,	Rational drug design of	6th FIP	Stockholm,	2017/5

	Miyashita, Y., Nakano, S., Ito S., von Itzstein, M., <u>Tokiwa, H.</u>	antiviral compounds using a novel in silico approach combining quantum chemistry and bioinformatics	Pharmaceutical Sciences World Congress 2017	(Sweden)	
198.	Miyashita, Y., Takei, K., Sladek, V., Nakano S., Ito, S., Matsuzaka, T., Sekiya, M., Nakagawa, Y., <u>Tokiwa, H.</u> , Shimano, H.	Molecular association model of Peroxisome Proliferator-Activated Receptor $\alpha$ and its new specific and efficient ligand, K-877	6th FIP Pharmaceutical Sciences World Congress 2017	Stockholm, (Sweden)	2017/5
199.	<u>山中正浩</u> 、 <u>岸信孝</u>	<u>亜鉛(II)-ビスアミジン触媒による<math>\alpha</math>ケトエステルの不斉向山アルドール反応と官能基選択性制御(*学199)</u>	第73回有機合成化学協会関東支部シンポジウム	学習院大学(豊島区)	2017/5
200.	<u>神作八起</u> 、 <u>鈴木望</u> 、 <u>藤木道也</u> 、 <u>山中正浩</u>	アキラル色素-キラルビスアミジン超分子が示す溶液中における円二色性(CD)および円偏光発光(CPL)特性	第73回有機合成化学協会関東支部シンポジウム	学習院大学(豊島区)	2017/5
201.	<u>渡邊和浩</u> ・ <u>大山秀子</u> ・ <u>奈良早織</u> ・ <u>西田卓哉</u> ・ <u>田中幸治</u>	PPS/PVP ブレンドにおける結晶化挙動の解明	第66回高分子学会年次大会	幕張メッセ(千葉市)	2017/5
202.	<u>山中詩織</u> ・ <u>三井正明</u>	CsPbI <sub>3</sub> ナノ結晶の単一粒子および凝集体の発光挙動	ナノ学会第15回大会	北海道立道民活動センターかでの(札幌市)	2017/5
203.	<u>吉田佳奈</u> 、 <u>新堀佳紀</u> 、 <u>島大祐</u> 、 <u>根岸雄一</u>	親水性相互作用クロマトグラフィーによる親水性チオラート保護金クラスターのサイズ分離とその化学組成分布の評価	ナノ学会第15回大会	北海道立道民活動センターかでの(札幌市)	2017/5
204.	<u>渡邊誠一郎</u> 、 <u>新堀佳紀</u> 、 <u>小山祐樹</u> 、 <u>根岸雄一</u>	逆相高速液体クロマトグラフィーを用いた 10, 11, 12 族ドープ合金クラスターの高分解能分離とその電子構造の解明	ナノ学会第15回大会	北海道立道民活動センターかでの(札幌市)	2017/5
205.	<u>望月祐志</u> 、 <u>中村昇太</u> 、 <u>山中正</u>	化学・生命科学系の理学教育における3Dプリントモデル	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3

	浩, 山田康之, 工藤光子, 常盤 広明, 川上勝, 北本俊二,	の事例紹介			
206.	奥脇弘次, 川田 修太郎, 望月祐 志, 小沢拓, 土 居英男, 泰岡顕 治	フラグメント分子軌道計算に 基づく高分子粗視化シミュレ ーションパラメータの算定(* 学 206)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
207.	土居英男, 奥脇 弘次, 望月祐 志, 小沢拓, 泰 岡顕治	フラグメント分子軌道計算に 基づく非経験的パラメータを 用いた生体膜の粗視化シミュ レーション	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
208.	佐藤真, 山中正 浩	スピロキラルイミノホスホラン 触媒によるアズラクトンとプロ ピオール酸メチルのマイケル反 応の理論的解析(*学 208)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
209.	中野克洋, 権藤 匠洋, 百武龍 一, 川端猛夫, 山中正浩	$\alpha\beta\gamma\delta$ 不飽和ケトンを用い た位置選択的 aza-Morita-BaylisHillman 反 応に関する理論的研究(*学 209)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
210.	亀井優斗, 長尾 芳大, 川戸勇 士, 濱島義孝, 山中正浩	DTBM-BINAP モノオキシド を用いたアリルアミドの不斉 プロモ環化反応に関する理 論的研究(*学 210)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
211.	倉澤香澄, 山中 正浩	金属ビスアミジン触媒を用い た $\alpha$ ケトエステルの不斉ピニ ロガス向山アルドール反応 の開発(*学 211)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
212.	岡直輝, 市之瀬 篤, 海津溪介, 山中正浩	エナンチオスイッチングを発 現する $\alpha$ -ケトエステルの不斉 ヒドロホスホニル化反応(* 学 212)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
213.	神作八起, 鈴木 望, 藤木道也, 山中正浩	キラルビスアミジンとアキラ ル色素で構成される水素結 合錯体の溶液中における円 偏光蛍光特性(*学 213)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
214.	児玉智, 山中正 浩, 和田亨	“6,6'-ジアミジノ-2,2'-ビピリジ ンを配位子(*学 210)とする Ru(II)錯体の合成と酸化還 元挙動	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
215.	高橋侑希, 山中	柔軟な短鎖ペプチド部位を	日本化学会第 97	慶應義塾大学	2017/3

	<u>正浩</u>	有する2,2'-ビピリジン型不斉配位子の開発	春季年会	(港北区)	
216.	山本絵莉、 <u>山中正浩</u>	リン酸-ボラン触媒を用いた $\alpha$ $\beta$ 不飽和ケトンの不斉1,4-還元反応における3,3'-位置換基効果	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
217.	<u>黒田智明</u> 、稲垣航、岡本育子、通元夫、花井亮、龔洵	中国産雲南省産 <i>Ligularia oligonema</i> における試料間の成分の違い	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
218.	小林怜莉、紅林冴佳、鷺尾絢子、増田有沙、武内涼、 <u>黒田智明</u>	アミノマロノニトリルのベンジル化によるフェニルアラニンの合成研究	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
219.	Koiwai, A.; <u>Wada. T.</u>	<u>Synthesis and Redox Property of a Dinuclear Ruthenium Complex with Biimidazol</u> ( *学 219)	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
220.	Ando, T.; <u>Wada. T.</u>	<u>Water Oxidation Catalyzed by Ruthenium Complexes with a Bidentate Ligand Capable of Protonation and Deprotonation</u> ( *学 220)	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
221.	Kumagai, Y.; <u>Wada. T.</u>	<u>Synthesis and Redox Property of a Mono-nuclear Ruthenium Complex Containing an Intermolecular Hydrogen Bond</u> ( *学 221)	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
222.	Ojima, T.; <u>Wada. T.</u>	Synthesis of bis(bipyridylphenyl)anthracene (bbpan) as a novel bridging ligand and redox properties of dinuclear ruthenium complex bridged by bbpan	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
223.	Tanaka, E.; <u>Wada. T.</u>	Proton reduction catalyzed by a platinum complex with 1,4,7-triazacyclononane	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3
224.	Arima, H.; <u>Wada. T.</u>	<u>Oxygen reduction catalyzed by a dinuclear cobalt complex bridged by bis(terpyridyl)anthraquinone</u> ( *学 224)	日本化学会第97春季年会	慶應義塾大学(港北区)	2017/3

225.	宮里裕二、今泉航太、田中李叶子、 <u>和田亨</u> 、松下信之	ピロリン酸イオンによって架橋された二核 Fe(III)錯体の合成	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
226.	原 奈摘子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を有する <i>N</i> -ヘテロサイクリックカルベンの合成と金属錯体への応用	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
227.	鈴木文陽・ <u>箕浦真生</u>	かさ高い芳香族置換基を有するリンおよびケイ素化合物の合成と反応	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
228.	西野龍平・ <u>箕浦真生</u>	拡張トリプチシル基を立体保護基としたアンチモン化合物の合成	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
229.	平野佑馬, 行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシル骨格を導入した水素を有するチオケトン類の合成	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
230.	小林 翔・ <u>箕浦真生</u>	<u>テトラフェニルテルルジカチオンを用いたヘキサアリールテルルの合成と反応</u> (* 学 230)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
231.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Reaction of Reactive Silicon Species Bearing Triptycylmethyl Framework	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
232.	篠澤美穂・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基と芳香族置換基を導入したシラン類の合成と反応	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
233.	杉崎裕一、 <u>本山寛大</u> 、 <u>枝元一之</u>	Ag(100)上に合成した VO 薄膜の電子状態	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
234.	田中李叶子, <u>松下信之</u>	Structural comparison of charge-transfer salts composed of alkyl viologen and iron complex	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
235.	品川裕作, <u>松下信之</u>	<u>ヒドロキシ基を含む有機アクセプターとパラジウム錯体からなる電荷移動塩の発光特性と結晶多形</u> (* 学 235)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
236.	宮里裕二, 今泉航太, 田中李叶子, 和田 亨, <u>松下信之</u>	ピロリン酸イオンによって架橋された二核 Fe(III)錯体の合成	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
237.	三井伸也,	Pd(II)マクロサイクル集積型	日本化学会第 97	慶應義塾大学	2017/3

	BURKE David, 田代省平, <u>松下信之</u> , 塩谷光彦	多孔性結晶からなる異種ハロゲン含有コア-シェル結晶の作成	春季年会	(港北区)	
238.	<u>Morimoto, M.</u>	Photomechanical Performance of Diarylethene Single Crystals (招待講演)	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
239.	高須翔也・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテンの光反応量子収率に対する置換基効果	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
240.	藤浪紗栄・稲留徹・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	親水性置換基を有する蛍光性ジアリールエテンの合成	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
241.	木下賢・上本健太・碓井悠大・片山哲郎・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u> ・玉井尚登	CdSe ナノ粒子-ジアリールエテン誘導体ハイブリッド系の励起子ダイナミクスと発光スイッチング	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
242.	上本健太・木下賢・片山哲郎・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u> ・玉井尚登	ジアリールエテン誘導体を用いた CdTe 量子ドットの蛍光特性制御	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
243.	高瀬一希・河崎佳奈・ <u>森本正和</u> ・眞山博幸・小島優子・横島智・中村振一郎・内田欣吾	可逆的な光誘起結晶成長により超親水性表面を形成するジアリールエテンとその配位子効果	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
244.	藤田己・伊都将司・宮坂博・竹井敏・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテンを用いた超解像顕微鏡による高分子固体内部のナノスケール構造評価	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
245.	安田直晃・瀬戸浦健仁・伊都将司・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u> ・宮坂博	蛍光スイッチング分子をプローブとした蛍光相関分光	日本化学会第 97 春季年会	慶應義塾大学 (港北区)	2017/3
246.	<u>望月祐志</u> , 藤本真悠, <u>古明地勇人</u> , 井山剛志, 飯島潤, 齊藤天菜, 土居英男,	<u>フラグメント分子軌道法の計算結果の自動解析と知識導出(学 246)</u>	応用物理学会春季年会 2017	パシフィコ横浜 (横浜市)	2017/3

	奥沢明, 牧村健, 中西貴哉, <u>福澤薫</u> , 田中成典				
247.	奥脇弘次, 土居英男, 石川雄太郎, <u>望月祐志</u> , 小沢拓, 泰岡顕治	<u>フラグメント分子軌道計算に基づくナノ・メソのマルチスケールシミュレーションの展開</u> (*学 247)	応用物理学会春期年会 2017	パシフィコ横浜 (横浜市)	2017/3
248.	川田修太郎, <u>望月祐志</u> , 袴田真由, 藤田貴敏, 星健夫	ペプチド類のフラグメント分子軌道計算-その 3	応用物理学会春期年会 2017	パシフィコ横浜 (横浜市)	2017/3
249.	星健夫, 安部友樹也, 大平健太郎, 藤田貴敏, 川田修太郎, <u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道法を用いたペプチド系の励起子ダイナミクス計算	応用物理学会春期年会 2017	パシフィコ横浜 (横浜市)	2017/3
250.	<u>望月祐志</u>	<u>ABINIT-MP の整備状況と最近の応用事例</u> (*学 250) (依頼講演)	FMO-DD コンソーシアム全体会議	理化学研究所 (横浜市)	2017/3
251.	松尾直也・Sundaram Arulmozhiraja・中野祥吾・伊藤創平・高橋忠伸・鈴木隆・池田潔・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	<u>計算化学およびバイオインフォマティクスとの新規融合アプローチによる抗ウイルス薬の合理的設計開発</u> (*学 251)	日本薬学会第 137 年会	東北大学 (仙台市)	2017/3
252.	井川貴詞・村上智成・福元豊・高木晃・青山浩・山本雄大・ <u>常盤広明</u> ・赤井周司	ベンザインの (2+2) 付加環化二量化反応とその配向制御	日本薬学会第 137 年会	東北大学 (仙台市)	2017/3
253.	山本雄大・Sundaram Arulmozhiraja・Vladimir Sladek・松尾直也・村上智成・福元豊・井川貴	多環式ベンザインによる (2+2) 付加環化反応はなぜ進行するのか? (優秀発表賞受賞)	日本薬学会第 137 年会	東北大学 (仙台市)	2017/3

	詞・村上智成・ 福元豊・高木 晃・青山浩・赤 井周司・ <u>常盤広 明</u>				
254.	松尾直也・中野 祥吾・伊藤創 平・竹田誠・ Mark von Itzstein・ <u>常盤広 明</u>	<u>第四次革新的手法を用いた ウイルス糖タンパク質の理論 的解析および完全人工抗体 の設計開発</u> (*学 254)	日本薬学会第 137 年会	東北大学 (仙台市)	2017/3
255.	<u>Wada, T.</u> ; Nishimura, S.; Miyazato, Y.	<u>Mechanism of Water Oxidation Catalyzed by a Dinuclear Ruthenium Complex Bridged by Bis(terpyridyl)anthracene</u> (*学 255)	2017 International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2017)	立命館大学 (京都市)	2017/3
256.	<u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Reaction of Novel Bulky Ligands for Stimuli-Responsive Main Group Element Compounds	The 2 <sup>nd</sup> International Symposium on Stimuli-responsiv e Chemical Species for the Creation of Functional Molecules	Hiroshima, (Japan)	2017/3
257.	<u>Suzuki, N.</u> ; Matsuda, T.; Nagai, T.; Yamazaki, K.; Fujiki, M.	The Intra-CH/ $\pi$ Interaction in Dibromo-9,9-dialkylfluorenes <b>(招待講演)</b>	BIT's 5th Annual Conference of AnalytiX 2017 (AnalytiX-2017),	Hilton Sea hawk (Fukuoka)	2017/3
258.	<u>枝元一之</u> 、 <u>本山 寛大</u> 、 <u>杉崎裕 一</u> 、 <u>小澤健一</u>	Fe <sub>2</sub> P(10-10)の共鳴光電子分 光	2016 年度量子ビ ームサイエンスフ ェスタ	つくば国際会議 場 (つくば市)	2017/3
259.	<u>枝元一之</u>	<u>人工酸化物超薄膜の作成と その電子状態解析</u> (*学 259)	第 2 回マルチス ケールサイエンス 研究会	弘前大学 (弘前市)	2017/3
260.	<u>上谷幸治郎</u> ・ <u>岡 田拓巳</u> ・ <u>大山秀 子</u>	<u>セルロースナノペーパーの熱 伝導特性</u> (*学 260)	第 67 回日本木材 学会年次大会	九州大学 (福岡市)	2017/3
261.	<u>大山秀子</u>	非相溶系高分子界面におけ る界面制御: Reactive Processing	高分子学会 主催 高分子同 友会	高分子学会会 議室 (中央区)	2017/3

		(招待講演)			
262.	<u>望月祐志</u> , 加藤幸一郎	ABINIT-MP プログラムの整備状況、先導的な応用事例、解析の自動化の紹介 (依頼講演)	産応協、CMSI、ポスト京重点課題5・6・7合同産官学連携シンポジウム 2017,	ステーションコンファレンス東京 (千代田区)	2017/2
263.	<u>望月祐志</u>	<u>ABINIT-MPによるフラグメント分子軌道計算の最近の応用事例のご紹介～粗視化シミュレーションとの連携、機械学習による解析など</u> (*学263) (依頼講演)	健康"いきいき"羅針盤 人材育成セミナー	兵庫県立大学 (神戸市)	2017/1
264.	秋元麻友美・松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・ <u>常盤広明</u>	<u>新規アミノ酸配列解析手法を用いた A 型インフルエンザウイルスの糖タンパク質 HA の分類、変異および配列予測</u> (*学264)	6th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2017/1
265.	<u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算およびバイオインフォマティクス手法を基盤とした計算ウイルス学の可能性	6th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2017/1
266.	松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・竹田誠・ <u>常盤広明</u>	新規アミノ酸配列解析手法を用いたモルビリウイルスの宿主特異性の理論的解析	6th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2017/1
267.	岡田拓巳・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	ナノセルロースの配向制御による異方性伝熱シートの創出 (優秀ポスター賞受賞)	繊維学会 関東支部 平成 28 年度研究交流会	東京大学 (文京区)	2017/1
268.	<u>上谷幸治郎</u> ・岡田拓巳・ <u>大山秀子</u>	<u>ナノセルロース集積体の熱エネルギー伝導特性</u> (*学268) (優秀ポスター賞受賞)	第 12 回バイオマス学会議	東京大学 (文京区)	2017/1
269.	Hoshi, T.; Imachi, H.; Fujita, T.; Kawada, S.; <u>Mochizuki, Y.</u>	Exciton dynamics simulation based on the fragment molecular orbital method	ポスト「京」重点課題7シンポジウム	東京大学 (柏市)	2016/12
270.	奥脇弘次, <u>望月祐志</u> , 小沢拓, 土居英男, 泰岡顕治	<u>フラグメント分子軌道計算に基づく粗視化シミュレーションの有効パラメータ算定の展開</u> (*学270)	高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテ	東京農工大学 (小金井市)	2016/12

			クノロジー研究会 合同討論会		
271.	石川雄太郎, 奥脇弘次, 川田将司, 川田修太郎, 土居英男, <u>望月祐志</u>	<u>タイヤゴム素材に関するマルチスケールシミュレーションの試み</u> ( * 学 271)	高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会	東京農工大学 (小金井市)	2016/12
272.	Okuwaki, K.; Doi, H.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Ozawa, T.; Yasuoka, K.	<u>Fragment Molecular Orbital-based Parameterizing Procedure for Dissipative Particle Dynamics Simulations</u> ( * 学 272)	11th SPSJ International Polymer Conference (IPC2016)	Fukuoka, (Japan)	2016/12
273.	Doi, H.; Okuwaki, K.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Ozawa, T.; Yasuoka, K.	<u>Dissipative Particle Dynamics Simulations for Lipid Membrane using Fragment molecular orbital-based Effective Parameters</u> ( * 学 273)	11th SPSJ International Polymer Conference (IPC2016)	Fukuoka, (Japan)	2016/12
274.	<u>常盤広明</u>	<u>産業応用酵素を最新の計算科学で設計・制御する</u> ( * 学 274) (招待講演)	ST-ERATO 浅野酵素活性分子プロジェクトの研究 成果報告会『酵素活性分子研究からの新潮流』	建設会館 (中央区)	2016/12
275.	中野克洋、磯瑞希、長澤和夫、 <u>山中正造</u>	<u>グアニジン-ビスチオウレア触媒を用いた不斉 Friedel-Crafts 反応に関する理論的研究</u> ( * 学 275) (優秀ポスター賞)	第 9 回有機触媒シンポジウム	名古屋大学 (名古屋市)	2016/12
276.	山本絵莉、 <u>山中正造</u>	<u>カルボン酸-チオウレア触媒による無置換トリプタミンの不斉 Pictet-Spenger 反応の理論的研究</u> ( * 学 276)	第 9 回有機触媒シンポジウム	名古屋大学 (名古屋市)	2016/12
277.	亀井優斗、長尾芳大、川戸勇士、濱島義隆、 <u>山中正造</u>	<u>DFT Study of DTBM-BINAP-monoxide Catalyzed Asymmetric Bromocyclization</u> ( * 学 277)	第 9 回有機触媒シンポジウム	名古屋大学 (名古屋市)	2016/12
278.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシル骨格を活用した高反応性ケイ素化学種の合成	第 43 回有機典型元素化学討論会	仙台市民会館 (仙台市)	2016/12
279.	鈴木文陽・ <u>箕浦真生</u>	かさ高い動的立体保護基の合成と反応	第 43 回有機典型元素化学討論会	仙台市民会館 (仙台市)	2016/12

280.	原奈摘子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を有するかさ高い <i>N</i> -ヘテロサイクリックカルベンの合成と反応	第43回有機典型元素化学討論会	仙台市民会館(仙台市)	2016/12
281.	篠澤美穂・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシルメチル基を有するシリレンの捕捉反応	第43回有機典型元素化学討論会	仙台市民会館(仙台市)	2016/12
282.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシル基を活用したエンスルフェン酸の単離と互変異性化: PSA から LF への異性化の実験的観測	第43回有機典型元素化学討論会	仙台市民会館(仙台市)	2016/12
283.	小林翔・ <u>箕浦真生</u>	<u>四角錐構造を有する4価超原子価有機テルル化合物の探索合成(*学283)</u>	第43回有機典型元素化学討論会	仙台市民会館(仙台市)	2016/12
284.	Yukimoto, M; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis of Stimuli-responsive Sulfur Species Utilizing Triptycylmethyl Framework	The 4 <sup>th</sup> International Symposium for Young Chemists on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules	Osaka, (Japan)	2016/12
285.	Matsuo, N., Arulmozhiraja, S., Nakano, S., Ito S., Takahashi, T., Suzuki, T., Ikeda, K., von Itzstein, M., <u>Tokiwa, H.</u>	Rational drug design of anti-human parainfluenza virus compounds using a novel in silico approach combining quantum chemistry and bioinformatics	Sialoglyco 2016,	Santa Barbara, (USA)	2016/11
286.	Matsuda, R., Matuo N., Yamamoto, Y., Ishikawa, Y., Arulmozhiraja, S., Sladek, V., Nakano, S., Ito, S., Shimano, H., <u>Tokiwa, H.</u>	Construction of a novel cell membrane model based on the first-principles calculations and its application to chemical biology	The 3rd International Conference on Pharma-Food	Shizuoka, (Japan)	2016/11

287.	Yamamoto, Y., Nakano, Y., Matsuo, N., Ishitsubo, E., Hayamizu, K., Han L., Tsuji, T., Nakano, T., Ito S., Watanabe, Y., Yamada, S., <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical Interaction Analysis of Free Fatty Acid Receptors with $\omega$ -3/ $\omega$ -6 FFAs	The 3rd International Conference on Pharma-Food	Shizuoka, (Japan)	2016/11
288.	Matsuo, N., Arulmozhiraja, S., Nakano, S., Ito, S. <u>Tokiwa, H.</u>	Quantum mechanical studies of the sugar chains of glycoproteins	2016 SOCIETY for Glycobiology (SFG) ANNUAL MEETING	New Orleans, (USA)	2016/11
289.	井川貴詞・村上 智成・福元豊・ 高木晃・青山 浩・山本雄大・ <u>常盤広明</u> ・赤井 周司	ベンザインの[2+2]環化付加 反応による新規らせん分子 の合成	第 110 回有機合 成シンポジウム 2016【秋】	早稲田大学(新 宿区)	2016/11
290.	岡直輝、市之瀬 篤、 <u>山中正浩</u>	<u>エナンチオスイッチングを発 現する <math>\alpha</math>-ケトエステルの不斉 ヒドロホスホニル化反応</u> ( * 学 290)	第 110 回有機合 成シンポジウム 2016【秋】	早稲田大学(新 宿区)	2016/11
291.	倉澤香澄、 <u>山中 正浩</u>	<u>Cu(II)-ビスアミジン触媒を用 いた <math>\alpha</math>-ケトエステルの不斉ピ ニロガス向山アルドール反応 の開発</u> ( * 学 291)	第 110 回有機合 成シンポジウム 2016【秋】	早稲田大学(新 宿区)	2016/11
292.	野本拓実、 <u>山中 正浩</u>	<u>キラル Ag(I)-ビスアミジン触 媒を用いたインドールと <math>\alpha</math>置 換-<math>\beta</math>ニトロアクリレートの不 斉 Friedel-Crafts アルキル化 反応の開発</u> ( * 学 292)	第 72 回有機合成 化学協会関東支 部シンポジウム	新潟薬科大学 (新潟市)	2016/11
293.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>鈴木 望</u>	<u>キャピラリー電気泳動による 分子間相互作用および界面 透過の速度解析</u> ( * 学 293)	新アミノ酸分析研 究会第 6 回学術 講演会	東京大学 (文京区)	2016/11
294.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>鈴木 望</u>	<u>キャピラリー電気泳動による 分子間相互作用および界面 透過の速度解析のためのモ</u>	第 36 回キャピラ リー電気泳動シ ンポジウム	徳島大学 (徳島市)	2016/11

		ーメント理論(*学 294)			
295.	<u>山中正造</u>	選択的なモノづくりの起源を探る！:立体制御機構の理論計算(*学 295)	第6回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
296.	<u>児玉智</u> 、 <u>山中正造</u> 、 <u>和田亨</u>	6,6'-アミジノ-2,2'-ビピリジンを配位子とする新規 Ru(II)錯体の合成と酸化還元特性	第6回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
297.	<u>神作八起</u> 、 <u>森本正和</u> 、 <u>山中正造</u>	超分子型キラルビスアミジン錯体の蛍光特性(*学 297)	第6回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
298.	<u>和田佳奈子</u> ・ <u>桑名祐里</u> ・ <u>鈴木直幸</u> ・ <u>柏葉 崇</u> ・ <u>箕浦真生</u> ・ <u>山本陽介</u>	新規スフェランドを用いた超原子価テルル化合物の合成	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
299.	<u>行本万里子</u> ・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシルメチル骨格を活用した新規立体保護基の合成と反応	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
300.	<u>鈴木文陽</u> ・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシル基を遠隔位に有する芳香族置換基の合成と反応	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
301.	<u>小林 翔</u> ・ <u>箕浦真生</u>	6 価超原子価有機ハロテルル化合物の合成と構造および脱ハロゲン化反応(*学 301)	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
302.	<u>加藤 茜</u> 、 <u>松下信之</u>	テトラシアニド白金(II)錯体とジプロピルビオロゲンからなる電荷移動塩の発光相変化と結晶構造(*学 302)	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
303.	<u>品川裕作</u> 、 <u>松下信之</u>	テトラシアニドパラジウム錯体と有機アクセプターカチオンからなる電荷移動塩の結晶構造と発光バイポクロミズム(*学 303)	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
304.	<u>中込湧士郎</u> ・ <u>井上翔太</u> ・ <u>小林健二</u> ・ <u>三井正明</u>	新規な(D- $\pi$ ) <sub>5</sub> -Ph-A 型色素を用いた色素増感太陽電池の作製と特性評価	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
305.	<u>斎藤 祐太</u> ・ <u>三井正明</u>	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> ペロブスカイト層の高空間分解能発光イメージング	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11
306.	<u>森京介</u> ・ <u>三井正明</u>	レーザー走査光電流-発光顕微計測による色素増感太陽電池の光電変換過程の不均	第6回 CSJ 化学フェスタ 2016	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/11

		一性の解明			
307.	杉崎裕一、 <u>本山寛大</u> 、 <u>枝元一之</u>	Ag(100)上におけるバナジウム酸化物薄膜の合成	第36回表面科学 学術講演会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2016/11
308.	本山寛大、杉崎裕一、 <u>枝元一之</u>	Fe <sub>2</sub> P(10-10)の AES、LEED、PES による解析	第36回表面科学 学術講演会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2016/11
309.	田中李叶子, 小中 尚, 佐々木明登, 岡澤厚, 小島憲道, <u>松下信之</u>	ビピリジン骨格を有する有機アクセプター分子と鉄錯体電子ドナーからなるベイポクロミック電荷移動塩における構造未知相の粉末 X 線構造解析	日本結晶学会平成 28 年度年会	茨城県立県民文化センター (水戸市)	2016/11
310.	加藤 茜, <u>松下信之</u>	<u>ジアルキルビオロゲンとテトラシアニド白金錯体からなる電荷移動塩の結晶構造と発光特性(*学 310)</u>	日本結晶学会平成 28 年度年会	茨城県立県民文化センター (水戸市)	2016/11
311.	品川裕作, <u>松下信之</u>	<u>テトラシアニドパラジウム錯体と有機アクセプターからなる発光性電荷移動塩の結晶構造とベイポクロミズム(*学 311)</u>	日本結晶学会平成 28 年度年会	茨城県立県民文化センター (水戸市)	2016/11
312.	<u>Morimoto, M.</u> ; Kashihara, R.; Mutoh, K.; Kobayashi, Y.; Abe, J.; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Irie, M.</u>	Turn-on mode fluorescence photoswitching of diarylethene single crystals	International Symposium on Photochromism 2016 (ISOP 2016)	Shanghai, (China)	2016/11
313.	Hatano, E.; <u>Morimoto, M.</u> ; Hyodo, K.; Yasuda, N.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Yasuda, N.; Uchida, K.	Photosalient Phenomena of Diarylethene Thin Crystals with Two Conformers in the Crystal Lattice	International Symposium on Photochromism 2016 (ISOP 2016)	Shanghai, (China)	2016/11
314.	Nishimura, R.; Fujinaga, N.; Kojima, Y.; Yamamoto, K.; Tsujioka, T.;	Photoinduced topographical changes on microcrystalline surfaces of diarylethene	International Symposium on Photochromism 2016 (ISOP 2016)	Shanghai, (China)	2016/11

	<u>Morimoto, M.</u> ; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K.				
315.	<u>中村裕介</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>水崩壊性ポリ乳酸モノリスの高次構造と加水分解速度に与える影響(*学315)</u>	第25回ポリマー材料フォーラム	名古屋国際会議場 (名古屋市)	2016/11
316.	<u>岡田拓巳</u> ・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	透明性・伝熱性を両立させるナノセルロースシートの創出	第25回ポリマー材料フォーラム	名古屋国際会議場 (名古屋市)	2016/11
317.	<u>岡田拓巳</u> ・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	ホヤからつくる透明・伝熱ナノセルロースシート	第37回日本熱物性シンポジウム	岡山国際交流センター (岡山市)	2016/11
318.	<u>三井正明</u> ・森京介	光電流・発光顕微計測による色素増感太陽電池の光電変換過程の不均一性の解明	第35回固体・表面光化学討論会	室蘭工業大学	2016/11
319.	水上俊成・高倉泰・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	D- $\pi$ -A- $\pi$ -D 四重極子色素の単一分子分光：発光特性に対する固体環境効果 (優秀ポスター賞受賞)	第35回固体・表面光化学討論会	室蘭工業大学	2016/11
320.	斎藤祐太・ <u>三井正明</u>	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> を基盤としたヘテロ層構造の発光顕微分光 (優秀ポスター賞受賞)	第35回固体・表面光化学討論会	室蘭工業大学	2016/11
321.	中込湧士郎・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	(D- $\pi$ ) <sub>5</sub> -Ph-A 構造を有する新規増感色素を用いた色素増感太陽電池	第35回固体・表面光化学討論会	室蘭工業大学	2016/11
322.	<u>望月祐志</u>	<u>膜・電極複合体に関するマルチスケールシミュレーション(*学322)</u> (依頼講演)	ポスト「京」重点課題6シンポジウム	東京大学 (文京区)	2016/10
323.	<u>望月祐志</u>	<u>ABINIT-MP プログラムのものづくり分野での利用(*学323)</u> (依頼講演)	Vinas ユーザー会議 2016,	東京コンファレンスセンター・品川 (港区)	2016/10
324.	<u>黒田智明</u> ・柴山千絵美・井上恭輔・岡本育子・通元夫・齋藤義紀・花井亮・龔洵	中国四川省および重慶市産 <i>Ligularia fischeri</i> の成分系列	第60回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	東京農業大学 (網走市)	2016/10
325.	花井 亮・田邊	中国雲南省香格里拉県産の	第60回香料テル	東京農業大学	2016/10

	沙也子、青山奈央、岡本育子、通元夫、張寧寧、龔洵、 <u>黒田智明</u>	2つの <i>Ligularia</i> 雑種の化学成分”	ペンおよび精油化学に関する討論会	(網走市)	
326.	岡本育子、谷口瑞穂、花井亮、中島勝幸、龔洵、 <u>黒田智明</u> 、 <u>通元夫</u>	中国産 <i>Ligularia liatroides</i> の新規化学成分	第60回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	東京農業大学(網走市)	2016/10
327.	福島裕貴、池上大輔、 <u>黒田智明</u>	$\omega$ -ホルミルアリルシランの水分子内反応による $\alpha$ -メチレン- $\gamma$ -ラク톤の合成研究	第60回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	東京農業大学(網走市)	2016/10
328.	中島勝幸、速水智加、小野弘嗣、岡本育子、龔洵、 <u>黒田智明</u> 、花井亮、通元夫	中国産 <i>Ligularia virgaurea</i> の新規化学成分と多様性(5)	第60回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	東京農業大学(網走市)	2016/10
329.	齋藤義紀・岡本育子、松尾洋介、田中隆、 <u>黒田智明</u> 、龔洵	中国雲南省産 <i>Ligularia lankongensis</i> より得られた含塩素ビスボラン型セスキテルペン	第60回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	東京農業大学(網走市)	2016/10
330.	岡田拓巳・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	<u>バクテリアセルロースの配向制御による物性変化(*学330)</u>	プラスチック成形加工学会第24回秋季大会 成形加工シンポジア’16	仙台国際センター(仙台市)	2016/10
331.	中村裕介、 <u>大山秀子</u>	<u>水崩壊性ポリ乳酸ブレンドモノリスの構造と加水分解速度(*学331)</u> (ポスター発表)	プラスチック成形加工学会第24回秋季大会 成形加工シンポジア’16	仙台国際センター(仙台市)	2016/10
332.	中村裕介、 <u>大山秀子</u>	<u>水崩壊性ポリ乳酸ブレンドモノリスの構造と加水分解速度(*学332)</u> (口頭発表)	プラスチック成形加工学会第24回秋季大会 成形加工シンポジア’16	仙台国際センター(仙台市)	2016/10
333.	奥脇弘次、 <u>望月祐志</u> 、小沢拓、大畠広介、土居	<u>フラグメント分子軌道計算に基づく粗視化シミュレーションの有効パラメータ算定の展</u>	応用物理学会秋季年会 2016	朱鷺メッセ(新潟市)	2016/9

	英男, 石川雄太郎, 川田修太郎, 泰岡顕治	開(*学 333)			
334.	土居英男, 奥脇弘次, <u>望月祐志</u> , 小沢拓, 泰岡顕治	<u>フラグメント分子軌道計算に基づく有効パラメータを用いる脂質膜の粗視化シミュレーション(*学 334)</u>	応用物理学会秋季年会 2016	朱鷺メッセ(新潟市)	2016/9
335.	<u>望月祐志</u> , 藤本真悠, <u>古明地勇人</u> , 飯島潤, 齊藤天菜, 土居英男, 奥沢明, 牧村健, 中西貴哉, <u>福澤薫</u> , 田中成典	<u>機械学習を援用した Ubiquitin のアミノ酸残基間の相互作用解析(*学 335)</u>	応用物理学会秋季年会 2016	朱鷺メッセ(新潟市)	2016/9
336.	石川雄太郎, 奥脇弘次, 川田修太郎, 土居英男, <u>望月祐志</u>	<u>タイヤ素材に関する計算化学的研究の試み(*学 336)</u>	応用物理学会秋季年会 2016	朱鷺メッセ(新潟市)	2016/9
337.	川田修太郎, <u>望月祐志</u> , 袴田真由, 藤田貴敏, 星健夫	ペプチド類のフラグメント分子軌道計算-その2	応用物理学会秋季年会 2016	朱鷺メッセ(新潟市)	2016/9
338.	Matsuo, N., Arulmozhiraja, S., Nakano, S., Ito, S., Takahashi, T., Suzuki, T., Ikeda, K., von Itzstein, M., <u>Tokiwa, H.</u>	Rational drug design of antiviral compounds using a novel in silico approach combining computational chemistry and bioinformatics	The 15th Awaji International Forum on Infection and Immunity,	Kobe, (Japan)	2016/9
339.	松田留理子・山本雄大・石川雄規・Sundaram Arulmozhiraja・Vladimir Sladek・松尾直也・中野祥吾・伊藤創平・島野仁・ <u>常盤広明</u>	<u>脂肪酸の質の違いに着目した画期的創薬のための全電子計算に基づく新規細胞膜モデルの構築(*学 339)</u>	第60回日本薬学会関東支部	東京大学(文京区)	2016/9
340.	Sundaram Arulmozhiraja・	<u>Comparative binding analysis of dipeptidase with</u>	第60回日本薬学会関東支部	東京大学(文京区)	2016/9

	松尾直也・岡崎誠司・島野仁・ <u>常盤広明</u>	<u>antidiabetic drugs - A fragment molecular orbital quantum mechanical study</u> ( *学 340)			
341.	松尾直也・Vladimir Sladek・Sundaram Arulmozhiraja・岡崎誠司・中野祥吾・伊藤創平・武井健太・中川嘉・島野仁・ <u>常盤広明</u>	<u>共役因子を含む PPARs/アゴニスト複合体の理論的解析</u> (*学 341) <b>(優秀発表賞受賞)</b>	第 60 回日本薬学会関東支部	東京大学 (文京区)	2016/9
342.	高木晃・井川貴詞・清水和則・後藤雅彦・ <u>常盤広明</u> ・赤井周司	Copper-catalyzed regioselective three-component coupling reactions of borylbenzynes	第 63 回有機金属化学討論会	早稲田大学 (新宿区)	2016/9
343.	<u>Kuroda, C</u> ; Tanabe, S.; Aoyama, N.; Suzuki, Y.; Yamada, H.; Nagano, H.; Hanai, R.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; Saito, Y.	Chemical constituents of hybrids between <i>Ligularia duciformis</i> / <i>Ligularia nelumbifolia</i> and other <i>Ligularia</i> species	International Symposium on Natural Products for the Future 2016	Tokushima (Japan)	2016/9
344.	Saito, Y.; Takashima, Y.; Ichihara, M.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Hanai, R.; <u>Kuroda, C</u> ; Tori, M.	Chemical constituents of hybrids of <i>Ligularia cyathiceps</i> and <i>Ligularia lamarum</i> / <i>Ligularia subspicata</i> collected in China	International Symposium on Natural Products for the Future 2016	Tokushima (Japan)	2016/9
345.	Yaoita, Y.; Okamoto, Y.; Hanai, R.; Aoyama, N.; Gong, X.; <u>Kuroda, C</u>	Chemical constituents <i>Ligularia liatroides</i> collected in China	International Symposium on Natural Products for the Future 2016	Tokushima (Japan)	2016/9
346.	齋藤義紀・谷口瑞穂・佐々木陽	中国四川省産 <i>Ligularia brassicoides</i> および <i>Ligularia</i>	第 58 回天然有機化合物討論会	東北大学(仙台市)	2016/9

	子、三浦 唯、岡本育子、中島勝幸、大崎愛弓、永野 肇、八百板康範、龔洵、花井 亮、 <u>黒田智明</u> 、通元夫	<i>liatroides</i> の化学成分と塩基配列			
347.	加藤隆大、廣田洋、 <u>黒田智明</u> 、大崎愛弓	<i>Ligularia cymburifera</i> の成分探索	日本生薬学会第63回年会	富山国際会議場(富山市)	2016/9
348.	<u>Wada, T.</u> ; Miyazato, Y.	<u>Influence of Bridging Ligands on Oxygen Reduction Catalyzed by Dinuclear Cobalt Complexes</u> (*学348)	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
349.	三島かなえ、 <u>和田亨</u>	ビス(ターピリジル)アントラセンを有する非対称二核ルテニウム錯体の合成	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
350.	安藤智広、 <u>和田亨</u>	<u>トリアゾール骨格を含む配位子を有するルテニウム錯体のプロトン共役酸化還元反応</u> (*学350)	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
351.	田中李叶子、小中尚、佐々木明登、岡澤厚、小島憲道、 <u>松下信之</u>	ベイポクロミック鉄錯体電荷移動塩の粉末X線構造解析による結晶構造解明	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
352.	加藤茜、 <u>松下信之</u>	ブチルビオロゲンとテトラシアニド白金錯体からなる塩の結晶構造と発光特性	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
353.	品川裕作、 <u>松下信之</u>	<u>テトラシアニドパラジウム錯体電荷移動塩の結晶構造と発光ベイポクロミズム</u> (*学353)	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
354.	田中李叶子、池本一人、坂本裕紀、中村振一郎、 <u>松下信之</u>	ピロロキノリンキノンナトリウム塩の配位構造の比較	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
355.	宮里裕二、猪股航也、田中李叶子、 <u>和田亨</u> 、 <u>松下信之</u>	ピロリン酸イオンを多核化コンポーネントとする二核金属錯体の合成	錯体化学会第66回討論会	福岡大学(城南市)	2016/9
356.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>鈴木</u>	<u>モーメント解析ーアフィニティ</u>	第10回バイオ関	石川県立音楽	2016/9

	<u>望</u>	キャピラリー電気泳動法による分子間相互作用の速度解析(*学 356)	連化学シンポジウム	堂 (金沢市)	
357.	<u>宮部寛志・鈴木望</u>	アフィニティキャピラリー電気泳動法による分子間相互作用の速度解析のためのモーメント解析理論(*学 357)	日本分析化学会 第 65 年会	北海道大学(札幌市)	2016/9
358.	<u>宮部寛志・鈴木望・島崎裕紀・高橋遼平・永野優美子</u>	モーメント解析ークロマトグラフィックキャピラリー電気泳動(MA-CCE)法による界面活性剤ミセルーバルク溶媒間界面における溶質透過の速度解析(*学 358)	日本分析化学会 第 65 年会	北海道大学(札幌市)	2016/9
359.	<u>原奈摘子・箕浦真生</u>	かさ高い置換基を有するチオおよびセノウレア類の合成	第 27 回基礎有機化学討論会	広島国際会議場 (広島市)	2016/9
360.	<u>篠澤美穂・行本万里子・箕浦真生</u>	トリプチシルメチル基を有するケイ素化合物の合成と反応	第 27 回基礎有機化学討論会	広島国際会議場 (広島市)	2016/9
361.	<u>林容靖・箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を複数有するスズ化合物の合成	第 27 回基礎有機化学討論会	広島国際会議場 (広島市)	2016/9
362.	<u>行本万里子・箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を用いた含硫黄高反応性化学種の速度論的安定化	第 27 回基礎有機化学討論会	広島国際会議場 (広島市)	2016/9
363.	<u>鈴木文陽・箕浦真生</u>	複数の 9-トリプチシルメチル基を有する芳香族置換基の合成と反応	第 27 回基礎有機化学討論会	広島国際会議場 (広島市)	2016/9
364.	<u>Suzuki, N.;</u> Wang, Y.; Elvati, P.; Qu, Z.-B.; Kim, K.; Jiang, S.; Baumeister, E.; Lee, J.; Yeom, B.; Bahng, J. H.; Lee, J.; Violi, A.; Kotov, N. A.	Chiral Graphene Quantum Dots (招待講演)	Energy Materials Nanotechnology (EMN) Meeting on Photonics, oral presentation	Barcelona, (Spain)	2016/9
365.	<u>Edamoto, K.</u>	Epitaxial growth of titanium and vanadium oxide thin	Energy Materials Nanotechnology	Budapest, (Hungary)	2016/9

		films on Ag surfaces(*学 365) (招待講演)	Meeting on Epitaxy		
366.	田中李叶子, 岡 澤厚, 小島憲 道, <u>松下信之</u>	ビピリジン骨格を有する有機 アクセプターと鉄錯体ドナー からなる電荷移動塩におけ る固相合成相の結晶構造	第25回有機結晶 シンポジウム	京都大学 (京都市)	2016/9
367.	加藤 茜, <u>松下 信之</u>	プロピルビオロゲンとテトラシ アニド白金(II)錯体からなる 電荷移動塩における水分子 の取り込み・放出による結晶 相変化(*学 367)	第25回有機結晶 シンポジウム	京都大学 (京都市)	2016/9
368.	品川裕作, <u>松下 信之</u>	テトラシアニドパラジウム錯 体と有機アクセプターから成 る電荷移動塩の結晶構造と 発光バイポクロミズム(*学 368)	第25回有機結晶 シンポジウム	京都大学 (京都市)	2016/9
369.	波多野絵里・ <u>森 本正和</u> ・兵藤憲 吾・安田伸広・ 横島智・中村振 一郎・内田欣吾	Photosalient Effect if a Diarylethene Having Perfluorocyclohexene Ring	第25回有機結晶 シンポジウム	京都大学 (京都市)	2016/9
370.	高瀬一希・ <u>森本 正和</u> ・小島優 子・眞山博幸・ 横島智・中村振 一郎・内田欣吾	光照射により超親水性表面 を形成するジアリールエテン 誘導体の分子構造と結晶性	第25回有機結晶 シンポジウム	京都大学 (京都市)	2016/9
371.	波多野絵里・ <u>森 本正和</u> ・安田伸 広・横島智・中 村振一郎・内田 欣吾	ペルフルフルオロシクロヘキ セン環を有するジアリールエ テンの結晶状態での光応答 性挙動	2016年光化学討 論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
372.	片山哲郎・木下 賢・上本健太・ 奥畑智貴・ <u>森本 正和</u> ・ <u>入江正 造</u> ・玉井尚登	半導体ナノ粒子系-フォトクロ ミック分子における発光状態 の光スイッチング機構解明	2016年光化学討 論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
373.	檜原遼太・ <u>森本 正和</u> ・武藤克 也・小林洋一・ 阿部二郎・五月 女光・伊都将 司・宮坂博・ <u>入</u>	蛍光性ジアリールエテン単結 晶のフォトクロミズム	2016年光化学討 論会	東京大学 (目黒区)	2016/9

	<u>江正浩</u>				
374.	Mitsuishi, M.; Setoura, K.; Ito, S.; Miyasaka, H.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	Photo-switching of optical trapping force by exploiting photochromic reaction	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
375.	木下賢・上本健太・碓井悠大・片山哲郎・横山泰・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u> ・玉井尚登	ジアリールエテン誘導体による半導体ナノ粒子の蛍光スイッチング	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
376.	上本健太・木下賢・片山哲郎・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u> ・玉井尚登	半導体量子ドット-フォトクロミック分子ハイブリッド系の発光スイッチング挙動	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
377.	Fujita, H.; Arai, Y.; Ito, S.; Miyasaka, H.; Takei, S.; <u>Morimoto, M.</u> ; <u>Irie, M.</u>	Phase-separation in polymer blends as revealed by photoactivation localization microscopy (PALM) with diarylethene derivatives	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
378.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ベンゾホスホール基を有するジアリールエテンの不斉光反応	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
379.	中込湧士郎・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	(D- $\pi$ ) <sub>5</sub> -Ph-A 型色素を用いた色素増感太陽電池の作製と特性評価	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
380.	高倉 泰・藤原寛・小林健二・ <u>三井正明</u>	一分子蛍光イメージングによる枝分かれ多重極子色素の発光サイトの可視化	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
381.	斎藤祐太・ <u>三井正明</u>	レーザー走査顕微分光による CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> ペロブスカイト層における電荷キャリアダイナミクスの解明	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
382.	森京介・ <u>三井正明</u>	レーザー走査光電流-発光顕微計測による色素増感太陽電池の吸着色素数および光電変換過程の空間分解分析	2016 年光化学討論会	東京大学 (目黒区)	2016/9
383.	水上俊成・高倉泰・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	アンサンブル分光と単一分子分光による D- $\pi$ A- $\pi$ D 四重極子色素の発光挙動に対する固体環境効果の解明	第 10 回分子科学討論会	神戸ファッションマート(神戸市)	2016/9

384.	高倉 泰・高橋 良弥・ <u>三井正明</u>	固体膜中におけるペリレンジ イミド誘導体1分子の励起状 態ダイナミクス:MLE-KS 検 定を用いた蛍光ブリンキング の統計解析	第10回分子科学 討論会	神戸ファッション マート(神戸市)	2016/9
385.	森京介・ <u>三井正 明</u>	レーザー走査光電流-発光顕 微計測による色素増感太陽 電池の光電変換過程の不均 一性の解明	第10回分子科学 討論会	神戸ファッション マート(神戸市)	2016/9
386.	<u>Uetani K.</u> ; Okada T.; <u>Oyama H.T.</u>	<u>Heat transfer property of nanocomposites using nanocellulose skeleton</u> ( * 学 386)	The 252nd America Chemical Society National Meeting & Exposition	Philadelphia, (USA)	2016/8
387.	<u>常盤広明</u>	見て、触って、閃いて！3D プリンタにより、今開かれる 「計算ウイルス学」の世界」 (招待講演)	東京大学医科学 研究所学友会セ ミナー	東京大学医科 学研究所 (港区)	2016/7
388.	<u>Yamanaka, M.</u>	<u>Multifunctional Chiral Bisamidine ligand: Applications in Asymmetric Catalysis</u> ( * 学 388)	20 <sup>th</sup> International Symposium on Homogeneous Catalysis (ISHCXX)	Kyoto (Japan)	2016/7
389.	野本拓実, 滝田 京子, 星野匡 弥, <u>山中正浩</u>	<u>キラル Ag(I)-ビスアミジン触 媒を用いたインドールとニト ロアルケン類の不斉 Friedel-Crafts アルキル化反 応の開発</u> ( * 学 389)	日本プロセス化 学会 2016 サマ ーシンポジウム	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2016/7
390.	Yukimoto, M; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis, Structure and Reaction of a Stable Enethiol and Its Derivatives Bearing 9-Triptycyl Group	7 <sup>th</sup> International Symposium on Organic Chemistry of Sulfur	Jena, (Germany)	2016/7
391.	<u>上谷幸治郎</u> ・岡 田拓巳・ <u>大山秀 子</u>	ナノセルロースを骨格とする フィルム材料の伝熱特性	第23回セルロー ス学会年次大会	つくばカピオ (つくば市)	2016/7
392.	齊藤天菜, <u>望月 祐志</u> , 石村和也	並列化分子軌道法プログラ ム SMASH の Xeon Phi によ る加速性能評価	日本コンピュータ 化学会 2016 春季 年会	東京工業大学 (目黒区)	2016/6
393.	川田修太郎, 坂 口正貴, 米倉伊 吹, 奥脇弘次, <u>望月祐志</u> , <u>福澤</u>	ペプチド類のフラグメント分 子軌道計算	日本コンピュータ 化学会 2016 春季 年会	東京工業大学 (目黒区)	2016/6

	<u>薫</u>				
394.	<u>望月祐志</u> ・中村昇太・ <u>山中正造</u> ・山田康之・工藤光子・ <u>常盤広明</u> ・川上勝・北本俊二	化学・生命科学系の理学教育における 3D プリンタの活用事例	日本コンピュータ化学会 2016 春季年会	東京工業大学 (目黒区)	2016/6
395.	Sladek, V., Juraj Kóňa, <u>Tokiwa, H.</u>	Ab initio interpretation of receptor ... ligand binding in Golgi $\alpha$ -mannosidase II	The 10th Interbational Symposium on glycosyltransferases (GlycoT 2016)	Toronto, (Canada)	2016/6
396.	加藤裕也・横田智洋・Nongluk Sriwilaijaroen・横江弘雅・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	<u>梅エキスを先導化合物とした抗インフルエンザ薬の構造活性相関研究(*学 396)</u>	創薬懇話会 2016	エクシブ蓼科 (茅野市)	2016/6
397.	石川雄規・松尾直也・津吹政可・加藤大志・竹田誠・ <u>常盤広明</u>	<u>ムンプスウイルス表面タンパク質 HN を標的とした合理的創薬の可能性(*学 397)</u>	創薬懇話会 2016	エクシブ蓼科 (茅野市)	2016/6
398.	<u>Miyabe, K.</u>	<u>Introduction of Moment Analysis Theory to Kinetic Study of Intermolecular Interaction by Affinity Capillary Electrophoresis(*学 398)</u>	40th International Symposium on Capillary Chromatography (ISCC2016)	Riva del Garda, (Italy)	2016/6
399.	<u>宮部寛志</u>	<u>アフィニティキャピラリー電気泳動へのモーメント解析理論の適用による分子間相互作用の速度解析法の開発(*学 399)</u>	日本ケミカルバイオロジー学会第 11 回年会	京都テルサ (京都市)	2016/6
400.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシル基を導入したシリレンの発生と捕捉反応	第 11 回有機元素化学セミナー	京都大学 (宇治市)	2016/6
401.	鈴木文陽・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシル基を有するかさ高い芳香族置換基の合成と反応	第 11 回有機元素化学セミナー	京都大学 (宇治市)	2016/6
402.	<u>箕浦真生</u>	トリプチシル基を活用した高反応性典型元素化学種の速度論的安定化 (招待講演)	第 11 回有機元素化学セミナー	京都大学 (宇治市)	2016/6

403.	<u>上谷幸治郎・岡田拓巳・大山秀子</u>	<u>熱を伝えるナノセルロース不織シート</u> ( * 学 403)	平成 28 年度繊維学会年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/6
404.	中村裕介、谷島大介、 <u>大山秀子</u> 、小川亮平	<u>水崩壊性ポリ乳酸モノリスの構造と加水分解速度</u> ( * 学 404)	プラスチック成形加工学会第 27 回年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/6
405.	<u>上谷幸治郎・岡田拓巳・大山秀子</u>	伝熱ナノファイバーを用いた複合材料の熱伝導特性	プラスチック成形加工学会第 27 回年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/6
406.	岡田拓巳・ <u>上谷幸治郎・大山秀子</u> ・野中勇利	高伝熱性ナノセルロースシートの透明化 ( <u>優秀学生ポスター賞受賞</u> )	プラスチック成形加工学会第 27 回年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2016/6
407.	<u>望月祐志</u> , 牧村健	科学分野における <u>Azure Machine Learning の有用性: 計算化学からの一例</u> ( * 学 407) ( <u>依頼講演</u> )	第二回 IoT ビジネス共創ラボ勉強会	品川グランドセントラルタワー (港区)	2016/5
408.	奥脇弘次, 川田修太郎, <u>望月祐志</u> , 大畠広介, 小沢拓	<u>FMO 計算を援用する高分子マルチスケールシミュレーション</u> ( * 学 408)	理論化学討論会	早稲田大学 (新宿区)	2016/5
409.	<u>常盤広明</u>	<u>最新の計算化学とバイオインフォマティクスを基盤とした計算ウイルス学の可能性</u> ( * 学 409) ( <u>招待講演</u> )	第 51 回日本脳炎ウイルス生態学研究会	ホテルリステル猪苗代 (猪苗代町)	2016/5
410.	中野克洋、小田木陽、長澤和夫、 <u>山中正造</u>	<u>グアニジン-ビスチオウレア触媒を用いた不斉 Friedel-Crafts 反応に関する理論的研究</u> ( * 学 410)	第 71 回有機合成化学協会関東支部シンポジウム	東京農工大学 (小金井市)	2016/5
411.	亀井優斗、渡辺旺嗣、杉山典幸、荒井孝義、矢部真之介、 <u>山中正造</u>	<u>ビスアミノイミノビナフトール亜鉛三核錯体を用いた不斉ヨードラクトン化反応の理論的研究</u> ( * 学 411)	第 71 回有機合成化学協会関東支部シンポジウム	東京農工大学 (小金井市)	2016/5
412.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Tautomerization Involving Oxidation State Change of a Stable Enesulfenic Acid: Synthesis and Reaction	5th Workshop of SeS Redox and Catalysis	東海大学 (平塚市)	2016/5
413.	Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	<u>Synthesis, Structure and Reactivity of Tetraphenyltellurium Dication Species</u> ( * 学 413)	The 13th International Conference on the Chemistry of	Gifu, (Japan)	2016/5

			Selenium and Tellurium		
414.	Wada, K.; Kuwana, Y.; Suzukawa, N.; Kashiwaba, T.; <u>Minoura, M.</u> ; Yamamoto, Y.	<u>Synthesis of Hypervalent Tellurium Compound with New Soluble Spherand</u> ( * 学 414)	The 13th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium	Gifu, (Japan)	2016/5
415.	<u>Miyabe, K.</u>	<u>Moment Analysis Method Using Capillary Electrophoresis for Kinetic Study of Intermolecular Interaction</u> ( * 学 415)	32nd International Symposium on Microscale Separations and Bioanalysis (MSB 2016)	Niagara-on-the-Lake, (Canada),	2016/4
416.	山本絵莉、 <u>山中正造</u>	リン酸-ボラン触媒による $\alpha\beta$ -不飽和ケトンの不斉 1,4-還元反応の理論的研究	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
417.	野田洋史・寺田眞浩・榎山儀恵・ <u>山中正造</u>	カルボン酸-リン酸触媒を用いた不斉ヘテロ Diels-Alder 反応の理論的研究	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
418.	亀井優斗・渡辺旺嗣・杉山典幸・井孝義・矢部真之介・ <u>山中正造</u>	ビスアミノイミノビナフトール 亜鉛三核錯体を用いた不斉 ヨードラクトン化反応の理論的研究”	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
419.	中野克洋・小田木陽・長澤和夫・ <u>山中正造</u>	グアニジン-ビスチオウレア触媒を用いた不斉 Friedel-Crafts 反応に関する理論的研究	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
420.	尖戸健人・ <u>山中正造</u>	二点水素結合を介した立体・会合制御を基盤とする超分子型不斉触媒の開発	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
421.	岡直輝・ <u>山中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒による $\alpha$ -ケトエステルの不斉アルキル化反応における基質一般性の拡張	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
422.	倉澤香澄、 <u>山中正造</u>	金属ビスアミジン触媒を用いた $\alpha$ -ケトエステルの不斉ピニロガス向山アルドール反応の開発	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
423.	野本拓実、 <u>山中正造</u>	キラル Ag(I)-ビスアミジン触媒を用いたインドールと $\alpha$ 置	日本化学会 第 96 春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3

		換-β-ニトロアクリレートの不斉 Friedel-Crafts アルキル化反応の開発			
424.	市之瀬篤・ <u>山中正造</u>	亜鉛ビスアミジナート触媒を用いたα-ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応におけるエナンチオ選択性の逆転現象	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
425.	三島かなえ・ <u>和田亨</u>	単核ルテニウム-ビス(ターピリジル)アントラセン錯体とルイス酸性金属イオンとの相互作用	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
426.	安藤友宏・ <u>和田亨</u>	複数の窒素原子を含む複素環配位子を有するルテニウム錯体の酸塩基平衡と酸化還元挙動	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
427.	原 奈摘子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を両オルト位に有する <i>N</i> -チオスルフィニルアニリンの合成と反応	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
428.	石原充裕・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシル基を基盤とする新規脂肪族立体保護基の合成と16族元素高反応性化学種安定化への応用	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
429.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	かさ高い置換基を導入したシラン類の合成と反応	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
430.	小林 翔・ <u>箕浦真生</u>	炭素置換基のみを有する6価テルルモノ及びジカチオン種の合成と官能基化	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
431.	鈴木文陽・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を両メタ位に有するかさ高い芳香族置換基の合成	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
432.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Tautomerization and Reaction of a kinetic Stabilized Enesulfenic Acid	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
433.	入江達也・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を両オルト位に導入したベンゼンチオール誘導体とスルフェン酸の合成	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
434.	速川琴菜・ <u>箕浦真生</u>	テトラアリアルテルル(IV)の熱安定性	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
435.	<u>枝元一之</u> ・中村卓哉・杉崎裕	Ag(100)表面におけるバナジウム酸化物薄膜の合成	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3

	一・小澤健一				
436.	本山寛大・ <u>枝元一之</u> ・杉崎裕一・小澤健一	Fe <sub>2</sub> P(10-10)表面における共鳴光電子分光	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
437.	杉崎裕一・本山寛大・大和千春・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一	リン偏析に伴う Fe <sub>2</sub> P(10-10)の電子状態の変化	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
438.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ベンゾホスホール基を有するジアリアルエテンのフォトクロミズム (口頭発表)	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
439.	稲葉航平・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ジピロリルエテン誘導体の熱退色型フォトクロミズム (口頭発表)	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
440.	千葉宏香・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	交互積層法によるフォトメカニカル分子結晶表面の高分子修飾 (口頭発表)	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
441.	榎原遼太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリアルエテンの単結晶フォトクロミズム (口頭発表)	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
442.	稲留徹・八木亮・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリアルエテンの水 中におけるフォトクロミズムと 蛍光特性 (ポスター発表)	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
443.	村松正康・安田直晃・池上雄大・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	Ti:Sapphire レーザー照射による高次多光子吸収を用いたジアリアルエテンの一波長開環-閉環反応制御 (ポスター発表)	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
444.	田中李叶子, <u>松下信之</u>	鉄錯体電子ドナーとジヒドロピリジニウムからなる電荷移動塩の相変化	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
445.	加藤 茜, <u>松下信之</u>	テトラシアニド白金錯体とプロピルビオロゲンからなる電荷移動塩の発光の湿度依存性	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3
446.	波多野絵理・ <u>森本正和</u> ・横島智・中村振一	ペルフルオロシクロヘキセン環を有するジアリアルエテンのフォトクロミズム	日本化学会 第96春季年会	同志社大学 (京田辺市)	2016/3

	郎・安田伸広・ 内田欣吾	(ポスター発表)			
447.	奥脇弘次・望月 祐志・川田修太 郎・小沢拓・大 畠広介	フラグメント分子軌道計算と 粗視化シミュレーションの連 携の試み	2015 年度 高分 子基礎物性研究 会・高分子計算 機科学研究会合 同討論会	大阪大学 (北区)	2016/3
448.	望月祐志・奥脇 弘次・川田修太 郎・石川雄太 郎・加藤幸一 郎・大畠広介・ 小沢拓	フラグメント分子軌道法の高 分子関連分野への応用	2015 年度 高分 子基礎物性研究 会・高分子計算 機科学研究会合 同討論会	大阪大学 (北区)	2016/3
449.	加藤幸一郎・ 石川雄太郎・ 奥脇弘次・川田 修太郎・望月祐 志・小沢拓	FMO 法に基づく高分子材料 とシリカナノ粒子の相互作用 モデリング	2016 年応用物理 学会春季学術講 演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3
450.	奥脇弘次・川田 修太郎・望月祐 志・大畠広介・ 小沢拓	FMO 計算を援用する高分子 マルチスケールシミュレーシ ョン	2016 年応用物理 学会春季学術講 演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3
451.	望月祐志・古明 地勇人・井山剛 志・奥沢明・牧 村健・中西貴 哉・田中成典	機械学習を援用した Chignolin のアミノ酸残基間 の相互作用解析	2016 年応用物理 学会春季学術講 演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3
452.	川田修太郎・坂 口正貴・米倉伊 吹・奥脇弘次・ 望月祐志・福澤 薫	ペプチド類のフラグメント分 子軌道計算	2016 年応用物理 学会春季学術講 演会	東京工業大学 (目黒区)	2016/3
453.	常盤広明・中村 昇太・松尾直 也・山本雄大・ 岡崎誠司・望月 祐志・川上勝	3D プリンタが切り開く新規創 薬カテゴリ (見て、触って、 閃いて! 今開かれる新たな 創薬の世界) (報道向けハイライト講演、 口頭発表)	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
454.	井川貴詞・福元 豊・村上智成・ 高木晃・青山 浩・山本雄大・ 常盤広明・赤井	多環式ベンザインの環化付 加反応による新規ヘリセン様 分子の合成	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3

	周司				
455.	加藤裕也・横田智・Nongluk SRIWILAIJAR OEN・横江弘雅・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	<u>梅エキス抽出物を先導化合物とした新規作用機序を示す抗インフルエンザ薬の開発</u> (*学 455)	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
456.	岡崎誠司・松尾直也・石坪江梨花・島野仁・ <u>常盤広明</u>	<u>高精度第一原理計算を用いた DPP-4 阻害薬に関する理論的研究</u> (*学 456)	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
457.	松尾直也・岡崎誠司・ <u>池田潔</u> ・高橋忠伸・鈴木隆・von Itzstein MARK・ <u>常盤広明</u>	<u>第一原理計算および分子動力学シミュレーションを用いた抗ヒトパラインフルエンザ薬に関する理論的研究</u> (*学 457)	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
458.	山本雄大・松尾直也・高木晃・井川貴詞・赤井周司・ <u>常盤広明</u>	顕わに溶媒分子を考慮した溶媒効果に基づく環状付加反応の理論的研究	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
459.	熊谷茜・Rocio Garcia OTERO・松尾直也・岡崎誠司・渡會友祐・榎島誠・山田幸子・Antonio MOURINO・ <u>常盤広明</u>	<u>ビタミンD 受容体とリガンド複合体の水素結合ネットワークに関する理論的解析</u> (*学 459)	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
460.	夏目継介・松尾直也・岡崎誠司・中野祥吾・伊藤創平・加来田博貴・ <u>常盤広明</u>	<u>RXR パーシャルアゴニストに関する理論的研究</u> (*学 460)	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
461.	丸藤友彦・岡崎誠司・武井健太・中川嘉・島野仁・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算および MD シミュレーションによる核内受容体 PPARs と遊離脂肪酸との理論的結合解析	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3
462.	井川貴詞・福元豊・村上智成・高木晃・青山	<u>多環式ベンザインの環化付加反応による新規ヘリセン様分子の合成</u> (*学 462)	日本薬学会第136 年会	パシフィコ横浜(横浜市)	2016/3

	浩・山本雄大・ <u>常盤広明</u> ・赤井 周司				
463.	藤田侑・岡崎誠 司・高橋忠伸・ 鈴木隆・ <u>池田 潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	<u>インフルエンザ A 型ウイルス のヘマグルチニンと硫酸化 糖脂質スルファチドの理論的 結合解析(*学 463)</u>	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
464.	石川雄規・松尾 直也・津吹政 可・加藤大志・ 竹田誠・ <u>常盤広 明</u>	<u>ムンプスウイルス表面タンパ ク質 HN に関する理論的研 究(*学 464)</u>	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
465.	<u>黒田智明</u> 、田邊 沙也子、青山奈 央、花井 亮、 岡本育子、通 元夫、Gong Xun	中国雲南省香格里拉県にお けるキク科 <i>Ligularia duciformis</i> およびその雑種の 化学成分と ITS 塩基配列	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
466.	川邊浩史、小宮 山哲平、齋藤義 紀、Gong Xun、 廣田 洋、大崎 愛弓	中国産 <i>Salvia grandifolia</i> お よび <i>Salvia</i> sp.の成分研究	日本薬学会第 136 年会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2016/3
467.	<u>常盤広明</u>	先行事例発表 第一原理計 算を用いた合理的創薬 (依頼講演)	第 28 回 CMD ワ ークショップ	大阪大学 (茨木市)	2016/3
468.	Ishihara, M.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis, Structure and Reactivity of Thermally Stable Sulfenic Acid a Novel Aliphatic Steric Protection Group	The 3 <sup>rd</sup> International Symposium for Young Chemists on Stimuli- responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules	名古屋大学 (名古屋市)	2016/3
469.	Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Reactivity of Tetraphenyltellurium(VI) Dications	The 3 <sup>rd</sup> International Symposium for Young Chemists on Stimuli- responsive Chemical Species for the Creation	名古屋大学 (名古屋市)	2016/3

			of Functional Molecules		
470.	Hara, N.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Reaction of <i>N</i> -Thiosulfinylaniline Derivative Bearing 9-Triptycyl Groups	The 3 <sup>rd</sup> International Symposium for Young Chemists on Stimuli-responsive Chemical Species for the Creation of Functional Molecules	名古屋大学 (名古屋市)	2016/3
471.	吉信淳・近藤寛・坂本一之・小澤健一・櫻井岳暎・ <u>枝元一之</u> ・中辻寛・間瀬一彦・中村潤児	エネルギー変換材料の表面界面物性:VUV/SX 放射光分光による研究	2015 年度量子ビームサイエンスフェスタ	つくば国際会議場 (つくば市)	2016/3
472.	<u>枝元一之</u> ・石田周平・杉崎裕一・中村卓哉	Ag(100)上に作成したバナジウム酸化物結晶性薄膜の NEXAFS と軟 X 線 PES による研究	2015 年度量子ビームサイエンスフェスタ	つくば国際会議場 (つくば市)	2016/3
473.	<u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道法プログラム ABINIT-MP のものづくり分野への展開 (依頼講演)	産応協、CMSI、ポスト京重点課題 5・6・7 合同産学官連携シンポジウム 2016	ステーションコンファレンス東京 (千代田区)	2016/2
474.	中野祥吾・伊藤創平・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	<u>量子化学およびバイオインフォマティクス手法を用いたパラミクソウイルスの創薬標的タンパク質に関する理論的研究</u> (*学 474)	5th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ホテルモントレ 沖縄 (国頭郡)	2016/1
475.	<u>宮部寛志</u>	非固定化かつ非化学修飾状態における分子間相互作用の速度解析法	第 6 回化粧品開発展	東京ビッグサイト (江東区)	2016/1
476.	<u>Mitsui, M.</u> ; Mori, K.; Wakabayashi, N.; Kawano, Y.	Laser Microscopy Approach to Reveal Heterogeneous Photovoltaic Characteristics and Photoconversion Kinetics in Dye-sensitized Solar Cells (招待講演)	EMN Meeting on Photovoltaics 2016	Hong Kong, (China)	2016/1
477.	<u>Fukuzawa, K.</u> ;	Application of fragment	The 2015	Hawaii,	2015/12

	Watanabe, C.; Okiyama, Y.; Watanabe, H.; Honma, T.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Anzaki, S.; Tanaka, S.	molecular orbital method for structure-based drug design	International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	(USA)	
478.	Sakaguchi, M.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u>	Benchmark for new fragmentation breaking peptide bonds	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
479.	Fujita, Y.; Okazaki, S.; Takahashi, T.; Suzuki, T.; <u>Ikeda, K.</u> ; <u>Tokiwa, H.</u> ,	Theoretical interaction analysis between hemagglutinin of influenza A virus and sulfatide	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
480.	Okazaki, S.; Ishitsubo, E.; Nakano, Y.; Shimano, H.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical study on potency and selectivity of dipeptidyl peptidase IV inhibitors using the first-principles calculation	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
481.	<u>Yamanaka, M.</u>	Transition-state stabilization through multiple attractive non-covalent interactions in organocatalysis: A computational study	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
482.	Nomoto, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Ag(I)-bisamidine catalyzed asymmetric Friedel-Crafts alkylation of indoles with $\alpha$ -substituted- $\beta$ -nitroacrylates	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
483.	Yamamoto, E.; <u>Yamanaka, M.</u>	DFT study of chiral phosphoric acid catalyzed 1, 4-reduction of $\alpha,\beta$ -unsaturated ketones	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
484.	Noda, H.; <u>Yamanaka, M.</u>	Theoretical study on chiral bis-phosphoric acid catalyzed asymmetric Diels-Alder reaction	The 2015 International Chemical Congrass of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12

485.	Shishido, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Development of self-assembled asymmetric catalyst based on two-point hydrogen bonding interaction	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
486.	Saito, Y.; Takashima, Y.; Kamada, A.; Iga, S.; Taniguchi, M.; Hoshiyama, K.; Hayami, C.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Hanai, R.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Chemical and genetic diversity of <i>Ligularia virgaurea</i>	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
487.	<u>Kuroda, C.</u> ; Shibayama, C.; Inoue, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Saito, Y.; Hanai, R.; Gong, X	Chemical Lineages of <i>Ligularia fischeri</i> and <i>L. veitchiana</i>	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
488.	Ogata, M.; Saito, Y.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Kawahara, T.; Hanai, R.; Matsuo, Y.; Tanaka, T.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	Intra-specific diversity in cytotoxic sesquiterpene lactone constituents of <i>Eupatorium heterophyllum</i> collected in P. R. China	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
489.	Otomo, I.; <u>Kuroda, C.</u>	Hydrophobic effect in the reaction of amphiphilic thioesters with alkyl amines in water	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
490.	Nishimura, S.; <u>Wada, T.</u> ; Miyazato, Y..	Water oxidation catalyzed by the dinuclear ruthenium complex bridged by bis(terpyridyl)anthraquinone	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12

491.	Tokinobu, H.; Miyazato, Y.; <u>Wada, T.</u>	Synthesis and characterization of a pyrophosphate-bridged dinuclear ruthenium complex with 1,4,7-triethyl-1,4,7-triazacyclononane	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
492.	Miyazato, Y.; <u>Wada, T.</u>	Construction of new water oxidation catalyst with a pyrophosphate-bridged Ru <sub>2</sub> (III, IV) framework	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
493.	Wada, M.; Miyazato, Y.; <u>Wada, T.</u>	Four-electron reduction of dioxygen catalyzed by dinuclear cobalt complex	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
494.	<u>Miyabe, K.</u> ; Shimazaki, Y.	Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE): A Method for Kinetic Study of Intermolecular Interaction	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
495.	Shimazaki, Y.; <u>Miyabe, K.</u>	Kinetic study of intermolecular interaction by capillary electrophoresis ~Clathration reaction of thymol with sulfated- $\beta$ -cyclodextrin~	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
496.	<u>Edamoto, K.</u> ; Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.	NEXAFS and soft X-ray photoelectron spectroscopy studies on ordered V oxide films on Ag(100)	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
497.	Tanaka, R.; <u>Matsushita, N.</u>	Acid-induced vapochromism on a charge-transfer salt composed of an organic acceptor and an iron(II) complex	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
498.	Kato, A.; Uenohara, W.; <u>Matsushita, N.</u>	Humidity-dependence of luminescent property on a charge-transfer salt composed of tetracyanidoplatinate(II) and an organic acceptor cation	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12

499.	Nakamura, Y.; <u>Uetani, K.</u> ; <u>Oyama, H. T.</u>	In vitro hydrolytic degradation of biodegradable poly (L-lactic acid) blend monoliths	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
500.	Yamada, E.; <u>Uetani, K.</u> ; <u>Oyama, H. T.</u>	Effects of the interfacial reaction on morphology and toughness of polyamide 6 blends with ethylene copolymers carrying different reactive groups	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
501.	Okada, T.; <u>Uetani, K.</u> ; <u>Oyama, H. T.</u>	Thermal conductive properties of nanocellulose materials	The 2015 International Chemical Congress of the Pacific Basin Societies	Hawaii, (USA)	2015/12
502.	中野祥吾・安川和志・松尾直也・石坪江梨香・ <u>常盤広明</u> ・浅野泰久	R 選択的な FAD 依存型アミン酸化酵素の基質認識機構解明	第 38 回日本分子生物学会年会、第 88 回日本生化学会大会合同大会	神戸ポートピアホテル (神戸市)	2015/12
503.	<u>宮部寛志</u> ・島崎裕紀	分子の固定化や化学修飾が不要な分子間相互作用の速度解析法の開発	新アミノ酸分析研究会第 5 回学術講演会	東京大学武田先端知ビル (文京区)	2015/12
504.	小林 翔・ <u>箕浦真生</u>	6 価テルルモノ及びジカチオン種の合成と官能基化	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
505.	古川俊輔・藤田雅大・金富芳彦・ <u>箕浦真生</u> ・畑中美穂・諸熊奎治・斎藤雅一	ヘキサキス(フェニルセラニル)ベンゼンジカチオンの $\sigma$ -芳香族性	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
506.	原 奈摘子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチルメチル基を有する嵩高いアニリン誘導体の合成と反応	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
507.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチルメチル基を有するシラン類の合成	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
508.	石原充裕・ <u>箕浦真生</u>	トリプチル基を基盤とした立体保護基の合成と含硫黄高反応性化学種安定化への応用	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12
509.	入江達也・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	トリプチルメチル基を有する芳香族スルフェン酸の合成	第 42 回有機典型元素化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2015/12

510.	<u>枝元一之</u> ・中村卓哉・杉崎裕一・小澤健一	Ag(100)におけるバナジウム酸化物超薄膜の合成	第35回表面科学学会学術講演会	つくば国際会議場 (つくば市)	2015/12
511.	杉崎裕一・大和千春・本山寛大・為成一輝・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一	内殻準位光電子分光によるFe <sub>2</sub> P(10-10)	第35回表面科学学会学術講演会	つくば国際会議場 (つくば市)	2015/12
512.	<u>Mochizuki, Y.</u>	ABINIT-MP: a program system for fragment molecular orbital calculations (Invited Talk)	5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward exascale computing	Tokyo, (Japan)	2015/11
513.	<u>望月祐志</u>	FMO 計算プログラム ABINIT-MP のものづくり分野への応用 (依頼講演)	J-OCTA ユーザー会議 2015	東京コンファレンスセンター・品川 (港区)	2015/11
514.	松尾直也・岡崎誠司・ <u>池田潔</u> ・高橋忠伸・鈴木隆・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	デュアル効果を有する抗パラインフルエンザウイルス薬に対する理論的研究	第33回メディシナルケミストリーシンポジウム	幕張国際研修センター (千葉市)	2015/11
515.	藤田侑・岡崎誠司・高橋忠伸・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	ウイルス増殖促進シグナルを担うインフルエンザウイルス結合性糖脂質を標的とした新規抗インフルエンザウイルス薬開発の可能性	第33回メディシナルケミストリーシンポジウム	幕張国際研修センター (千葉市)	2015/11
516.	Suzuki, T.; Fukushima K.; Takahashi, T.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Takimoto, T.	Amino acids contributing to $\alpha$ 2,6-sialyl linkage binding of hPIV3 HN protein	第63回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場 (福岡市)	2015/11
517.	Fujita, Y.; Okazaki, S.; Takahashi, T.; Suzuki, T.;	Theoretical binding analysis of influenza A virus hemagglutinin with sulfatide	第63回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場 (福岡市)	2015/11

	<u>Ikeda, K.</u> ; <u>Tokiwa, H.</u>				
518.	Igarashi, M.; Sekijima, M.; Yasuo, N.; Abe T.; Yoshida, R.; Watabe, T.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Hirokawa T.; Takada, A.	Computational analysis of common epitope recognized by a broadly neutralizing monoclonal antibody against influenza A virus hemagglutinin	第 63 回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場 (福岡市)	2015/11
519.	Hidari, K.; Abe, T.; Sando, A.; Teraoka, F.; <u>Otsubo, T.</u> ; Morita, K.; Suzuki, T.; <u>Tokiwa, H.</u> ; <u>Ikeda, K.</u>	Mechanisms on anti-dengue virus activity of glucuronide derivatives	第 63 回ウイルス学会学術集会	福岡国際会議場 (福岡市)	2015/11
520.	<u>山中正浩</u>	分子触媒反応における立体制御機構に関する理論的研究	平成 27 年度後期(秋季)有機合成化学講習会	日本薬学会長井記念館長井記念ホール (渋谷区)	2015/11
521.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>島崎裕紀</u>	キャピラリー電気泳動法による分子間相互作用の会合・解離速度定数の測定	第 37 回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム	熊本大学 (熊本市)	2015/11
522.	Yukimoto, Y.; <u>Minoura, M.</u>	Isolation and Tautomerization of a Stable Enesulfenic Acid Bearing Bulky Group	Stimulating Meeting for Young Researchers in Chemistry on Stimuli-responsive Chemical Species	京都大学 (宇治市)	2015/11
523.	Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Functionalization of Monofluorotetraaryltellurium (VI)	Stimulating Meeting for Young Researchers in Chemistry on Stimuli-responsive	京都大学 (宇治市)	2015/11

			Chemical Species		
524.	Suzuki, F.; <u>Minoura M.</u>	Synthesis of Bulky Aromatic Compounds Bearing 9-Triptycylmethyl Groups in meta-Positions	Stimulating Meeting for Young Researchers in Chemistry on Stimuli-responsive Chemical Species	京都大学 (宇治市)	2015/11
525.	田中李叶子・岡澤 厚・小島憲道・ <u>松下信之</u>	ジヒドロピリジニウムと鉄錯体からなる電荷移動塩の酸蒸気によるベイポクロミズム	第 24 回有機結晶シンポジウム	広島大学 (広島市)	2015/11
526.	加藤 茜・ <u>松下信之</u>	エチルビオロゲンとテトラシアニド白金(II)錯体からなる電荷移動塩における水分子の取り込み・放出による結晶相変化	第 24 回有機結晶シンポジウム	広島大学 (広島市)	2015/11
527.	谷島大介・山下明希子・ <u>大山秀子</u> ・ <u>小川亮平</u>	水崩壊性ポリ乳酸ブレンドの加水分解挙動:ブレンドの高次構造および pH 条件の影響 (優秀ポスター賞受賞)	成形加工シンポジウム'15	福岡大学 (福岡市)	2015/11
528.	中村裕介・ <u>大山秀子</u>	水崩壊性ポリ乳酸ブレンドモノリスの加水分解挙動	成形加工シンポジウム'15	福岡大学 (福岡市)	2015/11
529.	岡田拓巳・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	高熱伝導性ナノセルロースシート(*学 529)	成形加工シンポジウム'15	福岡大学 (福岡市)	2015/11
530.	岡田拓巳・ <u>上谷幸治郎</u> ・ <u>大山秀子</u>	天然由来の高熱伝導ナノファイバー材料(*学 530)	第 24 回ポリマー材料フォーラム	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/11
531.	中村裕介・ <u>大山秀子</u>	ポリ乳酸ブレンドモノリスの in vitro での加水分解挙動	第 24 回ポリマー材料フォーラム	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/11
532.	川田修太郎・藤田貴敏・ <u>望月祐志</u>	FMO 法を用いた分子性結晶の扱い	日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会	函館市地域交流まちづくりセンター(函館市)	2015/10
533.	亀井優斗・ <u>山中正浩</u> ・杉山典幸・牧野宏輝・荒井孝義	ビスアミノイミノピナフトール亜鉛三核錯体を用いた触媒的不斉ヨードラクトン化反応の理論的研究	第 5 回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
534.	中野克洋・ <u>山中正浩</u> ・加藤賢・	グアニジン-ビスチオウレア触媒を用いた不斉フリーデ	第 5 回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀	2015/10

	長澤和夫	ルクラフツ反応の理論的研究		(江戸川区)	
535.	小林 翔・ <u>箕浦真生</u>	モノフルオロテトラフェニルテルロニウム塩の合成と官能基化	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
536.	入江達也・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	トリプチシルメチル基を導入したベンゼンチオール誘導体の合成と反応	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
537.	原奈摘子・ <u>箕浦真生</u>	複数のトリプチシル基を有するアニリン誘導体の合成と反応	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
538.	加藤 茜・ <u>松下信之</u>	テトラシアニド白金(II)錯体とジエチルピオロゲンからなる発光性電荷移動塩の相変化と湿度依存性	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
539.	廣口 瑛一・井上 翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	(D- $\pi$ ) <sub>5</sub> -A-COOH 構造を有する $\pi$ 電子系有機色素を用いた色素増感太陽電池の創製と特性評価	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
540.	森 京介・ <u>三井正明</u>	単一粒子顕微蛍光分光による有機金属ハライドペロブスカイトナノ粒子の光物性の解明	第5回 CSJ 化学フェスタ	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/10
541.	Nakano, S.; Tokiwa, T.; Tateno, H.; Kishimoto, N.; Ito, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Hirabayashi, J.	Development of PyMOL plug-in, PaicsPy, to evaluate protein-ligand interaction by FMO method	20th Shizuoka Forum on Health and longevity	Shizuoka (Japan)	2015/10
542.	中野祥吾・常盤恭樹・館野浩章・岸本直樹・伊藤創平・ <u>常盤広明</u> ・平林 淳	タンパク質-リガンド間の高精度全電子計算の実行を支援する PyMOL プラグイン, PaicsPy の開発	TOGO の日シンポジウム 2015	東京大学 (文京区)	2015/10
543.	井川貴詞・清水和則・高木晃・後藤雅彦・ <u>常盤広明</u> ・赤井周司	ボリル基を用いるベンザインの多成分位置制御連結反応及びその計算化学的解析	第41回反応と合成の進歩シンポジウム	近畿大学 (東大阪市)	2015/10
544.	井川貴詞・福元豊・村上智成・高木晃・青山浩・ <u>常盤広明</u> ・	ベンザインの連続環化付加反応による新規らせん状分子の合成	第65回日本薬学会近畿支部総会・大会	大阪大谷大学 (富田林市)	2015/10

	赤井周司				
545.	高木晃・井川貴 詞・清水和則・ <u>常盤広明</u> ・赤井 周司	計算化学を用いるベンザイン 多成分連結反応の位置選択 性発現機構解析	第 65 回日本薬学 会近畿支部総 会・大会	大阪大谷大学 (富田林市)	2015/10
546.	西村俊祐・安藤 友宏・宮里裕 二・ <u>和田 亨</u>	ビス(ターピリジル)アントラ キノンで架橋された二核ルテ ニウム錯体による水の酸化 の反応機構解明	第 48 回酸化反応 討論会	同志社大学 (京都市)	2015/10
547.	<u>Irie, M.</u>	Diarylethene crystals that convert light into mechanical work: An approach to molecular machinery (招待講演)	International Workshop for Photo- and Electro-Molecular Machines	Toulouse, (France)	2015/10
548.	田中李叶子・ <u>松 下信之</u>	ビピリジン骨格を有する有機 アクセプター分子と鉄錯体電 子ドナーからなる新規電荷 移動塩の構築と結晶構造	日本結晶学会平 成 27 年度年会	大阪府立大学 (堺市)	2015/10
549.	岡田拓巳・ <u>上谷 幸治郎</u> ・ <u>大山秀 子</u>	ナノセルロース不織シートの 熱拡散率における結晶子サ イズ効果(*学 549)	第 36 回日本熱物 性シンポジウム	東北大学 (仙台市)	2015/10
550.	加藤幸一郎・ <u>福 澤薫</u> ・ <u>望月祐志</u>	FMO法を用いたアパタイト結 晶表面とペプチドの相互作 用解析(招待発表)	2015 年応用物理 学会秋季学術講 演会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2015/9
551.	<u>望月祐志</u> ・奥脇 弘次・石川雄太 郎	フラグメント分子軌道計算に よる NaCl 表面と分子の相互 作用解析	2015 年応用物理 学会秋季学術講 演会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2015/9
552.	<u>Tokiwa, H.</u> ; Okazaki, S.; <u>Otsubo, T.</u> ; <u>Ikeda, K.</u> ; <u>Morimoto, M.</u> ; Kinoshita, T.; <u>Irie, M.</u>	Rational development and biological application of water-soluble fluorescent photochromic diarylethenes which have sugar substituents	23 <sup>rd</sup> International Symposium on Glycoconjugates	Split, (Croatia)	2015/9
553.	Sando, A.; Abe, T.; Okazaki, S.; Hidari, I.P.J. K.; <u>Otsubo, T.</u> ; Teraoka, F.; <u>Ikeda, K.</u> ; Suzuki, T.; Morita, K.	Theoretical study of anti-dengue virus inhibitors using the first-principles calculation and MD simulaton	23 <sup>rd</sup> International Symposium on Glycoconjugates	Split, (Croatia)	2015/9

	<u>Tokiwa, H.</u>				
554.	Fujita, Y.; Okazaki, S.; Takahashi, T.; Suzuki, T.; <u>Ikeda, K.</u> ; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical binding analysis of influenza A virus hemagglutinin with sulfatide	The 14th Awaji International Forum on Infection and Immunity	Kobe, (Japan)	2015/9
555.	Matsuo, N.; Okazaki, S.; Takahashi, T.; Suzuki, T.; <u>Ikeda, K.</u> ; von Itzstein, M.; <u>Tokiwa, H.</u>	Novel in silico analysis between human parainfluenza virus and potent candidates using the first-principles calculations	The 14th Awaji International Forum on Infection and Immunity	Kobe, (Japan)	2015/9
556.	藤田侑・岡崎誠司・高橋忠伸・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	ウイルス増殖促進シグナルを担うインフルエンザウイルス結合性糖脂質の理論的解析	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
557.	加藤裕也・横田智洋・Nongluk Sriwilaijaroen・横江弘雅・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	梅エキスを先導化合物とした抗インフルエンザ薬の構造活性相関研究	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
558.	松尾直也・岡崎誠司・ <u>池田潔</u> ・高橋忠伸・鈴木隆・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	FMO 法および MD シミュレーションを用いた抗ヒトパラインフィルエンザ化合物に関する理論的解析 (優秀ポスター賞)	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
559.	熊谷茜・岡崎誠司・渡會友祐・榎島誠・山田幸子・ <u>常盤広明</u>	アダマンチル基と2つの三重結合を有するビタミンD誘導体に関する理論的研究 (優秀ポスター賞)	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
560.	夏目継介・岡崎誠司・中野祥吾・伊藤創平・加来田博貴・ <u>常盤広明</u>	RXR パーシャルアゴニストに関する理論的研究 (優秀ポスター賞)	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
561.	亀井貴司・岡崎誠司・石坪江梨花・島野仁・ <u>常盤広明</u>	PPAR $\alpha$ スーパーアゴニストに関する理論的研究	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9

562.	杉山俊樹・岡崎誠司・渡邊泰雄・山田静雄・ <u>常盤広明</u>	脂肪酸複合体のβ受容体に対するシナジー効果に関する理論的研究	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
563.	立原勇武・中野祥吾・岡崎誠司・伊藤創平・ <u>常盤広明</u>	PyMOL プラグインを用いた糖鎖-レクチンデータベースの効率的活用法	第59回日本薬学会関東支部大会	日本大学(船橋市)	2015/9
564.	Matsuo, N.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical interaction analysis between virus and candidates using the first-principles calculations	第4回感染症若手フォーラム	アテナ海月(淡路氏)	2015/9
565.	Fujita, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	In silico analysis of viral envelope glycoproteins	第4回感染症若手フォーラム	アテナ海月(淡路氏)	2015/9
566.	<u>山中正浩</u>	有機分子触媒反応における立体制御機構に関する理論的研究	第116回触媒討論会	三重大学(津市)	2015/9
567.	齋藤義紀, 高橋宏明, 岡本育子, 中島勝幸, 通元夫, <u>黒田智明</u> , 花井 亮, 龔 洵	中国四川省産 <i>Ligularia pleurocaulis</i> の化学的遺伝的多様性	第57回天然有機化合物討論会	神奈川県民ホール(横浜市)	2015/9
568.	通 元夫, 星山紀恵, 速水智加, 中島勝幸, 齋藤義紀, 岡本育子, 龔 洵, 花井 亮, <u>黒田智明</u>	中国産 <i>Ligularia virgaurea</i> の新規化学成分と多様性(4)	第59回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学(東大阪市)	2015/9
569.	<u>黒田智明</u> , 稲垣航, 晁 珣, 井上恭輔, 岡本育子, 通 元夫, 龔 洵, 花井 亮	中国横断山脈産 <i>Ligularia hodgsonii</i> の化学的遺伝的多様性	第59回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学(東大阪市)	2015/9
570.	齋藤義紀, 岡本育子, 花井 亮, 平井美咲, 松尾洋介, 田中隆, 龔 洵, 廣田 洋, <u>黒田智明</u>	中国雲南省産 <i>Ligularia lankongensis</i> の高度に酸化されたビスボラン化合物	第59回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学(東大阪市)	2015/9

571.	八百板康範、岡本育子、花井亮、青山奈央、 <u>黒田智明</u> 、 <u>龔洵</u>	2種の中国産未同定キク科 <i>Ligularia</i> 属植物の化学成分	第 59 回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	近畿大学 (東大阪市)	2015/9
572.	島崎裕紀・ <u>宮部寛志</u>	キャピラリー電気泳動を利用する分子間相互作用の速度解析法の開発	日本分析化学会 第 64 年会	九州大学 (福岡市)	2015/9
573.	島崎裕紀・ <u>宮部寛志</u>	キャピラリー電気泳動法によるチモール-硫酸化β-シクロデキストリン間の分子間相互作用の速度解析	日本分析化学会 第 64 年会	九州大学 (福岡市)	2015/9
574.	小林 翔・速川琴菜・ <u>箕浦真生</u>	6価ジハロ有機テルル化合物の脱ハロゲン化反応と官能基化	第 26 回基礎有機化学討論会	愛媛大学 (松山市)	2015/9
575.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	嵩高い置換基を有するスルフィナートのピリジニウム塩の合成と構造	第 26 回基礎有機化学討論会	愛媛大学 (松山市)	2015/9
576.	時延春輝・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	ピロリン酸で架橋した二核 Ru(Et3tacn)錯体の合成と酸化還元挙動	錯体化学会 第 65 回討論会	奈良女子大学 (奈良市)	2015/9
577.	三島かなえ・ <u>和田亨</u>	単核ルテニウム-ビス(ターピリジル)アントラセンの合成とルイス酸性金属イオンとの相互作用	錯体化学会 第 65 回討論会	奈良女子大学 (奈良市)	2015/9
578.	和田美里・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	複核コバルト錯体触媒による酸素四電子還元反応機構	錯体化学会 第 65 回討論会	奈良女子大学 (奈良市)	2015/9
579.	西村俊祐・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	二核ルテニウム錯体による水の酸化反応における架橋配位子の効果	錯体化学会 第 65 回討論会	奈良女子大学 (奈良市)	2015/9
580.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	オキソニウムイオンを含むヘキサシアニド鉄(II)錯体電荷移動塩の外部刺激による色変化と結晶構造	錯体化学会 第 65 回討論会	奈良女子大学 (奈良市)	2015/9
581.	加藤茜・ <u>松下信之</u>	エチルピオロゲン・テトラシアニド白金(II)錯体電荷移動塩の発光相の湿度依存性	錯体化学会 第 65 回討論会	奈良女子大学 (奈良市)	2015/9
582.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ベンゾホスホール基を有するジアリールエテンのフォトクロミズム	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
583.	伊都将司・池上雄大・宮坂博・宇野何岸・高木	光異性化反応を用いた空間選択的な励起状態生成	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9

	<u>祐太・森本正和・入江正造</u>				
584.	稲留徹・八木亮・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジアリールエテンの水 中におけるフォトクロミック挙 動	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
585.	蕪木智弘・須見貴樹・宇根佳奈子・五月女光・伊都将司・宮坂博・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	可視光応答型蛍光性ジアリールエテンの合成	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
586.	藤浪紗栄・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	イオン性置換基を有する水溶性蛍光ジアリールエテンの合成	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
587.	宇根佳奈子・五月女光・宮坂博・小島誠也・ <u>入江正造</u>	ジアリールエテン誘導体の光誘起環開閉反応に対する励起波長・温度依存性	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
588.	新井悠平・竹井敏・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジアリールエテンの単一分子追跡による高分子薄膜の動的ミクロ不均一性評価	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
589.	池上雄大・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	ジアリールエテンの光異性化反応を用いた励起状態の超解像局在化	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
590.	廣口瑛一・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	スターバースト型(D- $\pi$ ) <sub>5</sub> -A-COOH 色素を用いた色素増感太陽電池の創製と特性評価	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
591.	高倉泰・藤原寛・小林健二・ <u>三井正明</u>	枝分かれ多重極子発色団の単一分子蛍光分光	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
592.	森京介・ <u>三井正明</u>	有機金属ハライドペロブスカイトナノ粒子の単一粒子蛍光顕微分光	2015 年 光化学討論会	大阪市立大学 (大阪市)	2015/9
593.	<u>望月祐志</u>	FMO 計算プログラム ABINIT-MP のものづくり分野への展開	第 9 回 分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
594.	坂口正貴・ <u>望月</u>	FMO 計算におけるフラグメン	第 9 回	東京工業大学	2015/9

	<u>祐志・福澤薫</u>	ト分割法の詳細検討	分子科学討論会	(目黒区)	
595.	奥脇弘次・川田修太郎・ <u>望月祐志</u> ・大島広介・小沢拓	FMO 計算による粗視化シミュレーションパラメータの算定の試み	第 9 回分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
596.	田中李叶子・ <u>森本正和</u> ・ <u>松下信之</u>	オキソニウムイオンを含む電荷移動鉄錯体のベイポクロミズムとプロトン伝導性	第 9 回分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
597.	加藤茜・ <u>松下信之</u>	エチルビオロゲンとテトラシアニド白金(II)錯体からなる電荷移動塩の発光相の湿度依存性	第 9 回分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
598.	海野紹・ <u>三井正明</u>	単一分子分光による色素-酸化チタン界面電荷移動ダイナミクスの解明	第 9 回分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
599.	<u>三井正明</u> ・海野紹	有機色素-酸化チタン界面電荷移動の単一分子分光	第 9 回分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
600.	高倉 泰・藤原寛・小林 健二・ <u>三井正明</u>	アジマス・ラジアル偏光を用いた枝分かれ多重極子発色団の発光サイトスイッチング共同の解明	第 9 回分子科学討論会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
601.	<u>大山秀子</u>	ポリプロピレンの熱安定性向上と難燃化の試み: スーパーエンジニアリングプラスチックと層状複水酸化物の効果 (招待講演)	NPO 法人スーパーコンポジット研究会 第 10 回講演会	東京工業大学 (目黒区)	2015/9
602.	左一八・安倍智子・山藤歩・寺岡文照・ <u>大坪忠宗</u> ・森田公一・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	Deng ウイルス E タンパク質機能を抑制する糖誘導体デザイン	第 34 回日本糖質学会年会	東京大学 (文京区)	2015/8
603.	藤田侑・岡崎誠司・高橋忠伸・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	硫酸化糖脂質 sulfatide のインフルエンザウイルス糖タンパク質 HA における結合部位の理論的予測	第 34 回日本糖質学会年会	東京大学 (安田講堂)	2015/8
604.	松尾直也・岡崎誠司・高橋忠伸・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・Mark von Itzstein・ <u>常盤広明</u>	ヒトパラインフルエンザに対する新規阻害剤と HN タンパク質との理論的相互作用解析	第 34 回日本糖質学会年会	東京大学 (安田講堂)	2015/8
605.	Saito, Y.;	Chemical and genetic	Inaugural	徳島文理大学	2015/8

	Ogata, M.; Nakashima, K.; Okamoto, Y.; Hanai, R.; Kawahara, T.; Matsuo, Y.; Tanaka, T.; Tori, M.; Gong, X.; <u>Kuroda, C.</u>	diversity of <i>Eupatorium heteriphyllum</i> collected in China	Symposium of the Phytochemical Society of Asia 2015	(徳島市)	
606.	Kawabe, H.; Komiya, T.; Saito, Y.; Tori, M.; <u>Kuroda, C.</u> ; Gong, X.; Ohsaki, A.	New abietane diterpenoids from <i>Salvia grandifolia</i>	Inaugural Symposium of the Phytochemical Society of Asia 2015	徳島文理大学 (徳島市)	2015/8
607.	<u>Kuroda, C.</u> ; Shimizu, A.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Hanai, R.; Gong, X.	Chemical composition of hybrids of <i>Ligularia tongolensis</i> and <i>L. cymbulifera</i>	Inaugural Symposium of the Phytochemical Society of Asia 2015	徳島文理大学 (徳島市)	2015/8
608.	<u>宮部寛志</u>	キャピラリー電気泳動を利用する分子間相互作用の速度解析法	第 28 回バイオメディカル分析科学シンポジウム	長崎大学 (長崎市)	2015/8
609.	<u>Miyabe, K.</u> ; Shimazaki, Y	Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE): A Strategy for Kinetic Study of Intermolecular Interaction	The 22nd International Symposium on Electro- and Liquid Phase-Separation Techniques (ITP2015),	Helsinki, (Finland)	2015/8
610.	<u>宮部寛志</u>	非固定化かつ非化学修飾状態における分子間相互作用の速度解析法	イノベーションジャパン 2015	東京ビッグサイト (江東区)	2015/8
611.	<u>Oyama, H. T.</u> ; Takase, K.; Furuta, M..	Effects of an interfacial reaction on thermal stability and noncombustibility of polypropylene/poly(ether sulfone)	XXIV International Materials Research Congress (IMRC 2015)	Cancun, (Mexico)	2015/8

612.	Tsubuki, M.; Hosozawa, T.; Yokoe, H.; <u>Tokiwa, H.</u>	Studies on the Synthesis of Prenylated Quinoline-2-one Alkaloids, Aspoquinolones	18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis	Barcelona, (Spain)	2015/7
613.	松尾直也・左一 八・寺岡文照・ 大坪忠宗・池田 潔・森田公一・ 常盤広明	スーパーコンピュータ創薬に よる抗 Dengue ウイルス阻害薬 の設計開発	創薬懇話会 2015	グランドエクシ ブ鳴門 ザ・ロッ ジ (鳴門市)	2015/7
614.	<u>Yamanaka, M.</u>	Transition-State Stabilization through Multiple Hydrogen Bonds and Dispersion Interactions in Organocatalysis	39th NAITO Conference	SAPPORO (Japan)	2015/7
615.	Okazaki, S.; Ishitsubo, E.; Nakano, Y.; Shimano, H.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical study of several dipeptidyl peptidase IV inhibitors by the first-principles calculation and molecular dynamics simulation	24th American Peptide Symposium (APS2015)	Orland, (USA)	2015/6
616.	宮部寛志・島崎 裕紀	クロマトグラフィックキャピラリ ー電気泳動(CCE): 分子間 相互作用の速度解析法	第 13 回ホスト・ゲ スト化学シンポジ ウム	東北大学川内 北キャンパス (仙台市)	2015/6
617.	<u>Miyabe, K.</u>	Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE): A Strategy for Analyzing Equilibrium and Kinetic Characteristics of Intermolecular Interaction	The 42nd International Symposium on High Performance Liquid Phase Separations and Related Techniques (HPLC 2015)	Geneva, (Switzerland)	2015/6
618.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Total Synthesis of an Enesulfenic Acid	第 10 回有機元素 化学セミナー	京都大学 (宇治市)	2015/6
619.	Yukimoto, M.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Tautomerization of a Stable Enesulfenic Acid	1 <sup>th</sup> International Conference on Heteroatom Chemistry	Cean (France)	2015/6
620.	Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Functionalization of	1 <sup>th</sup> International Conference on	Cean (France)	2015/6

		Hypervalent Dihalotetraaryltellurium(VI) by Oxidative Halogenation	Heteroatom Chemistry		
621.	Hayakawa, K.; Kobayashi, S.; <u>Minoura, M.</u>	Synthesis and Difluorination of Hypervalent Tetraaryltellurium(IV) Bearing Dimethylaminophenyl Ligands	1 <sup>th</sup> International Conference on Heteroatom Chemistry	Cean (France)	2015/6
622.	<u>Morimoto, M.</u>	Making and Breaking Bonds with Light in Crystals: Diarylethene Crystals That Convert Light into Mechanical Work (招待講演)	Gordon Research Conference-Artificial Molecular Switches & Motors	Massachusetts, (USA)	2015/6
623.	<u>岡田拓巳・上谷幸治郎・大山秀子</u>	<u>セルロース系ナノ材料の熱伝導特性(*学623)</u>	平成27年度繊維学会年次大会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2015/6
624.	山崎大・齊藤天菜・ <u>望月祐志</u> ・梅田宏明・重田育照	コレスキー分解型 MP2,MP3 計算の Xeon Phi での性能評価	日本コンピュータ化学会	東京工業大学 (目黒区)	2015/5
625.	<u>望月祐志</u> ・川田修太郎・中野克洋	カルコゲンを含む多重結合分子のモデル計算	日本コンピュータ化学会	東京工業大学 (目黒区)	2015/5
626.	<u>常盤広明</u> ・ <u>福澤薫</u>	合理的創薬でウイルス感染症を抑え込む ~リレンザ® 開発者からのメッセージ~	第9回 CBI 学会 FMO 研究会	東京工業大学 (港区)	2015/5
627.	<u>山中正造</u>	キラルプレンステッド酸触媒による制御システムの理論的研究	「有機分子触媒による未来型分子変換」第5回公開シンポジウム	沖縄県市町村自治会館 (那覇市)	2015/5
628.	佐藤真・ <u>山中正造</u> ・馬場智明・古田巧・川端猛夫	アニリン型酸一塩基触媒を用いた分子内アルドール反応の理論的解析	「有機分子触媒による未来型分子変換」第5回公開シンポジウム	沖縄県市町村自治会館 (那覇市)	2015/5
629.	中村裕介・ <u>大山秀子</u>	水崩壊性ポリ乳酸ブレンドモノリスの加水分解挙動	第64回高分子年次大会	札幌コンベンションセンター (札幌市)	2015/5
630.	<u>岡田拓巳・上谷幸治郎・大山秀子</u>	<u>セルロース系ナノ材料の熱伝導特性(*学630)</u>	第64回高分子年次大会	札幌コンベンションセンター (札幌市)	2015/5
631.	山田絵里香・森	ポリアミド6/反応性エチレン	第64回高分子年次大会	札幌コンベンシ	2015/5

	洋輔・ <u>大山秀子</u>	共重合体における界面反応と物性の検討	次大会	ヨンセンター (札幌市)	
632.	<u>宮部寛志</u> ・ <u>島崎裕紀</u>	<u>キャピラリー電気泳動を利用する分子間相互作用の速度解析法の開発</u> (*学 632)	第75回分析化学討論会	山梨大学 (甲府市)	2015/5
633.	<u>島崎裕紀</u> ・ <u>宮部寛志</u>	<u>キャピラリー電気泳動法によるチモール-硫酸化β-シクロデキストリン間の分子間相互作用の速度解析</u> (*学 633)	第75回分析化学討論会	山梨大学 (甲府市)	2015/5
634.	加藤幸一郎・ <u>福澤薫</u> ・ <u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道計算に基づく固体表面とペプチドの相互作用解析	理論化学討論会	大阪大学 (豊中市)	2015/5
635.	<u>Miyabe, K.</u> ; <u>Shimazaki, Y.</u>	<u>Chromatographic Capillary Electrophoresis (CCE): A Strategy for Kinetic Study of Intermolecular Interaction</u> (*学 635)	The 39th International Symposium on Capillary Chromatography (ISCC2015)	Fort Worth, (USA)	2015/5
636.	Nakano, Y.; Ishitsubo, E.; Hiyamizu, K.; Han, L.; Tsuji, T.; Watanabe, Y.; Yamada, S.; <u>Tokiwa, H</u>	Theoretical Interaction Analysis of Free Fatty Acid Receptor, GPR40 and GPR120 with omega-3 and omega-6 FFAs based on FMO Method	12th Asian Congress of Nutrition (ACN2015)	Yokohama, (Japan)	2015/5
637.	坂口正貴・ <u>福澤薫</u> ・ <u>渡邊千鶴</u> ・ <u>望月祐志</u>	<u>ペプチド結合における新規フラグメント分割方法の検証および精度評価</u> (*学 637)	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
638.	<u>福澤薫</u> ・ <u>渡邊千鶴</u> ・ <u>沖山佳生</u> ・ <u>渡邊博文</u> ・ <u>本間光貴</u> ・ <u>望月祐志</u> ・ <u>田中成典</u> ,	フラグメント分子軌道計算のインシリコ創薬への応用	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
639.	土橋滉平・ <u>岩田直人</u> ・ <u>石坪江梨香</u> ・ <u>常盤広明</u> ・ <u>鈴木由美子</u>	NHC 触媒反応・求核的アシル化における Breslow 中間体の反応性	日本化学会 第95春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3

640.	野田洋史・秋山隆彦・ <u>山中正造</u>	キラルリン酸触媒を用いたトリフルオロメチル N-H ケチミンの不斉移動水素化反応の理論的研究	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
641.	市之瀬篤・ <u>山中正造</u>	亜鉛ビスアミジナート触媒を用いた $\alpha$ ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応における触媒活性種の探索	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
642.	穴戸健人・ <u>山中正造</u>	二点水素結合を介した立体・会合制御を基盤とする超分子型不斉分子触媒の開発	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
643.	土岐将太郎・ <u>山中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒による $\alpha$ ケトエステルの不斉アルキル化反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
644.	堀口耕作・山本絵莉・斉藤巧泰・ <u>山中正造</u> ・秋山隆彦	キラルリン酸触媒を用いたジヒドロベンゾジアゼピン誘導体の不斉水素移動型還元反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
645.	山本絵莉・ <u>山中正造</u> ・堀口耕作・斉藤巧泰・秋山隆彦	キラルリン酸触媒を用いたベンゾチアゾリンによる 1,5-ベンゾジアゼピンの不斉水素化反応の理論的研究	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
646.	野本拓実・ <u>山中正造</u>	キラル Ag(I)-ビスアミジン触媒を用いたインドールと $\alpha$ -置換- $\beta$ -ニトロアクリレートの不斉 Friedel-Crafts アルキル化反応の開発	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
647.	平井美咲・高木広和・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	酸素官能基化されたピサポラン化合物の合成と NMR スペクトルによる立体構造の区別	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
648.	大友郁美・ <u>黒田智明</u>	両親媒性チオエステルとアミンとの水中反応における疎水基中のカルボニル位置の影響	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
649.	西村俊祐・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラセン</u> で架橋した二核ルテニウム錯体による水の酸化反応(*学 649)	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
650.	和田美里・真木英孝・宮里裕	<u>複核コバルト錯体触媒による酸素還元反応の配位子効果</u>	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3

	<u>二・和田亨</u>	( * 学 650)			
651.	三島かなえ・ <u>和田亨</u>	非配位ターピリジンを有する単核ルテニウム-ピス(ターピリジル)アントラセン錯体の合成と酸化還元挙動( * 学 651)	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
652.	行本万里子・原奈摘子・入江達也・鈴木文陽・野田聡・ <u>箕浦真生</u>	複数のトリプチシル基を有する嵩高い置換基の合成	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
653.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシル基を立体保護基とするエンスルフェン酸の反応性	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
654.	浜崎絢子・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	アルファ位に水素を有するチオケトンとジアゾ化合物の反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
655.	一瀬翔・秋葉欣哉・ <u>箕浦真生</u>	超原子価(4-FC <sub>6</sub> H <sub>4</sub> ) <sub>5</sub> Sb および ToI <sub>4</sub> Te 間でのリガンド交換反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
656.	速川琴菜・小林翔・ <u>箕浦真生</u>	ジメチルアミノフェニル基を有する超原子価有機テルル化合物の合成と反応	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
657.	杉崎裕一・石田周平・中村卓哉・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一	NEXAFS による Ag(110) 上に合成した(1×1)TiO <sub>2</sub> 超薄膜( * 学 657)	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
658.	中村卓哉・杉崎裕一・石田周平・吉川峻策・近葉善・ <u>枝元一之</u>	Ag(100) 上における V 酸化物薄膜の合成	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
659.	石田周平・杉崎裕一・中村卓哉・山口祐太・滝川早紀・ <u>枝元一之</u>	P 偏析に伴う Fe <sub>2</sub> P(0001) 面の表面電子状態変化	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
660.	田中李叶子・岡澤厚・小島憲道・ <u>松下信之</u>	ヘキサシアニド鉄(II)錯体電荷移動塩の酸蒸気による二段階ベイポクロミズムにおける橙色相の解明	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
661.	須見貴樹・蕪木	可視光に応答する蛍光性フ	日本化学会	日本大学	2015/3

	智弘・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	オトクロミックジアリールエテンの合成	第 95 春季年会	(船橋市)	
662.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	ベンゾホスホール基を有するジアリールエテンの合成とフォトクロミック特性	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
663.	深港豪・廣瀬崇至・松田建児・ <u>入江正造</u>	可視光で可逆的なフォトクロミズムを示すジアリールエテンのための分子設計指針	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
664.	池上雄大・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光スイッチングジアリールエテン誘導体を用いた超解像蛍光スポット形成	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
665.	新井悠平・竹井敏・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジアリールエテン誘導体の高分子薄膜中における単一分子追跡	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
666.	宇根佳奈子・奥井千秋・片山哲郎・宮坂博・小島誠也・ <u>入江正造</u>	ジアリールエテン誘導体の環開閉反応に対する励起波長依存性:フェムト秒ダイナミクスと反応量子収率との相関	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
667.	高瀬一希・辰巳優斗・ <u>森本正和</u> ・小島優子・横島智・中村振一郎・内田欣吾	イオン液体の構造を持つ新規ジアリールエテン誘導体の合成とその光応答	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
668.	廣口瑛一・井上翔太・小林健二・ <u>三井正明</u>	新奇な $\pi$ 電子系スターバースト有機色素を用いた色素増感太陽電池の作製と特性評価	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
669.	海野紹・ <u>三井正明</u>	色素-酸化チタン界面電荷移動に基づく蛍光プリンキング統計の解明	日本化学会 第 95 春季年会	日本大学 (船橋市)	2015/3
670.	山藤歩・阿部智子・左一八・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>堂盤広明</u>	高精度第一原理計算を用いた新規抗 Dengue ウイルス阻害剤に対する理論的研究	日本薬学会第 135 年会	兵庫医療大学 (神戸市)	2015/3
671.	古畑光司・細沢拓未・横江弘	o-アミノフェノール 誘導体を用いた[5-endo-dig]型環化反	第 135 回日本薬 学会年会	神戸学院大学 (神戸市)	2015/3

	雅・上森理弘・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	応の開発			
672.	細沢拓未・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	Aspoquinolone 類の全合成研究	第 135 回日本薬学会年会	神戸サンボーホール (神戸市)	2015/3
673.	横田智洋・細沢拓未・石坪江梨花・加藤裕也・五十嵐学・KIRSHNER Karil N.・SLIWILAIJARO EN Nongluk・横江弘雅・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	新規マルチターゲット抗インフルエンザウイルス阻害剤の構造活性相関研究(1)	第 135 回日本薬学会年会	兵庫医療大学 (神戸市)	2015/3
674.	加藤裕也・細沢拓未・石坪江梨花・横田智洋・五十嵐学・KIRSHNER Karil N.・SLIWILAIJARO EN Nongluk・横江弘雅・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	新規マルチターゲット抗インフルエンザウイルス阻害剤の構造活性相関研究(2)	第 135 回日本薬学会年会	神戸サンボーホール (神戸市)	2015/3
675.	石坪江梨花・細沢拓未・五十嵐学・KIRSHNER Karl N.・SRIWILAIJARO EN Nongluk・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	梅エキス抽出物をリードとした新規マルチターゲット抗インフルエンザ薬の合理的設計開発	第 135 回日本薬学会年会	神戸サンボーホール (神戸市)	2015/3
676.	中野佑香・石坪江梨花・速水耕介・韓力・辻智子・渡邊泰雄・山田静雄・ <u>常盤広明</u>	FMO 法を用いた GPR40 および GPR120 と $\omega$ -3/ $\omega$ -6 系不飽和脂肪酸との理論的相互作用解析	第 135 回日本薬学会年会	神戸サンボーホール (神戸市)	2015/3

677.	寺岡文照・安倍智子・左一八・鈴木隆・ <u>常盤広明</u> ・大坪忠宗・ <u>池田潔</u>	新規デングウイルス感染阻害剤の合成(V)	第135回日本薬学会年会	神戸サンボーホール(神戸市)	2015/3
678.	中村卓哉・杉崎裕一・石田周平・吉川峻策・近葉善・ <u>枝元一之</u>	Ag(100)上におけるV酸化物薄膜の合成と軟X線分光による評価	第3回物構研サイエンスフェスタ	つくば国際会議場(つくば市)	2015/3
679.	石田周平・杉崎裕一・中村卓哉・山口祐太・滝川早紀・ <u>枝元一之</u>	遷移金属リン化合物単結晶表面の電子状態	第3回物構研サイエンスフェスタ	つくば国際会議場(つくば市)	2015/3
680.	杉崎裕一・中村卓哉・石田周平・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一・間瀬一彦	<u>NEXAFSを用いた(1×1)TiO<sub>2</sub>/Ag(110)の電子状態(*学680)</u>	第3回物構研サイエンスフェスタ	つくば国際会議場(つくば市)	2015/3
681.	吉信淳・近藤寛・坂本一之・小澤健一・櫻井岳暁・ <u>枝元一之</u> ・中辻寛・間瀬一彦・中村潤児	エネルギー変換材料の表面界面物性:VUV/SX放射光分光による研究	第3回物構研サイエンスフェスタ	つくば国際会議場(つくば市)	2015/3
682.	加藤幸一郎・ <u>福澤薫</u> ・ <u>望月祐志</u>	アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み#2	応用物理学会春季学術講演会	東海大学(平塚市)	2015/3
683.	<u>望月祐志</u> ・ <u>福澤薫</u>	フラグメント分子軌道法でナノバイオ界面を見る(招待講演)	応用物理学会春季学術講演会	東海大学(平塚市)	2015/3
684.	<u>入江正浩</u>	フォトクロミック分子材料の最前線(招待講演)	第62回応用物理学会春季学術講演会 分科企画シンポジウム「散逸ゆらぎ制御ナノ電子フォトン系の理論とデバイス構築」	東海大学(平塚市)	2015/3
685.	<u>Miyabe, K.</u> ; Kamiya, S.	<u>Analysis of Equilibrium and Kinetic Characteristics of</u>	Pittsburgh Conference 2015	New Orleans, (USA)	2015/3

		<u>Intermolecular Interaction between <math>\beta</math>-Bromo-cyclodextrin and 2-Phenoxypropionic Acid by Liquid Chromatography</u> ( * 学 685)	(Pittcon 2015)		
686.	Shimazaki, Y.; <u>Tsuzuki, S.</u> ; <u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Miyabe, K.</u>	<u>Chromatographic Behavior in Reversed-Phase Liquid Chromatography Using Water as the Mobile Phase Solvent</u> ( * 学 686)	Pittsburgh Conference 2015 (Pittcon 2015)	New Orleans, (USA)	2015/3
687.	<u>枝元一之</u>	Electronic structure of transition metal oxide ultrathin films formed on Ag surfaces	フロンティア表面科学セミナー	物性研 (柏市)	2015/3
688.	<u>和田亨</u>	<u>Ru-C 結合を有するルテニウム錯体による水の酸化反応</u> (* 学 688)	文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「人工光合成」(領域番号 2406), 第 3 回公開シンポジウム	首都大学東京 (八王子市)	2015/1
689.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	抗インフルエンザウイルス活性を有するフラン誘導体の多面性効果に関する理論解析	4th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2015/1
690.	伊東佑仁・石坪江梨花・Karl N. Kirshner・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算に基づく抗パラインフルエンザ阻害剤の合理的設計・開発	4th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2015/1
691.	藤田侑・高橋忠伸・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	インフルエンザウイルス HA と Sulfatide との理論的相互作用解析	4th Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2015/1

692.	杉崎裕一・ <u>枝元一之</u> ・小澤健一・間瀬一彦	Ag(110)上に合成した(1×1)TiO <sub>2</sub> 超薄膜の電子状態(*学692)	第28回日本放射光学学会年会・放射光科学合同シンポジウム	立命館大学(草津市)	2015/1
693.	<u>入江正浩</u>	光機能を創る(招待講演)	名古屋大学物質科学国際研究センター・トランスフォーマティブ生命分子研究所(RCMS-ITbM)セミナー	名古屋大学(名古屋市)	2014/12
694.	奥脇弘次, <u>望月祐志</u> , <u>福澤薫</u> , 小沢拓, 大畠広介, 沖山佳生, 渡邊千鶴,	フラグメント分子軌道計算の高分子シミュレーションへの応用の試み(その1)	高分子学会計算機科学部会研究会	東京工業大学(目黒区)	2014/12
695.	Nakano, S.; Okazaki, S.; Yasukawa, K.; Dadashipour, M.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y	Endeavors to bridge a gap between wet and dry science in enzyme engineering	Active Enzyme Molecule (AEM2014)	Toyama, (Japan)	2014/12
696.	<u>森本正和</u>	ジアリールエテンフォトクロミック分子結晶の結晶構造と光機能(招待講演)	2014 高分子・ハイブリッド材料研究センター若手フォーラム	東北大学(仙台市)	2014/12
697.	<u>Irie, M.</u>	New Frontiers in Photochromism(招待講演)	Photochromism School	Dourdan, (France)	2014/12
698.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシル基を有する不飽和スルフェン酸の合成と性質	第41回有機典型元素化学討論会	宇部市文化会館(宇部市)	2014/11
699.	小林翔・ <u>箕浦真生</u>	炭素置換基のみを有する超原子価有機テルル(IV)の構造とBerry擬回転	第41回有機典型元素化学討論会	宇部市文化会館(宇部市)	2014/11
700.	<u>箕浦真生</u>	種々の酸化状態を有する有機16族元素化合物の合成と性質(特別講演)	第41回有機典型元素化学討論会	宇部市文化会館(宇部市)	2014/11
701.	石坪江梨花・五十嵐学・Karl	食品由来の天然物を先導化合物とした新規マルチターゲット	第32回メディシナルケミストリー	神戸国際会議場	2014/11

	N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 細沢拓未・横江 弘雅・津吹政 可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	ット抗インフルエンザ薬の合理的設計開発	シンポジウム	(神戸市)	
702.	斧田賢嗣・森田 大地・澤田紘 実・藤井佳那・ 石坪江梨花・松 野研司・ <u>常盤広 明</u> ・黒田照夫・ 宮地弘幸	ゼニゴケ由来天然物をリード 化合物とした新規膜障害性 抗 MRSA 薬の創製	第 32 回メディシ ナルケミストリー シンポジウム	神戸 国際会議場 (神戸市)	2014/11
703.	寺岡文照・安倍 智子・左一八・ 鈴木隆・ <u>常盤 広明</u> ・大坪忠 宗・池田潔	新規デングウイルス感染阻 害剤の合成研究(IV)	第 32 回メディシ ナルケミストリー シンポジウム	神戸 国際会議場 (神戸市)	2014/11
704.	<u>Wada, T.</u> ; Hiraide, N.; Onishi, Y.; Miyazato, Y.	<u>Water oxidation catalyzed by ruthenium complexes having a Ru-C bond(*学 704)</u>	2014 International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014),	淡路島夢舞台 国際会議場 (淡路市)	2014/11
705.	Dobashi, K.; Iwata, N.; Ishitsubo, E.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Suzuki, Y.	Experimental and Theoretical Analysis of NHC-Catalyzed Nucleophilic Aroylation	Advanced Molecular Transformations by Organocatalysts 2nd International Conference (7th Symposium on Organocatalysis)	Tokyo, (Japan)	2014/11
706.	Noda, H.; Akiyama, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Theoretical Study on Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Asymmetric Transfer Hydrogenation of Trifluoromethylated N-H Ketimine Using Benzothiazoline	2th International Conference	Tokyo, (Japan)	2014/11
707.	Yamamoto, E.; Horiguchi, K.;	Theoretical Study on the Mechanism of	2th International Conference	Tokyo, (Japan)	2014/11

	Saito, K.; Akiyama, T.; <u>Yamanaka, M.</u>	Stereoselectivity in Chiral Phosphorus Acid Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of 1,5-Benzodiazepine Using Benzothiazoline			
708.	Sato, M.; <u>Yamanaka, M.</u> ; Shigeta, T.; Huruta, T.; Kawabata, T.	Theoretical Study of Asymmetric Desymmetrization of 4-Nosylamino-1,7-heptanedio 1 via 4PPY-Catalyzed Enantioselective Acylation	2th International Conference	Tokyo, (Japan)	2014/11
709.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, Hi.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus	Joint Meeting of the Society for Glycobiology (SFG) and the Japanese Society of Carbonhydrates Research (JSCR)	Honolulu, (USA)	2014/11
710.	谷島大介・ <u>大山秀子</u>	一軸延伸処理が水崩壊性ポリ乳酸ブレンドの構造と加水分解挙動に及ぼす影響	プラスチック成形加工学会・成形加工シンポジア'14	朱鷺メッセ (新潟市)	2014/11
711.	石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	抗インフルエンザウイルス活性を有する天然物の多面性効果に関する高精度 <i>in silico</i> 解析	第 62 回ウイルス学会学術集会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2014/11
712.	小西英之・上田剛・松原美香・森敬介・石川吉伸・橋本博・ <u>常盤広明</u> ・眞鍋敬	ギ酸誘導体の一酸化炭素生成機構およびこれを用いる実用的有機合成反応	第 40 回反応と合成の進歩シンポジウム	東北大学 (仙台市)	2014/11
713.	<u>常盤広明</u>	最新の計算科学による脂肪酸と受容体との理論的精密解析 (招待講演)	第 13 回ホスファチジルセリン研究会	東京海洋大学 (港区)	2014/11
714.	小田木陽・古郡	グアニジン-ウレア触媒を用	第 106 回有機合	早稲田大学	2014/11

	孝太・山本祥 晴・佐藤真・ <u>山中正浩</u> ・長澤 和夫	いた速度論的光学分割による光学活性β置換テトラロン誘導体の合成法の開発： (+)-Linoxepin の全合成	成シンポジウム	(新宿区)	
715.	土岐将太郎・ <u>山中正浩</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒によるαケトエステルの不斉アルキル化反応	第106回有機合成シンポジウム	早稲田大学 (新宿区)	2014/11
716.	<u>Oyama, H. T.</u>	Functionalization of Poly(lactic acid) via Alloying and Blending (招待講演)	Hangzhou Normal University	Hangzhou, (China)	2014/11
717.	Furuta, M.; <u>Oyama, H. T.</u>	Development of novel poly(propylene carbonate) alloy (招待講演)	Hangzhou Normal University	Hangzhou, (China)	2014/11
718.	Nakano, Y.; Ishitsubo, E.; Hayamizu, K.; Han, L.; Tsuji, T.; Watanabe, Y.; Yamada, S.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical Interaction Analysis of Free Fatty Acid Receptor 1 and 4 (FFAR1 and FFAR4) with ω-3 and ω-6 UFFAs based on FMO Method	2nd International Conference on Pharma and Food	Shizuoka, (Japan)	2014/11
719.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus	2nd International Conference on Pharma and Food	Shizuoka, (Japan)	2014/11
720.	杉崎裕一・石田 周平・中村卓 哉・ <u>枝元一之</u> ・ 掛札洋平・小澤 健一・間瀬一 彦・近葉善・清 宮真由・谷本彩	<u>Ag(110)上に合成した(1×1)TiO<sub>2</sub>超薄膜の電子状態(*学720)</u>	第34回表面科学 学術講演会	島根県立産業 交流会館 (松江市)	2014/11
721.	石田周平・杉崎 裕一・中村卓 哉・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	遷移金属リン化合物単結晶表面の電子状態	第34回表面科学 学術講演会	島根県立産業 交流会館 (松江市)	2014/11
722.	<u>Edamoto, K.</u> ;	Comparison of the electronic	The 7th	Matsue,	2014/11

	Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.	structure of Ni <sub>2</sub> P(0001) and Fe <sub>2</sub> P(0001): Soft X-ray photoelectron spectroscopy study	International Symposium on Surface Science	(Japan)	
723.	Sugizaki, Y.; Ishida, S.; Nakamura, T.; Chikaba, T.; Yoshikawa, S.; Seimiya, M.; Tanimoto, A.; Kakefuda, Y.; <u>Edamoto, K.</u> ; Ozawa, K.	<u>The electronic structure of a (1×1) TiO<sub>2</sub> thin film on Ag(100): LEED, PES and NEXAFS study(*学 723)</u>	The 7th International Symposium on Surface Science	Matsue, (Japan)	2014/11
724.	Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.; <u>Edamoto, K.</u>	Change in the surface electronic structure of Fe <sub>2</sub> P(0001) induced by P segregation	The 7th International Symposium on Surface Science	Matsue, (Japan)	2014/11
725.	<u>望月祐志</u> , 冲山佳生, 渡邊千鶴, 野口孝明, <u>福澤薫</u> , 田中成典	<u>ABINIT-MPによる京での性能について(*学 725)</u> (依頼講演)	CBI学会 2014年会	タワーホール船堀 (江戸川区)	2014/10
726.	<u>Mochizuki, Y.</u> ; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Okiyama, Y.; Watanabe, C.; Honma, T.; Tanaka, S.	<u>Theoretical calculations on proteins with fragment molecular orbital method(*学 726)</u>	CBI conference	Tokyo, (Japan)	2014/10
727.	Ishitsubo, E.; Okazaki, S.; Nakano, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y	THEORETICAL STUDY ON THE ORIGIN OF SUBSTRATE SPECIFICITY OF ALKALINE-D-PEPTIDASE (ADP) BASED ON THE FIRST-PRICIPLES CALCULATIONS 2	第51回ペプチド討論会	徳島大学 (徳島市)	2014/10
728.	<u>常盤広明</u> ・石川岳志・庄司光男・李秀栄・左一八・ <u>池田潔</u>	ウイルス全体の全電子計算による 新規デングウイルス感染症治療薬の設計開発	第6回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム	筑波大学 (つくば市)	2014/10
729.	中野祥吾・岡崎	産業利用を目指した酵素群	第6回「学際計算	筑波大学	2014/10

	誠司・常盤広明・浅野泰久	の機能解明と合理的設計	科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム	(つくば市)	
730.	細沢拓未・横江弘雅・常盤広明・津吹政可	プレニル化キノリノンアルカロイドであるアスポキノロン類の合成研究	第56回天然有機化合物討論会	高知県立県民文化ホール(高知市)	2014/10
731.	黒田智明・花井亮・清水杏菜・鈴木結里香・渡辺静・山田ひろか・永野肇・通元夫・岡本育子・齋藤義紀・河原孝行・余姣君・龔 洵	数種の中国横断山脈産 <i>Ligularia</i> 雑種の化学成分	第56回天然有機化合物討論会	高知県立県民文化ホール(高知市)	2014/10
732.	Irie, M.	Photochromism of Diarylethene Molecules and Crystals (招待講演)	Le Giornate di Chimica Organica a Pavia	Pavia, (Italy)	2014/10
733.	土橋滉平・岩田直人・石坪江梨花・常盤広明・鈴木由美子	求核的アシル化反応の開発研究	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
734.	吉田うらら・山中正造・川端猛夫	基質認識型ピロリジノピリジン触媒による幾何異性選択的アシル化反応の理論的研究	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
735.	山本絵莉・山中正造・秋山隆彦	キラルリン酸触媒を用いたベンゾチアゾリンによる1,5-ベンゾジアゼピンの不斉還元反応の理論的研究	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
736.	伊藤結・山中正造	キラルリン酸触媒の3,3'-位置換基による立体制御の解明: 引力的相互作用と斥力的相互作用	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
737.	行本万里子, 箕浦真生	$\alpha$ $\beta$ 不飽和スルフェン酸からスルフィンへの互変異性化	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2014/10
738.	田中李叶子・松下信之	ヘキサシアニド鉄(II)酸電荷移動塩の酸蒸気による二段	第4回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀	2014/10

		階ベイクロミズム (優秀ポスター賞)(別紙資料 8)		(江戸川区)	
739.	菅野智成・ <u>大山秀子</u>	ステレオコンプレックス結晶 を含有する・多孔質ポリ乳酸 モノリスの創出 (優秀ポスター賞) (別紙資料9)	第4回 CSJ 化学 フェスタ	タワーホール船 堀 (江戸川区)	2014/10
740.	海野紹・ <u>三井正明</u>	色素-酸化チタン界面電荷移 動の単一分子蛍光分光	第4回 CSJ 化学 フェスタ	タワーホール船 堀 (江戸川区)	2014/10
741.	市川智浩・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ホスホール基を有するフォト クロミックジアリアルエテンの 合成	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
742.	蕪木智弘・須見 貴樹・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	可視光に応答する蛍光性フ ォトクロミックジアリアルエテ ン	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
743.	稲葉航平・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	熱退色型フォトクロミックジ アリアルエテンの置換基効果	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
744.	千葉宏香・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	交互積層法によるフォトメカ ニカル分子結晶表面の高分子 修飾	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
745.	藤永典子・辰巳 優斗・糟野潤・ <u>森本正和</u> ・横島 智・中村振一 郎・内田欣吾	マラカイトグリーン部位をもつ ジアリアルエテン誘導体のフ ォト・ハロ・ソルバトクロミズム	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
746.	新井悠平・竹井 敏・伊都将司・ 宮坂博・宇野何 岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリアルエテン誘導 体の単一分子発光特性	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
747.	南健介・西村直 人・ <u>森本正和</u> ・ 小島優子・横島 智・中村振一 郎・内田欣吾	ジアリアルエテン誘導体の光 誘起表面形状変化～分子構 造と結晶形の相関～	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
748.	池上雄大・伊都 将司・宮坂博・ 宇野何岸・高木 祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ジアリアルエテン誘導体を用 いた超解像蛍光スポット形成	2014年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10

749.	内田欣吾・児玉隆平・須丸公雄・ <u>森本正和</u> ・横島智・中村振一郎	光刺激による亜硫酸ガス発生剤としてのジアリールエテン	2014 年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
750.	稲留徹・八木亮・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・松浦智夏・片山哲郎・伊都将司・宮坂博・ <u>入江正造</u>	水溶性蛍光ジアリールエテンの合成	2014 年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
751.	海野紹・ <u>三井正明</u>	単一分子蛍光分光による色素-酸化チタン界面電荷移動過程の解明	2014 年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
752.	並河知孝・蛭海洋平・玉木健斗・ <u>三井正明</u> ・小林健二・鎌田賢司	分子カプセル化による 9,10-ビス(フェニルエチニル)アントラセンの二光子吸収の増大	2014 年 光化学討論会	北海道大学 (札幌市)	2014/10
753.	井川貴詞・石坪江梨花・ <u>常盤広明</u> ・高木晃・赤井周司	計算科学的手法を用いるベンザイン反応の位置選択性発現機構解析—ベンザイン反応の位置選択性をコンピュータで読み解く—	第 64 回日本薬学会近畿支部大会	京都薬科大学 (京都市)	2014/10
754.	加藤裕也・細沢拓未・石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner, Nongluk Sriwilaijaroen・横江弘雅・鈴木康夫・津吹政可・ <u>常盤広明</u>	新規マルチターゲット抗インフルエンザ阻害剤の合成研究	第 58 回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10
755.	佐藤菜摘・石坪江梨花・ <u>常盤広明</u>	密度汎関数理論を用いたシアル酸の水和構造の理論的研究	第 58 回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10
756.	佐藤大樹・田口友里・加藤誠也・細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	FR901483 合成におけるチロシノール誘導体の N-アリール化反応の検討	第 58 回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10

757.	石坪江梨花, 中野佑香, 太田崇文, 川上 勝, <u>常盤広明</u>	3D プリンタを用いた創薬標的受容体および薬物候補化合物の新規 3D 模型の簡易作成とその応用	第 58 回日本薬学会関東支部大会	昭和薬科大学 (町田市)	2014/10
758.	<u>入江正浩</u>	光機能を創る (招待講演)	高次複合光応答分子システム第 1 回公開シンポジウム	大阪大学 (豊中市)	2014/9
759.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	<i>In silico</i> analysis based on the first-principles calculations and molecular dynamics simulations of pleiotropic effect of novel inhibitor for influenza virus pathogenesis	13th Awaji International Forum on Infection and Immunity 2014	Nara, (Japan)	2014/9
760.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; <u>Tokiwa, H.</u>	Rational Drug Design of Novel anti-Influenza inhibitors based on Fragment Orbital Method and MD Simulations	3rd International Conference of Drug Design 2014	Oxford, (UK)	2014/9
761.	<u>山中正浩</u>	キラルリン酸触媒反応における反応制御・立体制御機構の解明	2014 年有機反応機構研究会	兵庫県民会館 (神戸市)	2014/9
762.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・金属錯体ドナーからなる電荷移動塩の外部刺激応答	第 8 回分子科学討論会	広島大学 (東広島市)	2014/9
763.	細沢拓未・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> , 津吹政可	プレニル化キノリノンアルカロイドの合成研究	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
764.	平井美咲・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	8, 10 位の酸化されたピサボランモデル化合物の合成と NMR スペクトル	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
765.	通 元夫・高橋宏明・齋藤義紀・中島勝幸・岡本育子・龔洵・ <u>黒田智明</u> ・花井亮	中国産キク科 <i>Ligularia pleurocaulis</i> の新規化学成分と多様性	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
766.	通 元夫・谷口瑞穂・大坪孝徳・岩本夢子・	中国産キク科 <i>Ligularia sagitta</i> の新規化学成分	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9

	中島勝幸・岡本育子・齋藤義紀・龔 洵・黒田智明		する討論会		
767.	清水杏菜・井上恭輔・市原麻由、花井亮・齋藤義紀・岡本育子・通 元夫・龔 洵・黒田智明	中国産横断山脈産 <i>Ligularia vellerea</i> および <i>L. melanothyrsa</i> のケモタイプ	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
768.	齋藤義紀・日高基貴・中島勝幸・岡本育子・通 元夫・河原孝行・松尾洋介・田中隆・龔 洵・黒田智明	中国四川省産 <i>Aquilegia</i> 未同定種の新規アビエタン型ジテルペン	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
769.	緒方美咲・齋藤義紀・中島勝幸・通 元夫・河原孝行・松尾洋介・田中隆、龔 洵・黒田智明	中国雲南省および重慶市産キク科 <i>Eupatorium heterophyllum</i> の新規セスキテルペイド	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
770.	八百板康範・龔 洵・黒田智明	中国産キク科 <i>Ligularia liatroides</i> の化学成分	第 58 回香料・香料・テルペンおよび精油化学に関する討論会	和歌山大学 (和歌山市)	2014/9
771.	望月祐志・福澤薫・加藤幸一郎・沖山佳生・塚本貴志・宮部寛志・都築誠二・古明地勇人・小沢拓・大畠広介・渡邊千鶴・永田大樹・豊島輝・酒井泉美・奥脇弘次	フラグメント分子軌道計算のナノバイオテクノロジーへの展開(その1)	応用物理学会 秋季学術講演会	北海道大学 (札幌市)	2014/9
772.	真木英孝・宮里裕二・和田亨	<u>ビピリジル系配位子を有する複核コバルト錯体触媒による酸素還元反応(*学 772)</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
773.	和田美里・宮里裕二・和田亨	<u>キサントニンにより架橋された二核コバルト錯体における酸</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9

		<u>素の四電子還元反応の選択性 (*学 773)</u>			
774.	西村俊祐・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラキノンで架橋した二核ルテニウム錯体による水の酸化反応 (*学 774)</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
775.	宮里裕二・谷田貝美那・ <u>和田亨</u>	<u>ピロリン酸架橋型二核 Ru 錯体における支持配位子の交換と性質への影響調査(*学 775)</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
776.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	<u>ヘキサシアニド鉄(II)錯体塩の電荷移動相互作用を利用した酸蒸気による二段階ベイポクロミズム</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
777.	<u>松下信之</u> ・田中李叶子・小中尚・佐々木明登	<u>ベイポクロミック銅(II)錯体の構造未決定相の粉末 X 線構造解析</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
778.	渡邊永治・吉田真那・ <u>松下信之</u>	<u>レドックス活性白金錯体における常磁性緩和の核磁気共鳴による研究</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
779.	上之原和佳・ <u>松下信之</u>	<u>テトラシアニド白金(II)酸電荷移動塩の発光相の温度・湿度変化</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
780.	橋本愛・ <u>松下信之</u>	<u>単結晶フォトクロミック白金(II)錯塩構築の試みと新規含水塩の結晶構造</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
781.	眞柄勇希・ <u>松下信之</u>	<u>ハロゲン架橋一次元白金錯体スルホコハク酸ジアルキル塩の混合原子価状態のアルキル鎖長依存性</u>	錯体化学会第 64 回討論会	中央大学 (文京区)	2014/9
782.	<u>宮部寛志</u> ・神谷諭司	<u>固定相リガンドー試料分子間相互作用のモーメント解析 (*学 782)</u>	日本分析化学会第 63 年会	広島大学 (東広島市)	2014/9
783.	島崎裕紀・豊島輝・甲原翔太・ <u>都築誠二</u> ・ <u>望月祐志</u> ・ <u>宮部寛志</u>	<u>逆相液体クロマトグラフィー系における保持挙動の計算化学的研究(*学 783)</u>	日本分析化学会第 63 年会	広島大学 (東広島市)	2014/9
784.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	<u>ビピリジン骨格を有する有機アクセプターと鉄錯体ドナーからなる電荷移動塩のベイポクロミズム</u>	第 23 回有機結晶シンポジウム	東邦大学 (船橋市)	2014/9
785.	土橋滉平・岩田直人・石坪江梨	<u>求核的アシル化反応の開発および反応解析研究</u>	第 44 回複素環化学討論会	札幌市民ホール	2014/9

	花・常盤広明・ 鈴木由美子			(札幌市)	
786.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus	International Symposium on Sialoglyco 2014	Gold Coast, (Australia)	2014/9
787.	行本万里子・ <u>箕 浦真生</u>	9-トリプチシルメチル基を有 するチオケトン類および誘導 体の合成と構造	第 25 回基礎有機 化学討論会	東北大学 (仙台市)	2014/9
788.	和田芳樹・ <u>松下 信之</u> ・大橋直樹	擬一次元白金錯体における 格子緩和状態の生成消滅過 程の励起波長依存性	日本物理学会 2014 年秋季大会	中部大学 (春日井市)	2014/9
789.	<u>Miyabe, K.</u>	<u>Development of New Moment Equations for Chromatography Based on Langmuir Type Reaction Kinetics(* 学 789)</u>	20th International Symposium on Separation Sciences (ISSS 2014)	Prague, (Czech Republic)	2014/8
790.	中野佑香・石坪 江梨花・速水耕 介・韓 力・辻智 子・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算および 分子動力学シミュレーション を用いた非エステル型脂肪 酸と脂肪酸受容体との理論 的相互作用解析	日本脂質栄養学 会第 23 回大会	東京国際交流 館プラザ (江東区)	2014/8
791.	<u>Minoura, M.</u> ; Yukimoto, M	<u>SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF <math>\alpha,\beta</math>-UNSATURATED SULFENIC ACID(* 学 791)</u> (招待講演)	26 <sup>th</sup> INTERNATION AL SYMPOSIUM ON ORGANIC CHEMISTRY OF SULFUR	ISTANBUL, (TURKEY)	2014/8
792.	Fujiwara, T.; Mori, H.; <u>Komeiji, Y.</u> ; <u>Mochizuk, Y.</u>	Fragment molecular orbital-based molecular dynamics study on hydrated Ln(III) ions	CSW2014 conference	Tsukuba , (Japan)	2014/8
793.	<u>宮部寛志</u>	<u>HPLC を用いる分子間相互 作用のモーメント解析法の開 発(* 学 793)</u>	第 27 回バイオメ ディカル分析科 学シンポジウム	帝京大学 (板橋区)	2014/8
794.	Tanishima, D.; <u>Oyama, H. T.</u> ;	Poly(aspartic acid-co-L-lactide) (PAL) and	American Chemical Society	San Francisco, (USA)	2014/8

	Maekawa, S.; Usugi, S.	poly(malic acid-co-L-lactide) (PML) as accelerators for hydrolytic degradation of poly(L-lactic acid)(PLLA)	248th National Meeting & Exposition		
795.	Shimizu, Y.; Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Silica xerogels synthesized using silane monomers and poly(dimethylsiloxane) as precursors	American Chemical Society 248th National Meeting & Exposition	San Francisco, (USA)	2014/8
796.	<u>常盤広明</u> ・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>池田潔</u> ・ <u>阿部太洋</u> ・ <u>八木亮</u> ・ <u>高木祐太</u> ・ <u>稲留徹</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>木下勉</u> ・ <u>入江正浩</u>	<u>糖置換基導入による水溶性 蛍光フォトクロミック分子の合 理的開発と生体系への応用</u> (*学 796)	第 33 回日本糖質 学会年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/8
797.	石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江 弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算によるムメフラ ールのインフルエンザウイル ス表面糖タンパク質に対する 理論的相互作用解析	第 33 回日本糖質 学会年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/8
798.	土岐将太郎・ <u>山中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触 媒による $\alpha$ ケトエステルの不 斉アルキル化反応	日本プロセス化 学会 2014 サマー シンポジウム	船堀タワーホー ル (江戸川区)	2014/7
799.	市之瀬篤・海津 溪介・ <u>山中正造</u>	亜鉛ビスアミジナート触媒を 用いた $\alpha$ ケトエステルの不斉 ヒドロホスホニル化反応	日本プロセス化 学会 2014 サマー シンポジウム	船堀タワーホー ル (江戸川区)	2014/7
800.	宍戸健人・ <u>山中 正造</u>	二点水素結合に基づく超分 子型不斉分子触媒の開発	日本プロセス化 学会 2014 サマー シンポジウム	船堀タワーホー ル (江戸川区)	2014/7
801.	杉崎裕一・ <u>枝元 一之</u> ・掛札洋 平・小澤健一・ 間瀬一彦	<u>光電子分光および X 線吸収 端微細構造による Ag(110)上 の TiO<sub>2</sub> 超薄膜の評価</u> (*学 801)	第 10 回放射光表 面科学研究部会 シンポジウム・顕 微ナノ材料科学 研究会合同シン ポジウム	あいち産業科 学技術総合セ ンター (瀬戸市)	2014/7
802.	<u>枝元一之</u> ・石田 周平・杉崎裕 一・中村卓哉・	Ni <sub>2</sub> P(0001)および Fe <sub>2</sub> P(0001) の軟 X 線光電子分光	第 10 回放射光表 面科学研究部会 シンポジウム・顕	あいち産業科 学技術総合セ ンター	2014/7

	滝川早紀・山口祐太		微ナノ材料科学研究会合同シンポジウム	(瀬戸市)	
803.	<u>黒田智明</u>	中国横断山脈地域におけるキク科リグリア属植物の化学成分と生態	第4回天然物パワーシンポジウム	東京大学(文京区)	2014/7
804.	<u>Irie, M.</u>	Making and Breaking Bonds with Light: Discovery and Development of Photochromic Diarylethenes (Porter Medal Lecture) (招待講演)	XXVth IUPAC Symposium on Photochemistry	Bordeaux, (France)	2014/7
805.	細沢拓未・石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	新規マルチターゲット抗インフルエンザ阻害剤の開発 Part I:合理的設計と理論解析	創薬懇話会 2014	長良川温泉ホテルパーク(岐阜市)	2014/7
806.	石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	新規マルチターゲット抗インフルエンザ阻害剤の開発 Part II:合理的設計と理論解析	創薬懇話会 2014	長良川温泉ホテルパーク(岐阜市)	2014/7
807.	森敬介・小西英之・石川吉伸・橋本博・ <u>常盤広明</u> ・眞鍋敬	塩基によるギ酸エステルの分解反応の計算化学的解析	第60回日本薬学会東海支部大会	鈴鹿医療科学大学(鈴鹿市)	2014/7
808.	<u>Irie, M.</u>	Diarylethene Crystals that Convert Light into Mechanical Work: An Approach to Molecular Machinery (招待講演)	NIMS Conference 2014	Tsukuba, (Japan)	2014/7
809.	<u>Morimoto, M.</u>	Photochromism of diarylethene single crystals: photoinduced shape change	Breaking and Making Bonds with Light	Colorado, (USA)	2014/6

		and photomechanical performance (招待講演)	Workshop		
810.	<u>望月祐志</u> ・ <u>福澤薫</u> ・ <u>沖山佳生</u> ・ <u>渡邊千鶴</u> ・ <u>本間光貴</u> ・ <u>田中成典</u>	<u>フラグメント分子軌道法に基づくタンパク質の理論計算</u> (*学 810)	蛋白質科学会	ワークピア横浜 (横浜市)	2014/6
811.	<u>古郡孝太</u> ・ <u>小田木陽</u> ・ <u>佐藤真</u> ・ <u>山中正浩</u> ・ <u>長澤和夫</u>	テトラロン型 $\beta$ ケトエステル $\alpha$ 位の有機触媒的不斉酸化反応を基盤とする $\beta$ 位及び $\gamma$ 位の速度論的光学分割	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
812.	<u>野田洋史</u> ・ <u>舟山浩介</u> ・ <u>榎山儀恵</u> ・ <u>寺田眞浩</u> ・ <u>山中正浩</u>	キラルビスリン酸触媒を用いた不斉 Diels-Alder 反応の理論的研究	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
813.	<u>長澤裕貴</u> ・ <u>柴田幸大</u> ・ <u>鹿又喬平</u> ・ <u>山中正浩</u> ・ <u>寺田眞浩</u>	キラルリン酸触媒によるアズラクトンとビニルエーテルの直接的不斉アルドール型反応の理論的研究	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
814.	<u>佐藤真</u> ・ <u>山中正浩</u> ・ <u>長澤和夫</u> ・ <u>川端猛夫</u>	柔軟な骨格を持つ有機分子触媒を用いた触媒反応の理論的解析	分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム	北海道大学 (札幌市)	2014/6
815.	Hosozawa, T.; Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multitarget Inhibitor for Glycoproteins of Influenza Virus Part I: Organic Synthesis and Optical Resolution	9th International Symposium on Glycosyltransferases (Glyco-T 2014)	Porto, (Portugal)	2014/6
816.	Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Development of Novel Multitarget Inhibitor for Glycoproteins of Influenza Virus Part II Rational Design and in silico Analysis	9th International Symposium on Glycosyltransferases (Glyco-T 2014),	Porto, (Portugal)	2014/6
817.	<u>森啓二</u> ・ <u>栗原一樹</u> ・ <u>矢部真之介</u> ・ <u>山中正浩</u> ・ <u>秋山隆彦</u>	ヒドリド転位型分子内 redox 系の連続利用による二重 C(sp <sup>3</sup> )-H 結合官能基化反応の開発	第 105 回有機合成シンポジウム	東京工業大学 (目黒区)	2014/6
818.	Ishitsubo, E.;	Novel <i>in silico</i> investigation	3rd isirv Antiviral	Tokyo,	2014/6

	Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Hosozawa, T.I Yokoe, H.; Tubuki, M.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	between pleiotropic inhibitor for multitarget and Influenza virus	Group Conference	(Japan)	
819.	谷島大介・ <u>大山 秀子</u> ・前川真太 朗・宇杉真一	ポリ乳酸系水崩壊性ブレンド の加水分解挙動の研究	第 63 回高分子学 会年次大会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2014/5
820.	清水祐子・菅野 智成・ <u>大山秀子</u>	3 官能性シランモノマー/ポリ ジメチルシロキサンを前駆体 とした柔軟性シリカキセロゲ ルの創出	第 63 回高分子学 会年次大会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2014/5
821.	菅野智成・ <u>大山 秀子</u>	ステレオコンプレックス結晶 を含む・多孔質ポリ乳酸モノ リスの生成	第 63 回高分子学 会年次大会	名古屋国際会 議場 (名古屋市)	2014/5
822.	<u>宮部寛志</u>	<u>固定相リガンドー溶質分子 間相互作用のモーメント解析 法の開発(*学 822)</u>	第 74 回分析化学 討論会	日本大学 (郡山市)	2014/5
823.	島崎裕紀・甲原 翔太・ <u>宮部寛志</u>	<u>水を移動相として使用する逆 相液体クロマトグラフィー系 の分離挙動のモーメント解析 (*学 823)</u>	第 74 回分析化学 討論会	日本大学 (郡山市)	2014/5
824.	小嶋亮平・岡田 智暉・江波幸 樹・ <u>和田亨</u> ・ <u>望 月祐志</u>	1,4,7-トリアザシクロノナン (tacn)を配位とする白金錯体 の電子状態	理論化学討論会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/5
825.	岡崎誠司・中野 祥吾・ <u>常盤広 明</u> ・浅野泰久	第一原理計算および MD シ ミュレーションを用いた植物 由来ヒドロキシルゲナーゼの マルチスケールシミュレーシ ョン	日本農芸化学会 2014 年度大会	明治大学 (川崎市)	2014/3
826.	石川岳志・ <u>常盤 広明</u>	今こそ高精度計算によるコン ピュータ支援型創薬を -ここ までわかる DPP4 阻害薬の 違い-	日本薬学会第 134 年会ランチョ ンセミナー	熊本大学 (熊本市)	2014/3
827.	<u>常盤広明</u> ・宮地 弘幸	ウェットドライ融合型医薬 カテゴリを基盤とする創薬学 の可能性	日本薬学会第 134 年会シンポジ ウム	熊本大学 (熊本市)	2014/3
828.	佐藤大樹・田口	[5-endo-dig]型環化反応によ	日本薬学会第	熊本大学	2014/3

	友里・加藤誠也・細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	るスピロジエノン骨格の構築とFR901483の不斉合成	134 年会	(熊本市)	
829.	細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	細胞毒性を有するキノリンアルカロイド aspoquinolone A の合成研究 (日本薬学会優秀発表賞受賞)	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3
830.	斧田賢嗣・森田大地・澤田紘実・石坪江梨花・松野研司・ <u>常盤広明</u> ・黒田照夫・宮地弘幸	天然由来 bis(bibenzyl) 骨格を有する新規膜障害性抗MRSA 薬の創製	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3
831.	山藤歩・安倍智子・Karl K Kirschner・横江弘雅・津吹政可・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・左一八・ <u>常盤広明</u>	新規デングウイルス感染症治療薬の理論的設計・開発	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3
832.	丸藤友彦・石坪江梨花・加来田博貴・山田幸子・榎島 誠・ <u>常盤 広明</u>	高精度第一原理計算および MD シミュレーションを用いた核内受容体 AF2 インターフェースの動的構造解析	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3
833.	石坪江梨花・中野佑香・島野仁・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算を用いた DPP-4 阻害薬に関する理論的研究 3	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3
834.	藤田侑・高橋忠伸・鈴木隆・ <u>池田潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	インフルエンザ HA とスルファチドとの理論的相互作用解析	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3
835.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	梅エキス抽出物をリードとしたマルチターゲット新規抗インフルエンザ薬の合理的設計・開発 (日本薬学会優秀発表賞受賞)	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3
836.	中野佑香・石坪江梨花・丸藤友	第一原理計算および MD シミュレーションを用いた遊離	日本薬学会第134 年会	熊本大学(熊本市)	2014/3

	彦・速水耕介・ 韓力・辻智子・ <u>常盤広明</u>	脂肪酸と脂肪酸受容体との 理論的相互作用解析			
837.	<u>福澤薫</u> ・渡邊千 鶴・塚本貴志・ 加藤昭史・沖山 佳生・田中成 典・ <u>望月祐志</u>	FMO 電子状態計算による X 線結晶構造の精密化の検討	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
838.	沖山佳生・渡邊 千鶴・ <u>望月祐 志</u> ・坂倉耕太・ 山本純一・野口 孝明・小久保達 信・新宮哲・ <u>古 明地勇人</u> ・ <u>福澤 薫</u> ・中野達也・ 田中成典	<u>ABINIT-MP による京でのフ ラグメント分子軌道計算</u> (* 学 838)	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
839.	滝田京子・ <u>山中 正造</u>	キラル銀ビスアミジン触媒を 用いたインドールとニトロア ルケンの不斉 Friedel-Crafts アルキル化反応の開発	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
840.	坂田健・ <u>山中正 造</u> ・吉岡謙・浦 口大輔・大井貴 史	キラルテトラアミノホスホニウ ム塩を用いた高位置・高立 体選択的 1,6-付加反応に関 する理論的研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
841.	海津溪介・ <u>山中 正造</u>	二核亜鉛ビスアミジナート触 媒を用いた $\alpha$ ケトエステルの 不斉ヒドロホスホニル化反応	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
842.	土岐将太郎・ <u>山 中正造</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触 媒による $\alpha$ ケトエステルの不 斉アルキル化反応	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
843.	岸信孝・ <u>山中正 造</u>	キラル亜鉛ビスアミジン触媒 による不斉向山アルドール 反応における化学選択性	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
844.	矢部真之介・栗 原一樹・森啓 二・秋山隆彦・ <u>山中正造</u>	分子内 redox 反応における ヒドリド転位の化学選択性に 関する理論的研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
845.	小田木陽・古郡 孝太・佐藤真・ <u>山中正造</u> ・長澤 和夫	グアニジン-ウレア触媒を用 いたテトラロン型 $\beta$ ケトエステ ル $\alpha$ 位の不斉酸化反応を基 盤とする $\beta$ および $\gamma$ 位の速度 論的光学分割法の開発	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3

846.	<u>山中正造</u>	キラルリン酸触媒の反応制御・立体制御機構の解明	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
847.	平井美咲・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	4種のビスボラン側鎖異性体の合成とその NMR	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
848.	高木広和・廣田洋・ <u>黒田智明</u>	<i>Ligularia lankongensis</i> から単離されたビスボラン型セスキテルペンの合成研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
849.	池上大輔・ <u>黒田智明</u>	アрилシランの水中閉環反応を用いるメチレンラクトン化合物の合成研究	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
850.	<u>和田亨</u> ・江波幸樹・宮里裕二	<u>1,4,7-トリアザシクロノナン配位子を有する白金錯体の 2 電子酸化還元反応に伴う可逆的構造変化(*学 850)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
851.	和田美里・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>複核コバルト錯体を触媒とする酸素の四電子還元反応における架橋配位子の影響(*学 851)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
852.	真木英孝・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラセンで架橋した複核コバルト錯体触媒による酸素還元反応(*学 852)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
853.	一瀬翔・小林翔・ <u>箕浦真生</u> ・橋爪大輔・笹森貴裕・時任宣博	<u>6価有機テルル Ph<sub>6</sub>Te の精密結晶構造解析(*学 853)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
854.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	速度論的に安定化された 1-ブテン-2-チオール類の合成と構造	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
855.	永松麻由子・行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	9-トリプチシル基を有するゲルマニウム化合物の合成と反応	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
856.	杉崎裕一・増田成悟・中村卓哉・石田周平・掛札洋平・小澤健一・ <u>枝元一之</u>	<u>Ag(110)上に合成した(1×1)TiO<sub>2</sub>超薄膜の電子状態(*学 856)</u>	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
857.	<u>枝元一之</u> ・杉崎裕一・石田周平・掛札洋平	Fe <sub>2</sub> P(0001)面の共鳴光電子分光	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
858.	石田周平・杉崎裕一・中村卓哉・掛札洋平・	遷移金属リン化合物表面の電子状態	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3

	<u>枝元一之</u>				
859.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・ヘキサシアニド鉄(II)錯体電荷移動塩の合成と結晶構造	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
860.	新井悠平・多賀悠平・竹井敏・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテン誘導体の単一分子発光スイッチング特性	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
861.	稲葉航平・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	熱退色型フォトクロミックジアリールエテンの合成	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
862.	稲留徹・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	中央エテン部位にベンゾチオフェンを有する蛍光性ジアリールエテンの合成	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
863.	八木亮・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	水溶性フォトクロミックジアリールエテンの合成	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
864.	高木祐太・松浦智夏・伊都将司・宮坂博・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	蛍光性ジアリールエテンの合成-置換基効果と溶媒依存性	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
865.	池上雄大・伊都将司・宮坂博・宇野何岸・高木祐太・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	ジアリールエテン誘導体を用いた超解像蛍光スポット	日本化学会 第 94 春季年会	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
866.	和田芳樹・ <u>松下信之</u> ・大橋直樹	擬一次元白金錯体における自己束縛励起子, ソリトン, ポーラロンの生成消滅過程の励起波長依存性	日本物理学会第 69 回年次大会	東海大学 (平塚市)	2014/3
867.	<u>和田 亨</u>	<u>Ru-C 結合を有するルテニウム錯体による水の酸化反応</u> (* 学 867)	文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「人工光合成」(領域番号 2406), 第 4 回フォーラム	名古屋大学 (名古屋市)	2014/3
868.	Nakajima, S.; <u>Oyama, H. T.</u>	Preparation and thermal property of polypropylene composites containing layered double hydroxides (LDH) with various divalent	ACS 247th National Meetings & Exposition	Dallas (USA)	2014/3

		metals			
869.	Kanno, T.; <u>Oyama, H. T.</u>	Monolithic porous poly(lactic acid) (PLA) with stereocomplex crystals	ACS 247th National Meetings & Exposition	Dallas, (USA)	2014/3
870.	永田大樹・豊島輝・沖山佳生・ <u>都築誠二</u> ・ <u>宮部寛志</u> ・ <u>望月祐志</u>	<u>逆相液体クロマトグラフィー系の分離挙動に関する計算化学的研究(*学870)</u>	応用物理学会 春季学術講演会	青山学院大学 (相模原市)	2014/3
871.	<u>枝元一之</u> ・今西沙織・増田成悟・掛札洋平・小澤健一	Ni <sub>2</sub> P(10-10)の角度分解光電子分光ーリン偏析に伴う表面電子状態の変化	第31回 PF シンポジウム	つくば国際会議場 (つくば市)	2014/3
872.	杉崎裕一・増田成悟・中村卓哉・岡本俊樹・神部祐太・野々上淳・掛札洋平・小澤健一・ <u>枝元一之</u>	<u>X線吸収端近傍微細構造によるAg(110)上に合成したTiO<sub>2</sub>薄膜の研究(*学872)</u>	第31回 PF シンポジウム	つくば国際会議場 (つくば市)	2014/3
873.	吉信淳・近藤寛・坂本一之・小澤健一・櫻井岳暁・ <u>枝元一之</u> ・中辻寛・間瀬一彦・中村潤児	エネルギー変換材料の表面界面物性: VUV/SX 放射光分光による研究	第31回 PF シンポジウム	つくば国際会議場 (つくば市)	2014/3
874.	杉崎裕一・増田成悟・中村卓哉・掛札洋平・小澤健一・ <u>枝元一之</u>	<u>光電子分光およびX線吸収微細構造によるAg(110)上のチタニア薄膜の評価(*学874)</u>	平成25年度日本表面科学会東北・北海道支部学術講演会	東北大学 (仙台市)	2014/3
875.	佐藤大樹・田口友里・加藤誠也・細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	[5-endo-dig]型環化反応によるスピロジエノン骨格の構築とFR901483の不斉合成	学術研究振興資金研究成果発表会	星薬科大学 (品川区)	2014/2
876.	山藤歩・ <u>常盤広明</u>	新規 Dengue ウイルス感染症治療薬の理論的開発	糖鎖バイオインフォマティクス若手の会合同セミナー	理化学研究所 (和光市)	2014/2
877.	<u>入江正浩</u>	光に応答する分子結晶	世界結晶年オー	日本学術会議	2014/1

		(招待講演)	プニングシンポジウム	講堂 (港区)	
878.	石坪江梨花・酒井美帆・堀 隆典・Nongluck Sriwilaijaroen・Sadagopan Magesh・安藤弘宗・石田 秀治・木曾真・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算を用いたマルチターゲット抗インフルエンザウイルス薬の合理的設計開発	3rd Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2014/1
879.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	インフルエンザ NA および HA と梅エキス抽出物 Mumefural との理論的相互作用解析	3rd Negative Strand Virus-Japan Symposium	ラグナガーデンホテル (宜野湾市)	2014/1
880.	杉崎裕一・中村卓哉・石田周平・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	<u>Ag(110)上に合成した TiO<sub>2</sub> 超薄膜の電子状態(*学 880)</u>	第 27 回日本放射光学学会年会	広島国際会議場 (広島市)	2014/1
881.	中野祥吾・岡崎誠司・ <u>常盤広明</u> ・浅野泰久	第一原理計算に基づく Alkaline-D-peptidase(ADP) の基質特異性の起源に関する理論的研究	第 17 回生体触媒化学シンポジウム	岡山理科大学 (岡山市)	2013/12
882.	<u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラセンを架橋配位子とする二核ルテニウム錯体による水の酸化反応(*学 882)</u>	第 23 回日本 MRS 年次大会	万国橋国際センター (横浜市)	2013/12
883.	須原義智・廣田佳久・花田典佳・和田昭盛・ <u>常盤広明</u> ・中川公恵・岡野登志夫	ニューロンへの分化を誘導する新規ビタミン K 誘導体の創製	第 341 回脂溶性ビタミン研究委員会	奈良女子大学 (奈良市)	2013/12
884.	小林翔・ <u>箕浦真生</u> ・要 衛・指田春喜	ビス(2-エチニルフェニル)ジカルコゲニド類のヨウ素環化反応	第 40 回有機典型元素化学討論会	近畿大学 11 月ホール (東大阪市)	2013/12
885.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	<u>α-水素を有するスルフィンの合成と反応(*学 885)</u>	第 40 回有機典型元素化学討論会	近畿大学 11 月ホール (東大阪市)	2013/12

886.	小林翔・ <u>箕浦真生</u>	酸化ジハロゲン化による6価ジハロ有機テルル(VI)類の合成(*学886)	第9回有機元素化学セミナー	京都大学(宇治市)	2013/11
887.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	2-アダマンチル基を有する不飽和スルフェン酸の合成と捕捉反応(*学887)	第9回有機元素化学セミナー	京都大学(宇治市)	2013/11
888.	杉崎裕一・石田周平・中村卓哉・岡本俊樹・野々上淳・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	Ag(110)単結晶表面上にエピタキシャル成長させたレピドクロサイト型TiO <sub>2</sub> の電子状態(*学888)	第33回表面科学学術講演会	つくば国際会議場(つくば市)	2013/11
889.	石田周平・杉崎裕一・井上有彩・掛札洋平・ <u>枝元一之</u>	共鳴光電子分光を用いたFe <sub>2</sub> P(0001)面の電子状態分析	第33回表面科学学術講演会	つくば国際会議場(つくば市)	2013/11
890.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	梅エキス抽出物フラン誘導体を先導化合物とした新規抗インフルエンザ薬の合理的設計開発	第31回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ(広島市)	2013/11
891.	渡會友祐・前川和樹・石澤通康・宇野茂之・MOURIÑO Antonio・榎島誠・ <u>常盤広明</u> ・山田幸子	共役 diyne とアダマンチル基を側鎖に有する19-ノルビタミンD誘導体の立体選択的合成と生物活性評価	第31回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ(広島市)	2013/11
892.	石坪江梨花・中野佑香・島野仁・ <u>常盤広明</u>	高精度第一原理計算を用いたDPP-4阻害薬に関する理論的研究2	第31回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ(広島市)	2013/11
893.	斧田賢嗣・森田大地・澤田紘実・石坪江梨花・松野研司・ <u>常盤広明</u> ・黒田照夫・宮地弘幸	Bis(bibenzyl)型天然物を先導化合物とした新規膜障害性抗MRSA薬の創製	第31回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ(広島市)	2013/11
894.	山藤歩・Karl K Kirschner・左一八・ <u>池田潔</u> ・横	新規デングウイルス感染症治療薬の理論的設計・開発	第31回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ(広島市)	2013/11

	江弘雅・津吹政可・ <u>常盤広明</u>				
895.	前川和樹・工藤健・渡會友祐・石澤通康・内田光・中林誠・伊藤暢聡・ <u>常盤広明</u> ・榎島誠・山田幸子	新規 VDR パーシャルアゴニストの立体選択的合成, X線結晶構造解析, および生物活性	第 31 回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ (広島市)	2013/11
896.	澤田紘実・森田大地・斧田賢嗣・石坪江梨花・松野研司・ <u>常盤広明</u> ・黒田照夫・宮地弘幸	Bis(bibenzyl) 型天然物の抗 MRSA 活性発現の分子標的探索	第 31 回メディシナルケミストリーシンポジウム	アステールプラザ (広島市)	2013/11
897.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilaijaroen・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	第一原理計算を用いたインフルエンザウイルス表面糖タンパク質とマルチターゲット医薬リード天然物との高精度相互作用解析	第 61 回ウイルス学会学術集会	神戸国際会議場 (神戸市)	2013/11
898.	山藤歩・伊東祐仁・Karl N Kirchner・左一八・ <u>池田潔</u> ・鈴木隆・ <u>常盤広明</u>	デングウイルス感染症の新規薬剤の理論解析及び新規リード化合物の設計	第 61 回ウイルス学会学術集会	神戸国際会議場 (神戸市)	2013/11
899.	五十嵐学・吉田玲子・関嶋政和・ <u>常盤広明</u> ・喜田宏・伊藤公人・高田礼人	計算科学的手法を用いたインフルエンザウイルスヘマグルチニンと亜型間交差反応性抗体との分子間相互作用の解析	第 61 回ウイルス学会学術集会	神戸国際会議場 (神戸市)	2013/11
900.	<u>Yamanaka, M.</u>	Applications in Asymmetric Catalysis Multifunctional Bisamidine Ligand	13th Tateshina Conference on Organic Chemistry	Tateshina, (Japan)	2013/11
901.	中島佐知子・ <u>大山秀子</u>	<u>ポリプロピレン/2 価の金属種を変えた層状複水酸化物 (LDH)系コンポジットの熱特性(*学 901)</u> <u>(ベストポスター賞受賞)</u>	第 21 回プラスチック成形加工学会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
902.	安部早紀・ <u>大山秀子</u>	ステレオコンプレックス結晶を有するポリ乳酸アロイの創	第 21 回プラスチック成形加工学	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11

		出及び物性解析	会秋季大会		
903.	片山英雄・ <u>大山秀子</u>	ポリ乳酸/ポリビニルフェノールブレンドにおける相溶性と熱挙動の検討	第 21 回プラスチック成形加工学会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
904.	森洋輔・中島佐知子・清水祐子・黒岩晴子・ <u>大山秀子</u>	ポリアミド 6/反応性エチレン共重合体ブレンドにおける反応のメカニズムと物性の検討	第 21 回プラスチック成形加工学会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
905.	菅野智成・ <u>大山秀子</u>	疎水性シラン/エラストマー前駆体とする・柔軟性シルカキセロゲルの生成(*学 905) (ベストポスター賞受賞)	第 21 回プラスチック成形加工学会秋季大会	倉敷市芸文館 (倉敷市)	2013/11
906.	<u>Edamoto, K.</u> ; Imanishi, S.; Kakefuda, Y.; Ozawa, K.	Angle-resolved photoemission study of Ni <sub>2</sub> P(10-10): Change in the surface electronic structure induced by P segregation	12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructure	Tsukuba, (Japan)	2013/11
907.	Sugizaki, Y.; Ishida, S.; Inoue, A.; Kakefuda, Y.; <u>Edamoto, K.</u>	Electronic Structure of Fe <sub>2</sub> P(0001): Resonant photoemission spectroscopy study	12th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructure	Tsukuba (Japan)	2013/11
908.	海津溪介・ <u>山中正浩</u>	二核亜鉛ビスアミジナート触媒による $\alpha$ ケトエステルの不斉ヒドロホスホニル化反応	第 104 回有機合成シンポジウム	早稲田大学 (新宿区)	2013/11
909.	土岐将太郎・ <u>山中正浩</u>	複核亜鉛ビスアミジナート触媒による $\alpha$ ケトエステルの不斉アルキル化反応	第 104 回有機合成シンポジウム	早稲田大学 (新宿区)	2013/11
910.	細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・ <u>常盤広明</u> ・津吹政可	細胞毒性活性を有するキノリンアリカロイド aspoquinolone A の合成研究	第 39 回反応と合成の進歩シンポジウム	九州大学 (福岡市)	2013/11
911.	小嶋亮平・瀬戸根直希・ <u>和田亨</u> ・ <u>望月祐志</u>	ナフチリジンを架橋配位子とする Ru-Ru 錯体の電子状態に関する理論解析	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
912.	小嶋亮平・上之原和佳・ <u>松下信之</u> ・森寛敏・ <u>望月祐志</u>	テトラシアニド白金錯体-メチルビオロゲン複合系における電子状態解析と構造予測	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11

913.	江波幸樹・石川裕騎・宮里雄二・Ernst Horn・ <u>和田亨</u>	ta <sub>2</sub> cn 配位子を有する白金錯体の酸化還元に伴う可逆的構造変化(*学 913)	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
914.	真木英孝・ <u>和田亨</u> ・宮里裕二	複核コバルト錯体触媒による酸素還元反応における二座配位子の影響(*学 914)	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
915.	平出尚秀・宮里裕二・ <u>和田亨</u>	ルテニウム-炭素結合を有するルテニウム-ポリピリジル錯体による水の酸化反応(*学 915)	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
916.	和田美里・ <u>和田亨</u> ・宮里裕二・真木英孝	ビス(ターピリジル)キサンテンを架橋配位子とする複核コバルト錯体による酸素還元反応(*学 916)	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
917.	宮里裕二・ <u>和田亨</u>	水の四電子酸化能を有するオキソおよびピロリン酸架橋型二核 Ru 錯体の合成(*学 917)	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
918.	真柄勇希・ <u>松下信之</u>	ハロゲン架橋一次元混合原子価白金錯体スルホコハクジアルキル塩の液晶性の架橋ハロゲン・アルキル鎖長依存性	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
919.	藪崎良人・ <u>松下信之</u>	ビス( <i>o</i> -セミベンゾキノンジイミン)白金系錯体の酸化還元挙動比較	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
920.	上之原和佳・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・テトラシアニド白金(II)錯体の発光性電荷移動塩の結晶構造と発光特性	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
921.	田中李叶子・ <u>松下信之</u>	有機アクセプター・ヘキサシアニド鉄(II)錯体電荷移動塩の酸蒸気による二段階ベロクロミズム	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
922.	小中尚・梅澤いづみ・佐々木明登・ <u>松下信之</u>	テトラシアニド白金(II)酸塩の外部刺激による構造変化と発光クロモトロピズム	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
923.	渡邊永治・吉田真那・ <u>松下信之</u>	レドックス活性白金錯体の NMR における緩和現象	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
924.	橋本愛・ <u>松下信之</u>	白金錯体の単結晶フォトクロミズムと結晶化溶媒	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
925.	松尾健司・ <u>松下</u>	テトラシアニドパラジウム錯	錯体化学討論会	琉球大学	2013/11

	<u>信之</u>	体の発光性電荷移動塩のアクセプター展開	第 63 回討論会	(西原市)	
926.	小中尚・梅澤いづみ・佐々木明登・ <u>松下信之</u>	発光クロモトロピズムを示すテトラシアニド白金(II)酸塩の粉末結晶構造解析	錯体化学討論会 第 63 回討論会	琉球大学 (西原市)	2013/11
927.	Okiyama, Y.; Watanabe, C.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u>	<u>FMO calculations with ABINIT-MP on K-computer(*学 927)</u>	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
928.	<u>Fukuzawa, K.</u> ; Watanabe, N.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u>	Refinement of Crystal Structures Using Partial Geometry Optimization and Electron Density Calculations Based on the Fragment Molecular Orbital Method	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
929.	Kurauchi, R.; Tanaka, S.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Kato, A.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; <u>Mochizuki, Y.</u> ; Nakano, T.	FMO-based cluster analysis for drug design by multi-dimensional scaling	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
930.	Watanabe, C.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Okiyama, Y.; Kato, A.; Tsukamoto, T.; Tanaka, S.; <u>Mochizuki, Y.</u>	FMO-based electron density analysis to protein structure refinement	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
931.	<u>Mochizuki, Y.</u> ; Okiyama, Y.; <u>Fukuzawa, K.</u> ; Watanabe, C.; Kato, K.; Tsukamoto, T.; Nakano, T.; STanaka, S.	FMO calculations for nano-biotechnology	CBI conference	Tokyo (Japan)	2013/10
932.	石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk	第一原理計算および MD Simulation を用いたインフルエンザウイルス HA および NA をマルチターゲットとする	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10

	Sriwilaijaroen ・ 鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	新規阻害剤に関する理論的 研究			
933.	中野佑香・石坪 江梨花・丸藤友 彦・速水耕介・ 韓力・辻智子・ <u>常盤広明</u>	遊離脂肪酸と GPR40 および GPR120 との理論的相互作 用解析	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
934.	石坪江梨花・堀 隆典・酒井美 帆・Nongluck Sriwilaijaroen, Sadagopan Magesh・安藤弘 宗・石田秀治・ 木曾真・宮城妙 子・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	特異的シアリダーゼ阻害活 性を持つ新規抗インフルエン ザ薬の合理的設計・開発	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
935.	石坪江梨花・中 野佑香・ <u>常盤広 明</u>	高精度第一原理計算を用い た DPP-4 阻害薬に関する理 論的研究	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10/
936.	丸藤友彦, 石坪 江梨花, 中野佑 香, 速水耕介, 韓力, 辻智 子, <u>常盤広明</u>	非エステル型脂肪酸と核内 受容体 PPAR $\alpha/\gamma$ との理論的 相互作用解析	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
937.	藤田侑・高橋忠 伸・鈴木隆・ <u>池 田潔</u> ・ <u>常盤広明</u>	新規抗インフルエンザ薬開 発を目指したウイルス表面タ ンパク質 HA とスルファチドと の理論的相互作用解析	第 57 回薬学会 関東支部大会	帝京大学 (板橋区)	2013/10
938.	<u>和田亨</u>	<u>ビス(ターピリジル)アントラセ ンを架橋配位子とする二核 ルテニウム錯体触媒による 水の酸化反応(*学 938)</u>	文部科学省科学 研究費補助金新 学術領域研究 「人工光合成」 (領域番号 2406), 第 2 回公 開シンポジウム	立命館大学 (京都市)	2013/10
939.	<u>大山秀子</u>	ブレンド・アロイ化によるポリ 乳酸の機能性付与 (招待講演)	第 25 回高分子加 工技術討論会	名古屋市工業 研究所(名古屋)	2013/10
940.	滝田京子・ <u>山中 正浩</u>	キラル Ag(I)-ビスアミジン触 媒を用いた不斉 Friedel-Crafts 反応の開発	第 3 回 CSJ 化学 フェスタ	タワーホール船 堀(江戸川区)	2013/10

941.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	$\alpha,\beta$ -不飽和スルフェン酸の合成とその捕捉反応	第3回CSJ化学フェスタ	タワーホール船堀(江戸川区)	2013/10
942.	池上大輔・ <u>黒田智明</u>	テルペン合成を目指したアリルシラン化合物の水中閉環反応に関する研究	第57回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学(さいたま市)	2013/10
943.	清水杏菜・花井亮・岡本育子・通元夫・河原孝行・ <u>龔洵</u> ・ <u>黒田智明</u>	中国雲南省香格里拉県における <i>Ligularia subspicata</i> の複雑な多様性	第57回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学(さいたま市)	2013/10
944.	高木広和・平井美咲・宮崎瑠璃奈・ <u>廣田洋</u> ・ <u>黒田智明</u>	酸素官能基化されたピサポラン型化合物の合成と8, 10位の立体化学	第57回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学(さいたま市)	2013/10
945.	通元夫・谷口瑞穂・伊賀砂央里・齋藤義紀・小宮山哲平・大崎愛弓・岡本育子・ <u>龔洵</u> ・河原孝行・花井亮・ <u>黒田智明</u>	中国産 <i>Ligularia virgaurea</i> の新規化学成分と多様性(2)	第57回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学(さいたま市)	2013/10
946.	通元夫, 伊賀砂央里, 齋藤義紀, 岡本育子, <u>龔洵</u> , 河原孝行, 花井亮, <u>黒田智明</u>	中国産 <i>Ligularia virgaurea</i> の新規化学成分と多様性(3)	第57回香料テルペンおよび精油化学に関する討論会	埼玉大学(さいたま市)	2013/10
947.	通元夫, 齋藤義紀, 市原麻由, 岡本育子, <u>龔洵</u> , 花井亮, <u>黒田智明</u>	中国四川省産 <i>Cremanthodium lineare</i> の化学的遺伝的多様性および関連種の化学成分	第55回天然有機化合物討論会	同志社大学(京都市)	2013/9
948.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K. N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical study of novel multitarget inhibitor for influenza virus by the first-principles calculation and MD Simulation <b>(Young Scientist Program Awardee)</b>	International Conference of 5th Asain Communications of Glycobiology and Glycotechnology 2013	Khon Koen, (Thailand)	2013/9

949.	Ishitsubo, E.; Hori, T.; Sakai, M.; Sriwilaijaroen, N.; Magesh, S.; Ando, H.; Ishida, S.; Kiso M.; Miyagi, T.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Rational design and development of a novel potent and highly specific inhibitor against influenza viral and human neuraminidases	International Conference of 5th Asain Communications of Glycobiology and Glycotechnology 2013	Khon Koen, (Thailand)	2013/9
950.	<u>望月祐志</u> ・ <u>沖山</u> <u>佳生</u> ・ <u>渡邊千</u> <u>鶴</u> ・ <u>塚本貴志</u> ・ <u>福澤薫</u> ・ <u>田中</u> <u>成典</u>	<u>フラグメント分子軌道計算に</u> <u>基づくペプチド-シリカの相互</u> <u>作用解析(*学950)</u>	応用物理学会秋 季学術講演会	同志社大学, (京田辺市)	2013/9
951.	<u>望月祐志</u>	<u>ABINIT-MP プログラムの現</u> <u>状の機能紹介と今後の展開</u> (*学951) (招待講演)	スーパーコンピュ ーティング技術産 業応用協議会-セ ミナー	機械振興会館 (港区)	2013/9
952.	<u>中野祥吾</u> ・ <u>岡崎</u> <u>誠司</u> ・ <u>常盤広</u> <u>明</u> ・ <u>浅野泰久</u>	Open and closed structures of GalE-like L-Threonine dehydrogenase from Cupriavidus necator appeared from X-ray crystal structures and molecular dynamics simulation	第86会日本生 化学会大会	パシフィコ横浜 (横浜市)	2013/9
953.	<u>高木祐太</u> ・ <u>森本</u> <u>正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジアリールエテンの合 成-置換基効果と溶媒依存 性	2013 年光化学討 論会	愛媛大学 (松山市)	2013/9
954.	<u>松浦智夏</u> ・ <u>片山</u> <u>哲郎</u> ・ <u>石橋千英</u> ・ <u>宮坂博</u> ・ <u>山口忠</u> <u>承</u> ・ <u>小島誠也</u> ・ <u>入</u> <u>江正造</u>	ジアリールエテン誘導体の光 開環反応ダイナミクスに対 する励起波長依存性	2013 年光化学討 論会	愛媛大学 (松山市)	2013/9
955.	<u>八木亮</u> ・ <u>森本</u> <u>正和</u> ・ <u>入江正造</u>	水溶性蛍光フォトクロミックジ アリールエテンの合成	2013 年光化学討 論会	愛媛大学 (松山市)	2013/9
956.	<u>須見貴樹</u> ・ <u>森本</u> <u>正和</u> ・ <u>入江正造</u>	蛍光性ジチエニルエテン誘 導体の合成	2013 年光化学討 論会	愛媛大学 (松山市)	2013/9
957.	<u>市川智浩</u> ・ <u>森本</u> <u>正和</u> ・ <u>入江正造</u>	2成分結晶における水素結 合を有するジアリールエテ ンの光反応	2013 年光化学討 論会	愛媛大学 (松山市)	2013/9
958.	<u>高見静香</u> ・ <u>山口</u>	オレフィン部位に 4-メトキシ	2013 年光化学討	愛媛大学	2013/9

	忠承・ <u>入江正浩</u>	フェニルおよびフェニル基をもつ 1-チアゾリル-2-ビニルシクロペンテンのフォトクロミズム	論会	(松山市)	
959.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K. N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Novel in silico analysis based on the first-principle calculations and molecular dynamics simulations of molecular mechanism of influenza virus pathogenesis	12th Awaji International Forum on Infection and Immunity 2013	Awajishima, (Japan)	2013/9
960.	小林翔・ <u>箕浦真生</u>	<u>ジハロ有機テルル(VI)化合物の合成とその脱ハロゲン化反応(*学 960)</u>	第 24 回基礎有機化学討論会	学習院大学 (豊島区)	2013/9
961.	行本万里子・ <u>箕浦真生</u>	<u>嵩高い置換基を有する<math>\alpha,\beta</math>-不飽和スルフェン酸の合成と捕捉反応(*学 961)</u>	第 24 回基礎有機化学討論会	学習院大学 (豊島区)	2013/9
962.	<u>入江正浩</u>	光に応答する分子と結晶 (招待講演)	第 24 回基礎有機化学討論会	学習院大学 (豊島区)	2013/9
963.	石坪江梨花・ Karl N. Kirshner・ Nongluk Sriwilaijaroen・ 鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	FMO および MD 計算によるムメフラールの NA に対する理論的相互作用解析	第 32 回日本糖質学会年会	大阪国際交流センター (大阪市)	2013/8
964.	<u>常盤広明</u> ・ <u>池田潔</u> ・ <u>大坪忠宗</u> ・ <u>荘司裕一郎</u> ・ <u>森本正和</u> ・ <u>入江正浩</u>	<u>糖置換基導入による水溶性フォトクロミック分子の合成と評価(*学 964)</u>	第 32 回日本糖質学会年会	大阪国際交流センター (大阪市)	2013/8
965.	石坪江梨花・堀隆典・酒井美帆・Nongluk Sriwilaijaroen・Sadagopan Magesh・安藤弘宗・石田秀治・木曾真・宮城妙子・鈴木康夫・ <u>常盤広明</u>	特異的シアリダーゼ阻害活性を持つ新規化合物と viNA/huNeu との相互作用解析	第 32 回日本糖質学会年会	大阪国際交流センター (大阪市)	2013/8
966.	<u>望月祐志</u>	<u>フラグメント分子軌道計算プログラム ABINIT-MP の開発と応用事例(*学 966)</u>	新化学技術推進協議会-先端化学・材料技術部	新化学技術推進協会 (千代田区)	2013/8

		(招待講演)	会-研究会		
967.	<u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道(FMO)計算の現状と今後(*学967) (招待講演)	新学術領域「分子ロボティクス」研究会	東京工業大学(港区)	2013/7
968.	<u>望月祐志</u>	フラグメント分子軌道計算の現状と今後(*学968) (招待講演)	蛋白質科学会年会	とりぎん文化会館(鳥取市)	2013/6
969.	Ishitsubo, E.; Kirshner, K. N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; <u>Tokiwa, H.</u>	Theoretical interaction analysis between Mumefural and influenza virus NA by first-principles calculation and MD Simulations	Drug Discovery & Therapy World Congress 2013	Boston, (USA)	2013/6
970.	Nakano, Y.; Watanabe, Y.; Ito, Y.; Yamada, S.; <u>Tokiwa, H.</u>	In silico analysis of oligomerization of $\beta$ -adrenergic receptor( $\beta$ AR) by specific fatty acid (FA) compositions	Drug Discovery & Therapy World Congress 2013	Boston, (USA)	2013/6
971.	依田勇佑・菅野智成・ <u>大山秀子</u>	ウレタン結合を含むステレオコンプレックスポリ乳酸の創出	高分子学会	京都国際会議場(京都市)	2013/5
972.	Nagasawa, Y.; <u>Yamanaka, M.</u>	Theoretical Study on Asymmetric Michael Addition of Malonate to Enone Catalyzed by Primary $\alpha$ -Amino Acid Lithium Salt	1st International Conference & 6th Symposium on Organocatalysis	Otsu, (Japan)	2013/5
973.	<u>Yamanaka, M.</u>	The Origin of Enantioselectivity in Chiral Phosphoric Acid-Catalyzed Transfer Hydrogenation of Imines	1st International Conference & 6th Symposium on Organocatalysis	Otsu, (Japan)	2013/5
974.	Nakano, S.; Okazaki, S.; <u>Tokiwa, H.</u> ; Asano, Y.	Open and closed structures of GalE-like L-Threonine dehydrogenase from <i>Cupriavidus necator</i> appeared from X-ray crystal structures and molecular dynamics simulation	4th International Symposium on Diffraction Structural Biology	Nagoya, (Japan)	2013/5
975.	<u>Oyama, H. T.</u> ; Abe, S.	Highly crystalline poly(lactic acid)(PLA) alloys containing stereocomplexes	Tech Connect World 2013	National Harbor, (USA)	2013/5
976.	<u>Irie, M.</u>	Photochromism of Diarylethene Single Molecules and Single	Light-Harvesting Processes 2013	Kloster Banz, (Germany)	2013/4

		Crystals (招待講演)			
--	--	--------------------	--	--	--

<研究成果の公開状況>(上記以外)

シンポジウム・学会等の実施状況、インターネットでの公開状況等

<既に実施しているもの>

ホームページによる成果公表

<http://www2.rikkyo.ac.jp/web/mirai/>

公開講演会、シンポジウム

2014年3月15日

未来分子研究センター2013年度成果報告会(別紙資料1)

2014年4月11日

Sydnones, Nitrile imines, Carbodiimides and 1H-Diazirenes

Prof. Curt Wentrup The University of Queensland (Australia) (別紙資料10)

2014年5月23日

新規な高周期15族元素低配位化合物の合成と性質

笹森貴裕先生 京都大学化学研究所(別紙資料11)

2014年9月10日

Recent Developments in Photoresponsive Molecules and Nanoparticles

Prof. Neil Robin Branda Simon Fraser University(別紙資料12)

2014年11月20日

Anion-Recognition as a Powerful Tool for Asymmetric Catalysis

Prof. Daniel Seidel Rutgers University(別紙資料13)

2014年11月22日

「元素科学と共に歩んだ半世紀」-元素科学を基盤とする有機合成反応の開発と応用-

玉尾皓平先生 前日本化学会会長、理化学研究所・研究顧問・グローバル研究クラスタ長  
(別紙資料14)

2014年12月18日

計算化学手法を用いたイオン液体の研究: イオン間相互作用とイオンの輸送物性

都築誠二先生 産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門

ソフトマターモデリンググループ 上級主任研究員(別紙資料15)

2015年3月14日

金属を内包したフラーレンの構造と特性:理論計算と実験

永瀬茂先生 京都大学・福井謙一記念研究センター シニアリサーチフェロー

(別紙資料4)

2015年3月14日

未来分子研究センター2013年度、2014年度成果報告会(外部評価)(別紙資料4)  
外部評価委員による外部評価を受けるため、2013年度、2014年度の成果をまとめた研究成果報告書を作成し(60部)、更に当日各グループごとに研究成果概要を外部評価委員に報告、質疑応答を行った。後日文書により各評価委員の評価を受け取った。(研究成果報告書は、外部評価委員の他、プロジェクトに参画する研究者、その他関連する学内の研究者に配布。)

2015年12月5日

高周期典型元素を含む新規な $\pi$ 電子系の創出とその構造・性質:「重い芳香族」化合物の最近の展開

時任宣博先生 京都大学化学研究所所長、京都大学教授、日本化学会欧文誌編集委員長  
(別紙資料18)

2016年6月23日

Enantioselective Organocatalytic Cycloadditions via Hydrogen Bond Catalysis  
Dr. Geraldine Masson Institut de Chimie des Substances Naturelles, France  
(別紙資料21)

2016年7月6日

Transition State Modeling in Asymmetric Catalysis: Harnessing Noncovalent Interactions in the Rational Design of Catalysts

Prof. Ragahavan B. Sunoj Indian Institute of Technology  
(別紙資料22)

2016年11月22日

次元交差領域における新しい物質科学

北川宏先生 京都大学教授、理事補(研究担当)(別紙資料24)

2017年1月19日

Targeted Synthesis of Porous Aromatic Frameworks: From Structure Design to Advanced Application

Prof. Guangshan Zhu(東北師範大学教授、中国)(別紙資料25)

2017年3月11日

未来分子研究センター2016年度成果報告会(別紙資料26)

2017年8月31日

Boronic Acids: Recognition, Sensing and Assembly

Prof. Tony D. James University of Bath(別紙資料28)

2017年10月14日

International Symposium on Smart Molecules and Materials  
(未来分子研究センター・国際シンポジウム)(別紙資料29)

2017年11月25日

超分子合成の醍醐味:設計 vs セレンディピティー

塩谷光彦先生 東京大学教授

文部科学省科学研究費助成事業「新学術領域研究」「配位アシンメトリ」領域代表  
(別紙資料 31)

2017 年 11 月 29 日

Optimized fluorescent emitters based on a hydroxybenzazole or anil scaffold

Dr. Julien MASSUE University of Strasbourg, France

(別紙資料 32)

2018 年 3 月 10 日

未来分子研究センター2017 年度成果報告会

(別紙資料 34)

#### 14 その他の研究成果等

##### 企業との連携

本プロジェクトの推進および本プロジェクトで得られた成果を実用化するに当たり、以下のよう  
に企業との連携を進めている。

##### 設計グループ

1) (株)JSOL と「高分子ミュレーションのための有効パラメータの算定」を共同研究(望月祐志)。

2) (株)富士通と NDA を結び、ポスト「京」などの超並列スーパーコンピュータ上での ABINIT-MP プログラム(望月が取りまとめ役開発責任者)の性能評価とチューニング指針の獲得を目指し活動中(望月祐志)。

3) (財)RIST と共同で ABINIT-MP プログラムの性能評価(望月祐志)。

4) 日本水産(株)と共同で、「細胞膜貫通型受容体に対する高度不飽和脂肪酸およびその代謝産物の影響について、結合親和性を指標にコンピューターシミュレーションにて理論解析(常盤広明)」。(2013 年以降)

5) ベーリンガーインゲルハイム(株)との委託研究として、「第一原理計算を用いた DPP-4 阻害剤としての 2 型糖尿病治療薬の高精度 *in silico* 解析」を行った(常盤広明)。(2013 年から 2014 年度)

6) (株)リコムと共同で「エノキタケ抽出物によるアドレナリン  $\beta$  受容体活性化メカニズムの理論的解析」を行った(常盤広明)。『内臓脂肪から落ちていく! えのき茶ダイエット』2013 年小学館、2015 年週間新潮 6 月 11 日号などで引用、紹介。

##### 反応制御グループ

7) 分析機器の総合メーカー企業と秘密保持契約を締結し、「ガス/液体クロマトグラフ等の分離剤開発に関する研究」を共同で実施中(宮部寛志)。(2014 年 12 月～現在)

##### 物性・機能制御グループ

8) 三菱ガス化学(株)ならびに理化学研究所と共同で「ピロロキノリンキノン結晶の構造と溶解メカニズム」を研究(松下信之)。(2014 年 11 月～現在)研究成果を共著でアメリカ化学会

の学術論文 *Crystal Growth & Design* (2017, 17, 4118–4123)に『Unusual Ionic Bond and Solubility Mechanism of  $\text{Na}_n\text{PQQ}$  ( $n = 0-4$ ) Crystals』として出版. 理化学研究所と立教大学からプレスリリース(2017年8月8日)

9) 三井化学と共同で「乳酸ステレオブロック共重合体組成物およびその製造方法」を研究(大山秀子)。

10) (株)ベテルと共同で「高分子ナノファイバー材料の熱拡散率測定」を研究(大山秀子、上谷幸治郎)。

#### 特許の出願

本プロジェクトで得られた成果について、特許出願されているものは以下のとおりである。

#### 設計グループ

1) “水溶性フォトクロミック化合物” 常盤広明、入江正浩、池田潔、大坪忠宗、(登録日 2017年9月29日)(登録番号:特許第6214055号)(\*特1)

#### [米国特許]

2) “WATER-SOLUBLE PHOTOCHROMIC COMPOUND” 常盤広明、入江正浩、池田潔、大坪忠宗、(登録日 2017年8月22日)(登録番号 US9,738,675)

3) “VITAMIN D RECEPTOR MODULATORS WITH PARTIAL AGONIST ACTIVITY” 山田幸子、榎島誠、常盤広明、工藤健、渡會友祐子、前川和樹、Antonio Mourino、(登録日 2015年4月28日 登録番号:US9,018,194)。

#### [欧州特許]

4) “NOVEL VITAMIN D RECEPTOR MODULATOR WITH PARTIAL AGONIST ACTIVITY” 山田幸子、榎島誠、常盤広明、工藤健、渡會友祐子、前川和樹、Antonio Mourino、(登録日 2016年8月17日 登録番号:EP2,682,386)

#### 反応制御グループ

5) “電気泳動による物質の相互作用の分析方法” 宮部寛志、(公開日 2016年8月4日 公開番号:特開 2016-138881)(\*特5)

6) “金属錯体およびこれを含む燃料電池用カソード” 和田亨、(登録日:平成 29年5月26日:特許番号:特許第6146860)(\*特6)

#### 物性・機能制御グループ

7) “乳酸ステレオブロック共重合体組成物およびその製造方法”、(立教大学)大山秀子・安部早紀・柴野桂・(三井化学)宇杉真一、(登録日 2016年9月16日 登録番号:特許第6004324号)(三井化学との共願)(\*特7)

8) “有機無機ハイブリッド多孔質体の製造方法”、大山秀子・菅野智成、(登録日 2017年8月25日 登録番号:特許第6195272号)(\*特8)

9) “ポリ乳酸ステレオコンプレックス組成物多孔質体およびその製造方法”、大山秀子・菅野智成、(公開日 2015年6月25日 公開番号:特開 2015-117309)(\*特9)

10) “ポリ乳酸ステレオブロック共重合体組成物およびその製造方法”、大山秀子・安部早紀、(公開日 2015年1月8日 公開番号:特開 2015-004054)(\*特10)

- 11) “ポリプロピレンおよびポリエーテルスルホンを含む樹脂組成物”、大山秀子・中山梨菜・古田元信、(登録日 2017 年 2 月 24 日 登録番号:特許第 6094992 号)
- 12) “ポリプロピレンカーボネートを含むポリプロピレン樹脂組成物およびその製造方法”、大山秀子・古田元信、(公開日 2016 年 4 月 4 日 公開番号:特開 2016-044204) (\* 特 12)
- 13) “スチレン系熱可塑性エラストマーの中空マイクロカプセルおよびその製造方法”、(産総研)竹村文男・(立教大学)大山秀子、(登録日 2014 年 11 月 14 日 登録番号:特許第 5644989 号)
- 14) “ポリフェニレンスルフィドを含む樹脂組成物およびその製造方法” 大山秀子・古田元信・松下茉由・奈良早織、(登録日 2014 年 11 月 21 日 登録番号:特許第 5649114 号 )
- 15) “生分解性樹脂多孔質体”、大山秀子・中村裕介・小川亮平・加賀山陽史、(公開日 2016 年 12 月 15 日特開 2016-210981)(三井化学との共願) (\* 特 15)
- 16) “ポリ乳酸を含む樹脂組成物およびその製造方法”、大山秀子、(登録日 2015 年 7 月 3 日 登録番号:特許第 5769169 号)
- 17) “ポリフェニレンエーテルを含む樹脂組成物およびその製造方法” 大山秀子、古田元信、(登録日 2017 年 1 月 20 日 登録番号:特許第 6074832 号)
- 18) “熱硬化性ポリフェニレンエーテル樹脂組成物を硬化してなる硬化フィルム” 大山秀子、(公開日 2017 年 9 月 21 日 特開 2017-165828)
- 19) “セルロースナノファイバー複合膜およびその製造方法” 大山秀子・上谷幸治郎・岡田拓巳 (公開日 2017 年 12 月 14 日 特開 2017-218470)
- 20) “樹脂組成物及びその加水分解方法” 大山秀子・小川亮平・浦上達宣、(出願日 2018 年 1 月 26 日 特願 2018-011880) (三井化学との共願) (\* 特 20)

#### [国際特許]

- 21) “樹脂組成物及びその加水分解方法” 大山秀子・谷島大介・小川亮平・浦上達宣 (出願日 2016 年 10 月 28 日 特願 2016-211778) PCT/JP2017/038728 (三井化学との共願) (\* 特 21)

#### 受賞等

- 1) “The Porter Medal” (European Photochemistry Association, The Inter-American Photochemistry Society and The Asian and Oceanian Photochemistry Association), 入江正造, 2014 年 4 月(別紙資料 7)
- 2) 2015 年応用物理学会春季学術講演会にて、設計グループ、望月祐志の共同研究者・加藤幸一郎(みずほ情報総研)の発表「アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #2」が第 38 回(2015 年春季)応用物理学会講演奨励賞を受賞。2015 年 3 月 13 日、(応用物理学会 HP <http://www.jsap.or.jp/activities/award/lecture/dai38kai.html>)(別紙資料 16)
- 3) 望月祐志の研究が日経産業新聞で紹介された。(2015 年 5 月 19 日・9 面)
- 4) 常盤広明の研究が日経バイオテック ONLINE で紹介された。(2015 年 4 月 14 日)
- 5) 和田亨の研究が電気新聞で紹介された。(別紙資料 17)
- 6) 上谷幸治郎の研究が日刊工業新聞で紹介された。(2015 年 3 月 24 日)
- 7) 山中正造の研究成果(論 198)が、Chem. Commun.誌の Vol.50 の表紙論文に選ばれた。
- 8) 入江正造の研究成果(論 223)が、Chem. Commun.誌の Vol.50 の中表紙の掲載論文に選ばれた。
- 9) 三井正明(論 240)の研究成果がイギリス王立化学会の Photochemical & Photobiological

Sciences 誌の Issue 8 の表紙論文に選ばれた。

10) 森本正和が光化学協会の第 17 回光化学協会奨励賞を受賞した。

(光化学協会 HP <https://photochemistry.jp/award/kyokai.htm>) (別紙資料 35)

11) 宮部寛志の論文(論 163)が Analytical Science 誌に掲載され、Hot Article Award を受賞した。(別紙資料 36)

12) 上谷幸治郎が、公益社団法人新化学技術推進協会の第 6 回新化学技術研究奨励賞を受賞した。(別紙資料 37)

13) 平成 29 年度繊維学会年次大会にて、上谷幸治郎の発表「面内異方性を持つセルロースナノペーパー」が平成 29 年度繊維学会若手優秀発表賞を受賞した。(別紙資料 38)

14) 第 84 回紙パルプ研究発表会にて、上谷幸治郎の発表「セルロースナノペーパーにおける構造依存的伝熱特性」が口頭発表部門・第 84 回紙パルプ研究発表会若手優秀発表賞を受賞した。

15) 日本エネルギー学会バイオマス部会にて、上谷幸治郎の発表「ナノセルロース集積体の熱エネルギー伝導特性」が第 12 回バイオマス科学会議ポスター賞第 1 位(最優秀賞)を受賞した。

16) 松下信之の研究が科学新聞で紹介された。(2017 年 9 月 8 日・4 面)

17) 大山秀子、上谷幸治郎の研究が、TBS テレビ「未来の起源」で紹介された。

18) 宮部寛志、鈴木望の研究成果(論 34)が、Anal. Sci. 誌の Vol.33 の表紙論文に選ばれた。

19) 上谷幸治郎の研究成果(論 134)が、Adv. Mater. Interface の Vol.3 の中表紙の掲載論文に選ばれた。

## 15 「選定時」及び「中間評価時」に付された留意事項及び対応

### <「選定時」に付された留意事項>

企業との連携、若手研究者の育成、知財確保などにも配慮されたい。

### <「選定時」に付された留意事項への対応>

#### 企業との連携

「14 その他の研究成果等」で述べたように、本プロジェクトの推進のため、および成果の実用化を睨んで全てのグループにおいて企業との連携を図ってきた。特許出願の多くが連携企業との共願となっていることから分かるように、連携により着実に研究成果が上がっており、また成果の社会への還元が実現に向かっている。

#### 若手研究者の育成

本プロジェクトが始まる前(平成24年度)、博士後期課程在籍者は0名であったが、本プロジェクトの間に3名が博士号を取得し、現在4名が博士後期課程に在籍している。これは、本プロジェクト発足に伴う研究環境の整備、公開講演会における国内外の研究者との交流による刺激等の効果と考えられる。これらの学生は、RAとして本プロジェクトの推進に直接的に関与することにより実力を涵養するとともに着実に実績を積んでおり、若手研究者の育成に関して明らかな成果が上がっている。

#### 知財確保

「14 その他の研究成果等」で述べたように、本プロジェクトの成果について21件の特許出願が行われており、知財確保の点で着実に実績が上がっている。

### <「中間評価時」に付された留意事項>

留意事項なし。

### <「中間評価時」に付された留意事項への対応>

留意事項なし。

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

## 16 施設・装置・設備・研究費の支出状況(実績概要)

(千円)

年度・区分	支出額	内 訳						備考
		法人負担	私学助成	共同研究機関負担	受託研究等	寄付金	その他( )	
平成25年度	施設	0	0	0	0	0	0	
	装置	0	0	0	0	0	0	
	設備	101,186	33,729	67,457	0	0	0	
	研究費	33,493	17,211	16,282	0	0	0	
平成26年度	施設	0	0	0	0	0	0	
	装置	0	0	0	0	0	0	
	設備	0	0	0	0	0	0	
	研究費	32,757	18,551	14,206	0	0	0	
平成27年度	施設	0	0	0	0	0	0	
	装置	0	0	0	0	0	0	
	設備	0	0	0	0	0	0	
	研究費	33,493	19,542	13,951	0	0	0	
平成28年度	施設	0	0	0	0	0	0	
	装置	0	0	0	0	0	0	
	設備	0	0	0	0	0	0	
	研究費	33,377	24,866	8,511	0	0	0	
平成29年度	施設	0	0	0	0	0	0	
	装置	0	0	0	0	0	0	
	設備	0	0	0	0	0	0	
	研究費	32,778	22,329	10,449	0	0	0	
総額	施設	0	0	0	0	0	0	
	装置	0	0	0	0	0	0	
	設備	101,186	33,729	67,457	0	0	0	
	研究費	165,898	102,499	63,399	0	0	0	
総計	267,084	136,228	130,856	0	0	0		

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

## 17 施設・装置・設備の整備状況 (私学助成を受けたものはすべて記載してください。)

《施設》(私学助成を受けていないものも含め、使用している施設をすべて記載してください。) (千円)

施設の名 称	整備年度	研究施設面積	研究室等数	使用者数	事業経費	補助金額	補助主体
池袋キャンパス4号館 別棟	2008	76.63	1	22	11,760 (改造)	5,429	私学助成
池袋キャンパス4号館	1937	1249.09	36	22			
池袋キャンパス13号館	2002	418.09	6	22			

※ 私学助成による補助事業として行った新增築により、整備前と比較して増加した面積

0 m<sup>2</sup>

《装置・設備》(私学助成を受けていないものは、主なもののみを記載してください。)

(千円)

装置・設備の名称	整備年度	型 番	台 数	稼働時間数	事業経費	補助金額	補助主体
(研究装置)				h h h h h			
(研究設備)							
極微小結晶対応型CCD 搭載結晶X線構造解析装 置一式	20	SMART APEX II ULTRA-Cu	一式	300 h/月	35,499	23,666	私学助成
ガスクロマト質量分析計	20	GCMS-QP2010 Plus	一式	150 h/月	19,399	12,933	私学助成
全自動元素分析装置	20	varianMICRO cube	一式	50 h/月	8,709	5,806	私学助成
円二色性分散計	20	J-820	一式	10 h/月	14,879	9,919	私学助成
ダイナミクスシミュレー ションシステム	20	Blade System BL460C Cluaster	一式	700 h/月	19,600	13,066	私学助成
大規模計算サーバー	25	HPC5000系	一式	24 h/日	19,719	13,146	私学助成
超伝導マグネット	25		一式	100 h/月	17,997	11,998	私学助成
迅速精密質量分析装置	25	JMS-T100LP	一式	20 h/月	37,640	25,093	私学助成
顕微ラマン分光測定装置	25	NRS-5100	一式	60 h/月	25,830	17,220	私学助成
(情報処理関係設備)				h h h			

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

## 18 研究費の支出状況

(千円)

年 度	平成 25 年度			
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳		
		主 な 使 途	金 額	主 な 内 容
教 育 研 究 経 費 支 出				
消 耗 品 費	14,502	消耗品費、用品費	14,502	試薬、実験器具
光 熱 水 費	0		0	
通 信 運 搬 費	4	郵便費	4	書類等郵送
印 刷 製 本 費	329	印刷費	329	成果報告会要旨等印刷
旅 費 交 通 費	232	旅費交通費	232	旅費交通費
賃 借 料	0		0	
報 酬・委 託 料	1,956	その他の委託費、報酬・手数料	1,956	試験委託料、事務局委託料、特許調査
(機器備品修繕費保守料)	1,392	機器備品修繕費	1,392	機器備品修繕
(諸会費)	24	諸会費	24	学会参加登録料
(出版物費)	62	その他の図書資料費	62	その他図書資料費
計	18,501		18,501	
ア ル バ イ ト 関 係 支 出				
人件費支出 (兼務職員)	0		0	
教育研究経費支出	0		0	
計	0		0	
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)				
教育研究用機器備品	13,564	機器購入	13,564	Q400型熱機械分析装置、マルチ分取HPLC、 フォトダイオードアレイ検出器等
図 書	0		0	
計	13,564		13,564	
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出				
リサーチ・アシスタント	1,428		1,428	学内2名
ポスト・ドクター	0		0	
研究支援推進経費	0		0	
計	1,428		1,428	学内2名
年 度	平成 26 年度			
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳		
		主 な 使 途	金 額	主 な 内 容
教 育 研 究 経 費 支 出				
消 耗 品 費	9,693	消耗品費、用品費	9,693	試薬、実験器具
光 熱 水 費	0		0	
通 信 運 搬 費	4	郵便費	4	書類等郵送
印 刷 製 本 費	178	印刷費	178	成果報告書印刷
旅 費 交 通 費	1,497	旅費交通費、海外出張費	1,497	旅費交通費、海外出張費
賃 借 料	75	施設・設備等賃借料	75	装置利用料
報 酬・委 託 料	1,536	その他の委託費、報酬・手数料	1,536	外部評価委員報酬、ホームページ更新料、講演会講師報酬
(機器備品修繕費)	2,247	機器備品修繕費	2,247	機器備品修繕
(出版物費)	322	その他図書資料費	322	データベース、関連図書
(その他)	83	諸会費、雑費	83	学会参加費、論文掲載料
計	15,635		15,635	
ア ル バ イ ト 関 係 支 出				
人件費支出 (兼務職員)	885	アルバイト	885	時給1,000円 年間時間数707時間 交通費 実人数5人
教育研究経費支出	0		0	
計	885		885	
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)				
教育研究用機器備品	13,087	機器購入	13,087	キャピラリー電気泳動システム、水蒸気雰囲気対 応差動型示差熱天秤、紫外・可視分光用クライ オスタット等
図 書	0		0	
計	13,087		13,087	
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出				
リサーチ・アシスタント	3,150		3,150	学内4名
ポスト・ドクター	0		0	
研究支援推進経費	0		0	
計	3,150		3,150	学内4名

		法人番号		131095	
		プロジェクト番号		S1311027	
年 度	平成 27 年度				
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳			
		主 な 使 途	金 額	主 な 内 容	
教 育 研 究 経 費 支 出					
消 耗 品 費	1,454	消耗品費、用品費	1,454	試薬、実験器具、セキュリティコントローラー	
光 熱 水 費	0		0		
通 信 運 搬 費	0		0		
印 刷 製 本 費	61	印刷費	61	ニュースレター印刷	
旅 費 交 通 費	295	旅費交通費、海外出張費	295	旅費交通費、海外出張費	
賃 借 料	0		0		
報 酬 ・ 委 託 料	228	その他の委託費、報酬・手数料	228	講演会講師謝礼、セキュリティコントローラーインストール	
(機 器 備 品 修 繕 費)	2,811	機器備品修繕費	2,811	機器備品修繕	
(出 版 物 費)	410	その他図書資料費	410	データベース	
(そ の 他)	0		0		
計	5,259		5,259		
ア ル バ イ ト 関 係 支 出					
人 件 費 支 出 (兼 務 職 員)	753	アルバイト	753	時給1,000円 年間時間数710時間 交通費 実人数3名	
教 育 研 究 経 費 支 出	0		0		
計	753		753		
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)					
教 育 研 究 用 機 器 備 品	21,654	機器購入	21,654	CMOS検出器、高輝度X線発生源、 空間データ収集処理システム等	
図 書	0		0		
計	21,654		21,654		
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出					
リサーチ・アシスタント	5,827		5,827	学内6名	
ポスト・ドクター	0		0		
研究支援推進経費	0		0		
計	5,827		5,827	学内6名	
年 度	平成 28 年度				
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳			
		主 な 使 途	金 額	主 な 内 容	
教 育 研 究 経 費 支 出					
消 耗 品 費	12,751	消耗品費、用品費	12,751	試薬、実験器具、ノートPC	
光 熱 水 費	0		0		
通 信 運 搬 費	0		0		
印 刷 製 本 費	128	印刷費	128	研究成果報告書印刷	
旅 費 交 通 費	501	旅費交通費、海外出張費	501	旅費交通費、海外出張費	
賃 借 料	0		0		
報 酬 ・ 委 託 料	673	その他の委託費、報酬・手数料	673	講演会講師謝礼	
(機 器 備 品 修 繕 費)	2,730	機器備品修繕費	2,730	機器備品修繕	
(出 版 物 費)	510	その他図書資料費	510	データベース、関連図書	
(諸 会 費)	136	諸会費	136	諸会費	
計	17,429		17,429		
ア ル バ イ ト 関 係 支 出					
人 件 費 支 出 (兼 務 職 員)	766	アルバイト	766	時給1,000円 年間時間数651時間 交通費 実人数2名	
教 育 研 究 経 費 支 出	0		0		
計	766		766		
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)					
教 育 研 究 用 機 器 備 品	1,692	機器購入	1,692	アクリル真空グローブボックス、1回転反射ATR ベースキット、ガントリーステージ	
図 書	0		0		
計	1,692		1,692		
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出					
リサーチ・アシスタント	3,764		3,764	学内4名	
ポスト・ドクター	9,726		9,726	学内2名	
研究支援推進経費	0		0		
計	13,490		13,490	学内6名	

法人番号	131095
プロジェクト番号	S1311027

年 度	平成 29 年度		
小 科 目	支 出 額	積 算 内 訳	
		主 な 使 途	金 額
教 育 研 究 経 費 支 出			
消 耗 品 費	13,145	消耗品費、用品費	13,145
光 熱 水 費	0		0
通 信 運 搬 費	0		0
印 刷 製 本 費	184	印刷費	184
旅 費 交 通 費	1,065	旅費交通費、海外出張費	1,065
賃 借 料	102	施設・設備賃借料	102
報 酬・委 託 料	1,066	その他の委託費、報酬・手数料	1,066
(機 器 備 品 修 繕 費)	1,627	機器備品修繕費保守料	1,627
(出 版 物 費)	432	その他図書資料費	432
(雑 費)	203	雑費	203
(諸 会 費)	156	諸会費	156
計	17,980		17,980
ア ル バ イ ト 関 係 支 出			
人 件 費 支 出 (兼 務 職 員)	422	アルバイト	422
教 育 研 究 経 費 支 出	0		0
計	422		422
設 備 関 係 支 出(1個又は1組の価格が500万円未満のもの)			
教 育 研 究 用 機 器 備 品	334	機器購入	334
図 書	0		0
計	334		334
研 究 ス タ ッ フ 関 係 支 出			
リサーチ・アシスタント	4,906		4,906
ポスト・ドクター	9,136		9,136
研究支援推進経費	0		0
計	14,042		14,042

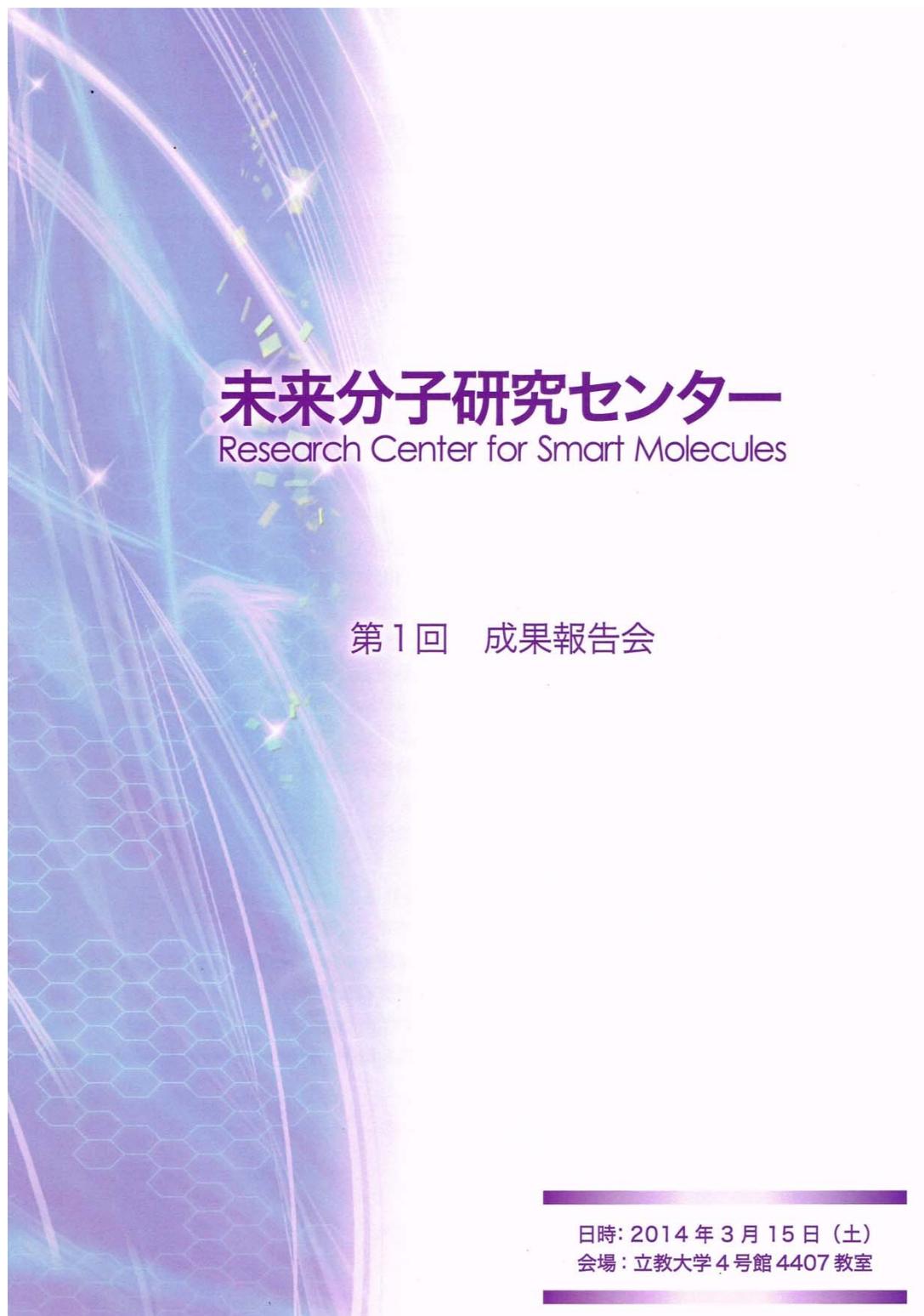
—別紙資料一覧—

- 1) 平成 25 年度 成果報告会 冊子
- 2) 平成 25 年度 成果報告書 冊子
- 3) ニュースレターNo.1 冊子
- 4) 永瀬先生講演会、外部評価委員会
- 5) 平成 25・26 年度 成果報告書 冊子
- 6) ニュースレターNo.2 冊子
- 7) 入江正浩 Potal Medal 受賞
- 8) 学会発表 No.738 優秀ポスター賞(2014/10)
- 9) 学会発表 No.739 優秀ポスター賞(2014/10)
- 10) 2014 年 4 月 11 日講演会
- 11) 2014 年 5 月 23 日講演会
- 12) 2014 年 9 月 10 日講演会
- 13) 2014 年 11 月 20 日講演会
- 14) 2014 年 11 月 22 日講演会
- 15) 2014 年 12 月 18 日講演会
- 16) 望月祐志 第 38 回 (2015 年春季)応用物理学会講演奨励賞
- 17) 和田亨 2014 年 12 月 17 日 電気新聞
- 18) 2015 年 12 月 5 日 公開講演会
- 19) ニュースレターNo.3 冊子
- 20) 平成 27 年度 成果報告書 冊子
- 21) 2016 年 6 月 23 日 講演会
- 22) 2016 年 7 月 6 日 講演会
- 23) ニュースレターNo.4 冊子
- 24) 2016 年 11 月 12 日 公開講演会
- 25) 2017 年 1 月 19 日 講演会
- 26) 2017 年 3 月 11 日 成果報告会 冊子
- 27) 平成 28 年度 成果報告書 冊子
- 28) 2017 年 8 月 31 日 講演会
- 29) 2017 年 10 月 14 日 国際シンポジウム要旨冊子
- 30) ニュースレターNo.5 冊子
- 31) 2017 年 11 月 25 日 公開講演会
- 32) 2017 年 11 月 29 日 講演会
- 33) 外部評価用・成果報告書
- 34) 2018 年 3 月 10 日 成果報告会
- 35) 森本正和 光化学協会 第 17 回光化学協会奨励賞
- 36) 宮部寛志 Analytical Science 誌 Hot Article Award

37) 上谷幸治郎 公益社団法人新化学技術推進協会 第6回新化学技術研究奨励賞

38) 上谷幸治郎 平成29年度繊維学会年次大会 平成29年度繊維学会若手優秀発表賞

(別紙資料 1)平成 25 年度 成果報告会  
冊子表紙



## 第 1 回 成果報告会

2014 年 3 月 15 日 (土)

4 号館 4407 教室

13 : 00 センター長挨拶

成果報告 (発表 7 分、質疑応答 2 分)

13 : 05~13:35 1 班 : 分子の機能性の理論的解析と分子設計

望月 祐志 計算化学手法の開発と先導的応用

常盤 広明 未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発

山中 正浩 理論設計支援による機能分子触媒の開発

13 : 35~14:25 2 班 : 反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発

ホーン・エルンスト Self-assembling complexes, their properties, and catalysis reactions

黒田 智明 自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性

和田 亨 論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発

宮部 寛志 流通式分離系を利用する化学特性解析

箕浦 真生 高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発

14 : 40~15:30 3 班 : 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発

枝元 一之 表面反応を利用した高機能触媒の開発

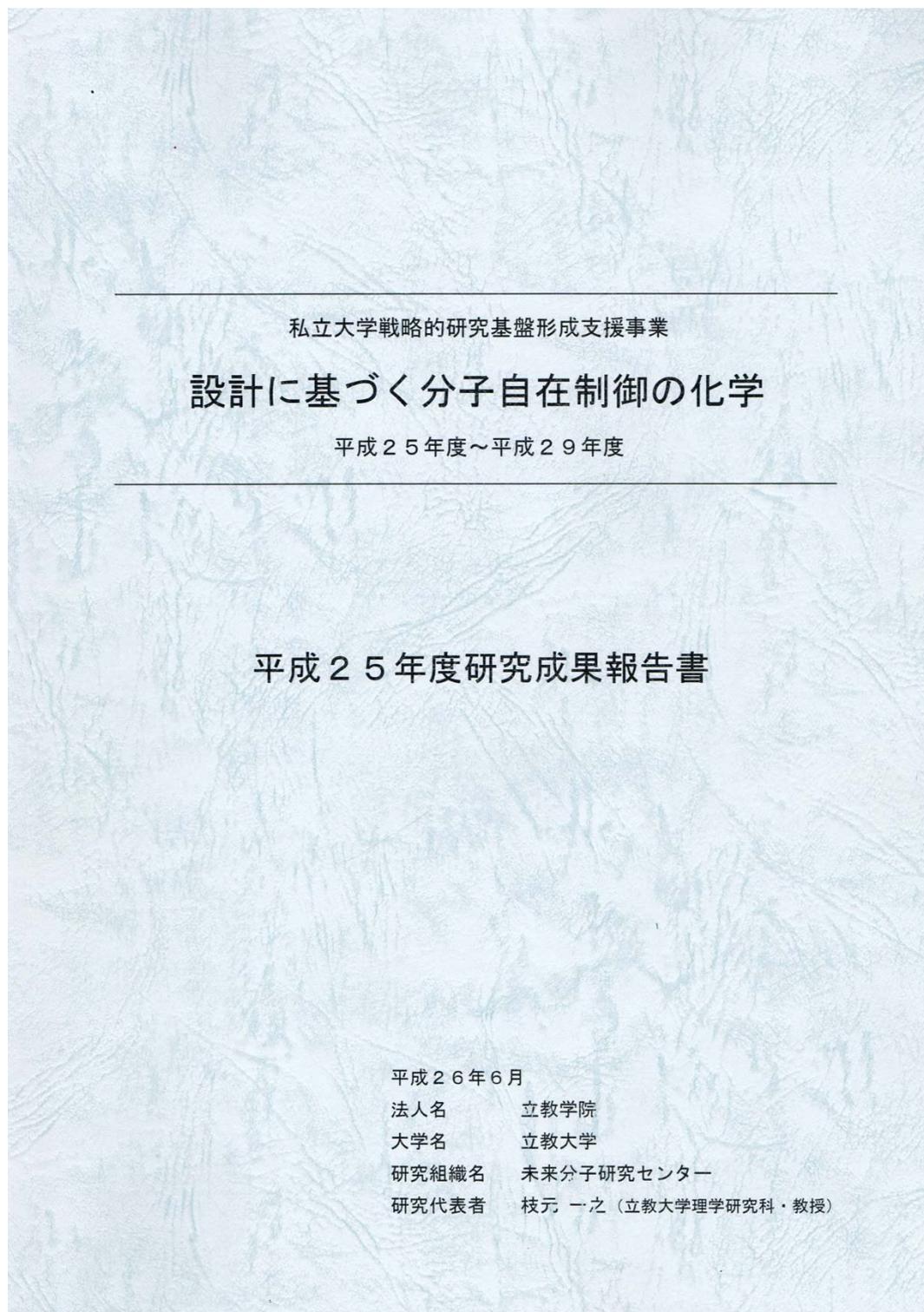
入江 正浩 光スイッチ機能を持つ蛍光分子の設計と合成

松下 信之 外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価

森本 正和 結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製

大山 秀子 高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明

(別紙資料 2)平成 25 年度 成果報告書  
冊子表紙



(別紙資料 2)平成 25 年度 成果報告書  
冊子目次

目 次

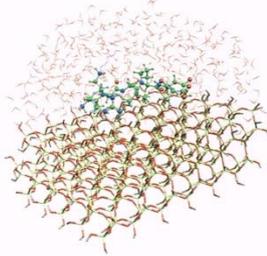
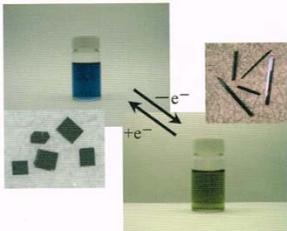
1. 研究センターの概要	1
2. 研究センターの設定目的	3
3. 研究センターの研究組織	4
4. 研究センター内の研究の年度毎の進展状況	5
5. 研究成果公表の状況	18



平成 25 年度～平成 29 年度  
私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

# 未来分子研究センター ニュースレター

## Research Center for Smart Molecules



**News Letter No.1**  
**班員名簿・研究概要**

学校法人名	学校法人立教学院
大学名	立教大学
研究組織名	未来分子研究センター
研究代表者	枝元一之

## CONTENTS

### 未来分子研究センターとは

立教大学 未来分子研究センター長 枝元 一之 .....	1
---------------------------------	---

### 1班「分子の機能性の理論的解析と分子設計」(設計グループ)

計算化学手法の開発と先導的応用 担当：望月 祐志 .....	2
未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発 担当：常盤 広明 .....	3
理論設計支援による機能分子触媒の開発 担当：山中 正浩 .....	4

### 2班「反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発」(反応制御グループ)

Self-assembling complexes, their properties, and catalysis reactions 担当：Ernst Horn .....	5
自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性 担当：黒田 智明 .....	6
論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発 担当：和田 亨 .....	7
流通式分離系を利用する化学特性解析 担当：宮部 寛志 .....	8
高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発 担当：箕浦 真生 .....	9

### 3班「物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発」(物性・機能制御グループ)

表面反応を利用した高機能触媒の開発 担当：枝元 一之 .....	10
単結晶金電極への機能性化合物の吸着 担当：池澤 泰成 .....	11
光スイッチ機能を持つ蛍光分子の設計と合成 担当：入江 正浩 .....	12
外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価 担当：松下 信之 .....	13
結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製 担当：森本 正和 .....	14
高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明 担当：大山 秀子 .....	15
機能分子を配位または内包した金属 - 酸化物複合ナノクラスターの創成と評価 担当：掛札 洋平 .....	16

未来分子研究センター 公開講演会

# 金属を内包したフラーレンの構造と特性： 理論計算と実験

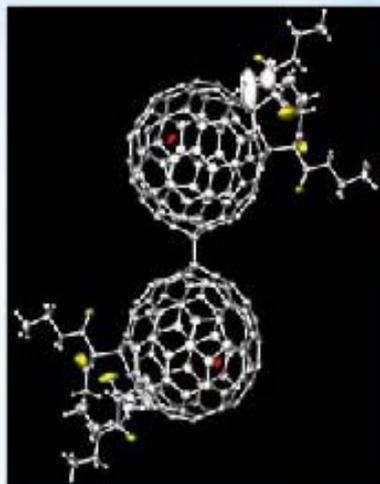
講演者：永瀬 茂 先生

(京都大学・福井謙一記念研究センター・  
シニアリサーチフェロー)

日時：3月14日(土)

13:20~14:20

場所：立教大学 池袋キャンパス  
10号館 X204教室



1985年に発見された最も対称性の高い分子の一つである $C_{60}$ を代表とするフラーレンは、1990年のアーク放電法による大量合成法と有機溶媒による抽出法の開発を契機として、様々な分野において研究が展開されている。

球状構造をもつフラーレンの内部空間に遷移金属を内包することにより、新しい反応や高い電子移動能などが生まれるが、その基礎研究に重要な、構造決定を中心とした理論計算と実験のインタープレイを紹介する。

連絡先：枝元 (edamoto@rikkyo.ac.jp)

- \* 13:15 センター長挨拶
- \* 13:20 - 14:20 永瀬先生講演
- \* 14:20 - 14:40 休憩
- \* 14:40 - 14:50 概要説明(センター長)
- \* 14:50 - 15:10 第1班説明
- \* 15:10 - 15:30 第2班説明
- \* 15:30 - 15:50 第3班説明
- \* 15:50 外部評価委員の講評

---

私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

## 設計に基づく分子自在制御の化学

平成 25 年度～平成 29 年度

---

### 平成 25 年度・平成 26 年度研究成果報告書

平成 27 年 2 月

法人名 立教学院

大学名 立教大学

研究組織名 未来分子研究センター

研究代表者 枝元 一之 (立教大学理学研究科・教授)

(別紙資料 5)平成 25・26 年度 成果報告書  
冊子目次

目 次

1. 研究の概要	1
2. 研究の体制	3
3. 各班の研究の進展状況	5
4. 班員の研究の進展状況	9
5. 研究成果公表の状況	25

(別紙資料 6) ニュースレターNo.2

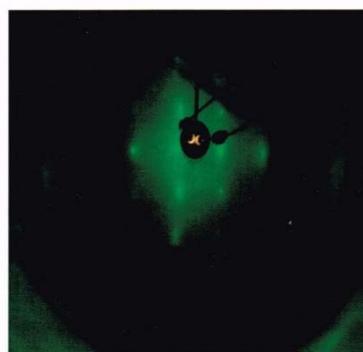
冊子表紙

平成 25 年度～平成 29 年度

私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

# 未来分子研究センター ニュースレター

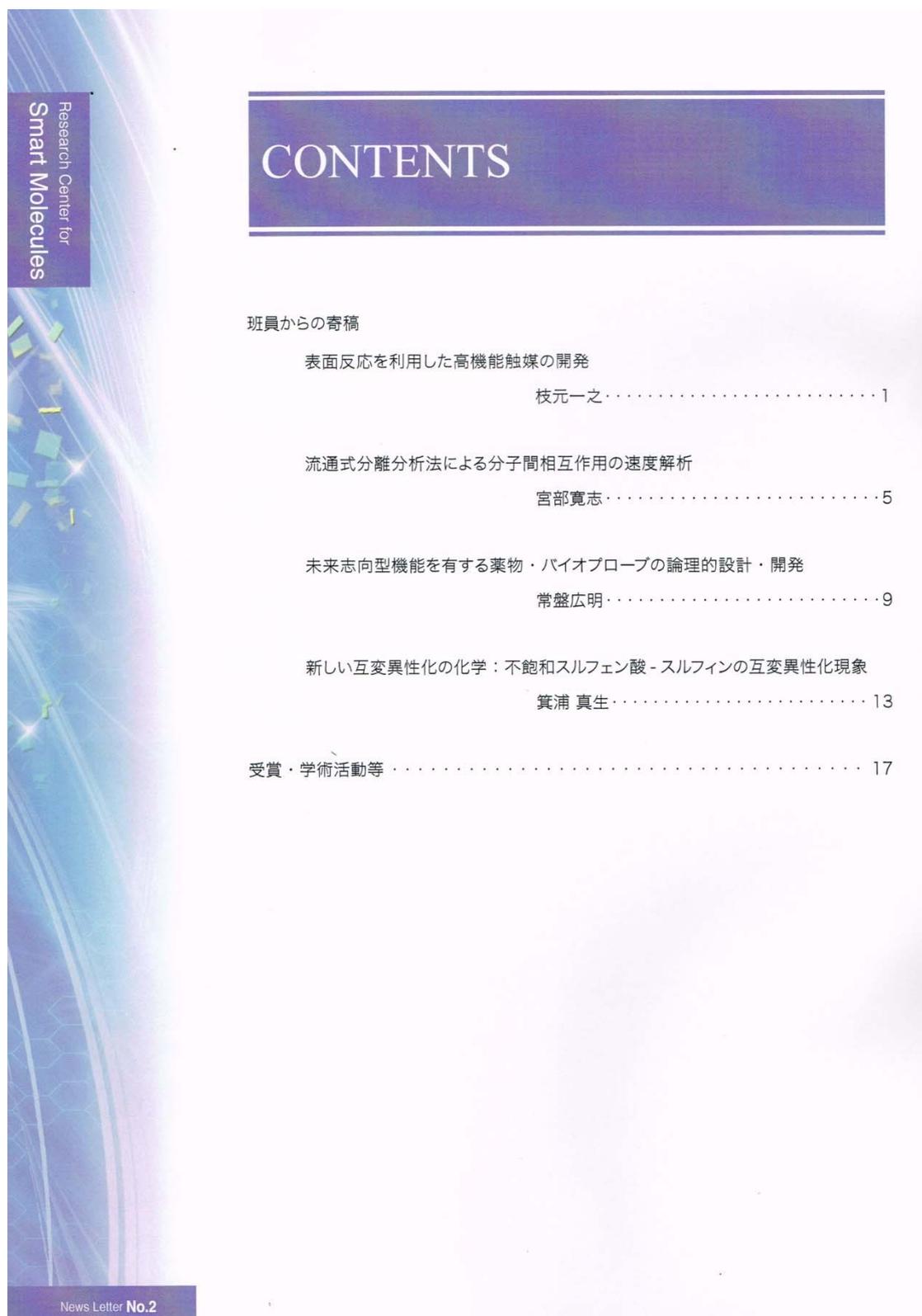
## Research Center for Smart Molecules



News Letter **No.2**

2014 年 11 月

学校法人名 学校法人立教学院  
大学名 立教大学  
研究組織名 未来分子研究センター  
研究代表者 枝元一之



Research Center for  
Smart Molecules

# CONTENTS

班員からの寄稿

表面反応を利用した高機能触媒の開発  
枝元一之…………… 1

流通式分離分析法による分子間相互作用の速度解析  
宮部寛志…………… 5

未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発  
常盤広明…………… 9

新しい互変異性化の化学：不飽和スルフェン酸 - スルフィンの互変異性化現象  
箕浦 真生…………… 13

受賞・学術活動等…………… 17

News Letter No.2  
2014.11

## (別紙資料 7) The Porter Medal 受賞

入江正浩 2014年4月

The Porter Medal (欧州光化学協会, 米州光化学会, アジア・オセアニア光化学協会)  
ホームページ



The Porter Medal  
INTER-AMERICAN  
PHOTOCHEMICAL SOCIETY

Home  
Previous Winners  
Nomination Process

1988 Lord Porter (George Porter), UK (Founding medal)  
1990 Michael Kasha, USA  
1992 Kinichi Honda, Japan  
1994 Nicholas J. Turro, USA  
1995 J.C. "Tito" Scalano, Canada (Special Medal for London ICP)  
1996 Noboru Mataga, Japan  
1998 Frans de Schryver, Belgium  
2000 Vincenzo Balzani, Italy  
2002 Josef Michl, USA  
2004 Graham R. Fleming, USA  
2008 Howard E. Zimmerman, USA and Hiroshi Masuhara, Japan (Two medals awarded)  
2008 Michael R. Wasielewski, USA  
2010 David Phillips, UK  
2012 Thomas J. Meyer, USA  
2014 Masahiro Irie, Japan



### 受賞時の写真



XXVth IUPAC Symposium on Photochemistry  
(Bordeaux)

## 立教大学ホームページ

### 未来分子研究センターの入江正浩副センター長がポーターメダルを受賞

2014.05.29

在学生向けニュース, 教職員向けニュース

未来分子研究センターの入江正浩副センター長がポーターメダルを受賞しました。

ポーターメダルは光化学分野に多大な貢献をした科学者に対し隔年で授与されるものです。名称は、1967年にノーベル化学賞を受賞した光化学者、ジョージ・ポーター卿にちなんでいます。受賞者は、ヨーロッパ光化学協会、アメリカ光化学協会、アジア光化学協会の推薦により選出されます。

#### 入江正浩 未来分子研究センター副センター長について

##### 【略歴】

1968年京都大学大学院工学研究科高分子化学専攻博士課程中退、同年12月北海道大学工学部助手、その後、大阪大学産業科学研究所助教授、九州大学機能物質科学研究所教授、九州大学大学院工学研究院教授。

2007年立教大学理学部教授、特任教授を経て、2014年4月より立教大学未来分子研究センター客員研究員。

この間、2008年立教大学未来分子研究センターを立ち上げ、2008年～2012年まで未来分子研究センター長、2013年より同副センター長。現在に至る。

##### 【研究テーマ】

光に応答する分子と結晶に関する研究

##### 【主な受賞歴】

高分子学会賞 (1988年)、光化学協会賞 (1993年)、ダ・ヴィンチ賞 (1995年)、日本化学会賞 (2005年)、向井賞 (2007年)、紫綬褒章 (2007年)、テオドル・フェルスター賞 (2007年)。

・立教大学未来分子研究センターのサイトはこちら  
・入江研究室のサイトはこちら





# 理学部未来分子研究センター—講演会

2014年4月11日 (金)

16 : 40-18 : 00 14号館 D402教室

Curt Wentrup 教授

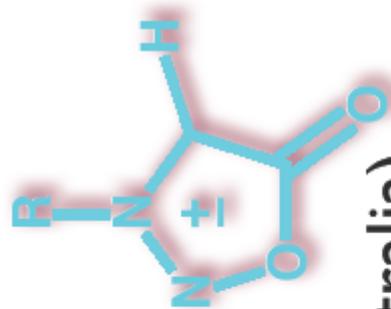
The University of Queensland (Australia)

Title: Sydnones, Nitrile imines, Carbodiimides  
and 1H-Diazirenes

有機反応機構、活性化学種および単寿命種の研究で世界的に著名なCurt Wentrup教授が国内（広島）で開催される国際会議SRIMUM2014に招待講演者として来日・滞在されます。

この機会に、未来分子研究センターで推進している「分子自在制御」の観点で、立教大学において講演をお願い致しました。理学部化学科の教員・学生の方々の参加をお待ちしております。

理学部化学科 箕浦真生  
minoura@rikkyo.ac.jp



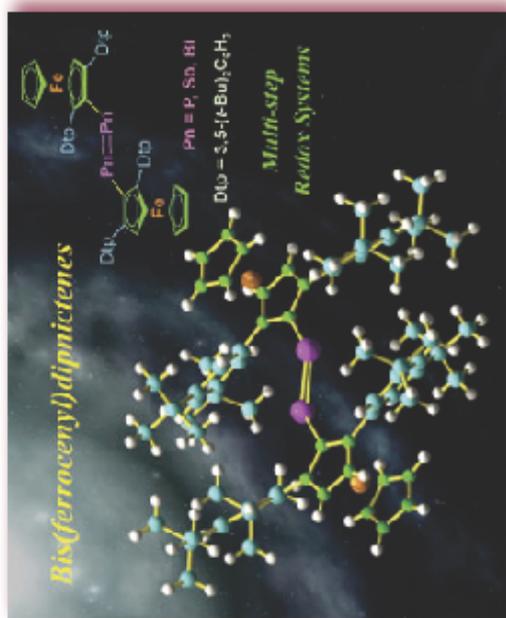
# 理学部未来分子研究センター講演会

2014年5月23日 (金)

16:40-18:00 4号館 4340教室

京都大学化学研究所 笹森貴裕先生

## 「新規な高周期15族元素低配位化合物の合成と性質」



有機典型元素・遷移金属元素化学の研究で著名な京都大学化学研究所の笹森貴裕教授が「有機金属化学特論」の集中講義で来校されます。笹森先生は、平成23年度文部科学大臣表彰若手科学者賞をご受賞されるなど、新進気鋭の若手研究者です。

この機会に、未来分子研究センターで推進している「分子自在制御」の観点で、立教大学において講演をお願い致します。

理学部の教員・学生の方々の参加をお待ちしております。

理学部化学科 箕浦真生  
minoura@rikkyo.ac.jp

## 講演会のお知らせ

### “Recent Developments in Photoresponsive Molecules and Nanoparticles”

**Prof. Neil Robin Branda  
(Simon Fraser University)**

**2014年9月10日(水) 16:00～  
4号館 4408教室**

Prof. Brandaは、カナダのSimon Fraser Universityの教授であり、フォトクロミック分子などの機能分子材料の研究者として有名です。今回、来日されるのを機会に講演をお願いいたしました。講演会へのご参加をよろしくお願いいたします。

未来分子研究センター主催 問い合わせ先: 入江 正浩

未来分子研究センター 講演会

# 「Anion-Recognition as a Powerful Tool for Asymmetric Catalysis」

講師: Prof. Daniel Seidel (Rutgers University)

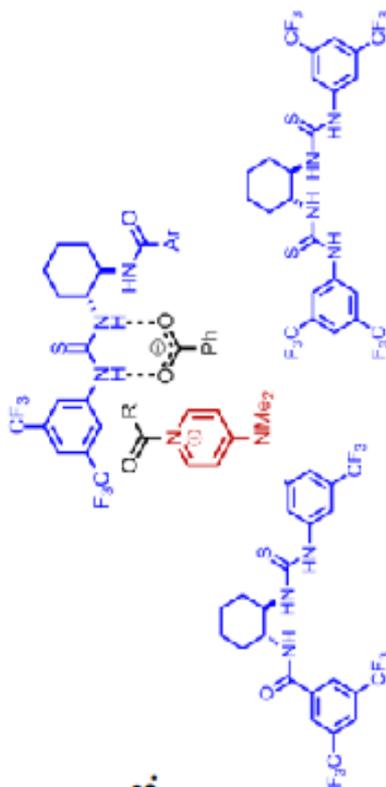
日時: 11月20日 16:40~17:40

場所: 4号館4404教室



Seidel教授は、Rutgers大学にて有機分子触媒を用いた不斉合成から、アミン化合物のC-H結合活性化に基づく官能基化などを活発に研究されている若手研究者です。

- Synlett 2014, 25, 783–794.  
Org. Lett. 2014, 16, 1012–1015.  
Angew. Chem. Int. Ed. 2013, 52, 14084–14088.  
Chem. Commun. 2012, 48, 10853–10855.  
J. Am. Chem. Soc. 2010, 132, 13624.  
J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 17060–17061.]



担当: 山中 (myamanak@rikkyo.ac.jp)



# 未来分子研究センター 立教大学理学部 公開講演会

Research Center  
for Smart Molecules  
College of Science, Rikkyo University

## 2014

日時：11月22日(土)

午後1:40～午後4:30

会場：立教大学(池袋キャンパス)5号館5121教室

### 玉尾皓平先生特別講演

「元素科学と共に歩んだ半世紀」:

元素科学を基盤とする有機合成反応の開発と応用

玉尾皓平先生：理化学研究所 研究顧問 グローバル研究  
クラスター長、前日本化学会会長、  
立教大学連携客員教授

#### 講演概要

- ・新概念「元素科学」提案と「元素戦略」への展開
- ・ニッケル触媒クロスカップリング反応
- ・有機ケイ素化学の有機合成への応用
- ・有機ケイ素化合物の機能性物質科学への応用
- ・汎用性立体保潔基Rindの導入と新展開
- ・若い人たちに伝えたいこと



- ・未来分子研究センター「設計に基づく分子自在制御の化学」プロジェクト、一般研究発表  
立教大学理学部化学科教授：枝元一之、宮部寛志、常盤広明、箕浦真生(各20分)

参加無料です。皆様のご来場をお待ちしております。



立教大学理学部  
未来分子研究センター  
文部科学省戦略的研究基盤形成支援事業  
高度な機能を有する未来分子材料の創製  
「設計に基づく分子自在制御の化学」

センター長：枝元一之  
副センター長：入江正浩

問合せ先：立教大学理学部  
〒171-8501東京都豊島区西池袋3-34-1  
TEL/FAX: 03-3985-4584  
E-mail: hightech@rikkyo.ac.jp  
池袋駅西口より徒歩10分、  
西口地下道C3出口より5分  
詳細はWebをご覧ください：  
<http://www2.rikkyo.ac.jp/web/mirai/>

# 未来分子研究センター 講演会 計算化学手法を用いたイオン液体の研究： イオン間相互作用とイオンの輸送物性

講演者：都築誠二先生

産業技術総合研究所

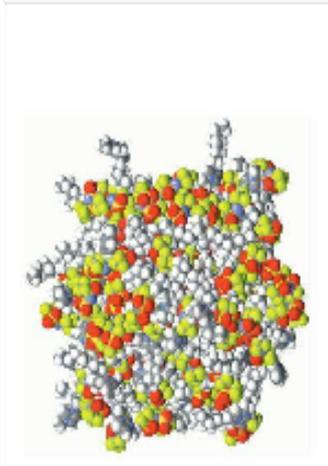
ナノシステム研究部門

ソフトウェアモデリンググループ

上級主任研究員

日時：12月18日(木)16:40~18:10

場所：立教大学 4号館 4339教室



分子動力学法で計算したイオン液体の構造

イオン液体はイオンだけからなる液体だが、イオン伝導性、難揮発性、難燃性、良好な電気化学的安定性などの性質を持つことからリチウム系二次電池の安全性を材料面から支える新しい電解質として、活発な研究が進められている。イオン液体は分子性の液体と比べて粘度が大きく、電解質に利用するには粘度を下げる必要がある。カチオンとアニオンの組み合わせにより液体物性が変化するからイオン液体はデザイナー液体とも呼ばれており、適切なイオンを組み合わせればリチウム系二次電池に適した電解質を合成できる可能性がある。計算化学手法でイオン液体の物性を予測できれば、電解質に適したイオン液体を効率的に開発できる可能性がある。本講演では ab initio 分子軌道法を用いたイオン間相互作用の解析、古典分子動力学法を用いたイオン液体中のイオンの拡散のシミュレーション、イオンの拡散を支配する要因の研究について紹介する。また、リチウム系二次電池に用いるイオン液体電解質の研究における、計算化学への期待についても触れる。

担当：望月(fullmoon@rikkyo.ac.jp)

(別紙資料 16) 第 38 回 (2015 年春季) 応用物理学会講演奨励賞

望月祐志 2015 年 3 月 13 日

## 第38回 (2015年春季) 応用物理学会講演奨励賞受賞者紹介



応用物理学会講演会企画運営委員長 民谷栄一

応用物理学会講演奨励賞は、春季及び秋季の学術講演会において、応用物理学の視点から極めて価値のある一般講演論文を発表した若手会員に授与し、これを称えることを目的としています。この度、2015年応用物理学会春季学術講演会で発表された3,535件の一般講演論文及び60件のシンポジウム講演のうち、予め申請のあった750件の口頭、ポスター講演の発表者の中から、厳正な審査の結果、以下の36名の方々が選出されました。誠におめでとうございます。

有機分子・バイオエレクトロニクス		
雨宮 裕希 (山梨大院)	13a-D4-3	1000 S/cmを超えるPEDOT/PSSの合成と電気特性 (山梨大院：堀井 辰衛, 奥崎 秀典)
伊澤 誠一郎 (東大院工/理研 CEMS)	13a-D15-1	ドナー/アクセプター界面第一層のエネルギー準位が有機薄膜太陽電池性能に与える影響 (東大院工 <sup>1</sup> , 理研CEMS <sup>2</sup> , さきがけ <sup>3</sup> : 中野 恭兵 <sup>2</sup> , 鈴木 かおり <sup>2</sup> , 橋本 和仁 <sup>1</sup> , 但馬 敬介 <sup>2,3</sup> )
加藤 幸一郎 (みずほ情報総研)	13p-D5-7	アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #2 (日大松戸歯 <sup>1</sup> , 立教大理 <sup>2</sup> , 東大生産研 <sup>3</sup> : 福澤 薫 <sup>1,3</sup> , 望月 祐志 <sup>2,3</sup> )
金城 拓海 (千葉大院融合)	13p-D14-4	超高感度負イオン光電子分光による極性有機薄膜の空準位の直接観察 (千葉大院融合 <sup>1</sup> , 千葉大工学部 <sup>2</sup> , 千葉大先進 <sup>3</sup> : Lim Hyunsoo <sup>1</sup> , 大澤 祐介 <sup>1</sup> , 佐藤 友哉 <sup>1</sup> , 中光 栄仁 <sup>1</sup> , Thanh Luan Nguyen <sup>1</sup> , 浦上 裕希 <sup>1</sup> , 山崎 純暉 <sup>2</sup> , 中山 泰生 <sup>1</sup> , 石井 久夫 <sup>1,3</sup> )
田中 秀 (阪大院工)	14a-D14-1	透過電子顕微鏡を用いたブルー相液晶の格子構造観察 (阪大院工 <sup>1</sup> , 阪大電顕センター <sup>2</sup> : 吉田 浩之 <sup>1</sup> , 栗原 隆亮 <sup>2</sup> , 西 竜治 <sup>2</sup> , 尾崎 雅則 <sup>1</sup> )

深刻なエネルギー・環境問題に直面するなか、究極のエネルギー循環システムを構築する...

ム。この原理を電気エネルギーに活用することができないか。立教大学理学部化学科の和田亨...

全国理系 学び舎 紀行

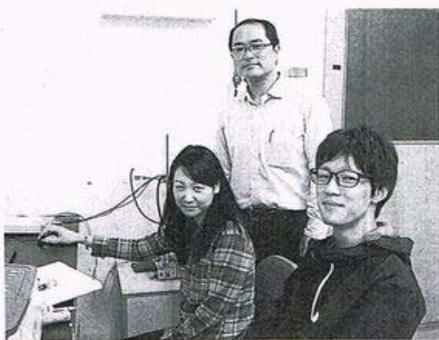
呼吸で獲得しているエネルギーの元は太陽光エネルギー。光合成は太陽光を化学物質(化学エネルギー)

東京都立教大学理学部化学科

「光合成」の原理を応用

科学を学ぶ 技術を開く

循環システム構築へ



循環型発電システムにつながる研究成果の発掘に取り組むメンバー

に交換する過程であり、呼吸のたき増しにより、燃料吸は化学物質からエネルギーが繰り上、フル稼働の火力を取り出す過程にあたる。

CO2、グルコース、酸、水を決して使い捨てにしている。エネルギー危機なることはない。和田准教授ともいえる状況のなか、自

授は、「この原理について化学物質は形を変えながら成」と「呼吸」の原理は、も、あなかもエネルギーを運用器のような役割を果たし、循環している」と説明する。自然界では効率の良いエネルギー循環システムが構築されているというわけだ。

○貯蔵も可能に 国内では、原子力発電所の再稼働が進まず、火力発電は、国内では研究も盛ん

に交換する過程であり、呼吸のたき増しにより、燃料吸は化学物質からエネルギーが繰り上、フル稼働の火力を取り出す過程にあたる。

CO2、グルコース、酸、水を決して使い捨てにしている。エネルギー危機なることはない。和田准教授ともいえる状況のなか、自

授は、「この原理について化学物質は形を変えながら成」と「呼吸」の原理は、も、あなかもエネルギーを運用器のような役割を果たし、循環している」と説明する。自然界では効率の良いエネルギー循環システムが構築されているというわけだ。

○可能性を追求 和田准教授の目指す研究の最終形態は「太陽光エネルギーでCO2と水からメタノールと酸素をつくり出し、メタノールと酸素を燃料として燃料電池で発電すること。ただ、そのため

だが、電気エネルギーを化学エネルギーに変換するためには、化学的な反応を引き起こす触媒の役割を果たす触媒を見つける必要がある。触媒とは、原子が結合した化合物を指す。

に行われている。電気は蓄えられない。電気は蓄えられない。電気は蓄えられない。電気は蓄えられない。

「水から酸素発生」「Cからメタノール合成」O2からメタノール合成「酸素還元」を電気化学的に行う必要がある。

現状では、水に太陽光を用いて水を分解する可能性もある」と和田准教授は前向き。「だから化学は面白く奥が深い」と、小さな研究室ならではの可能性追求に挑戦し続けている。ほかの研究も

には、克服すべき研究課題がいくつもある。「水から酸素発生」「Cからメタノール合成」O2からメタノール合成「酸素還元」を電気化学的に行う必要がある。

研究段階では技術的に可能であっても、コストや効率で劣り、実用化への道筋は遠い。

小さい研究室ほど研究がやりやすい。既に存在する触媒の改良や反応の詳細を説明することも大切な研究だが、それでは大きな研究室に勝つことが大事だ。研究過程で偶然、別の物質が見つかることもある。常にチャンスを見逃さないためにも、変化に気づく注意力が大切だ。常に研究のことを考え続け、準備することを怠らないでほしい。



和田 准教授



◆学部概要

教育の特徴は、きめ細かく個性を尊重した少人数制と実験を重視した教育。講義科目では物質の構造、特性と反応を理解するための化学の基本を学ぶ。少人数制で形式で行われる化学セミナーでは、テーマを自ら設定し、調査し、結果を発表することで自ら考える力、発表する能力を養う。就職先は、化学、医薬品、情報産業など。



# 未来分子研究センター 立教大学理学部

Research Center  
for Smart Molecules

## 公開講演会

# 2015

College of Science, Rikkyo University

日時：12月5日（土）

午後1：30～午後4：40

会場：立教大学（池袋キャンパス）11号館A301教室

### 時任宣博先生特別講演

高周期典型元素を含む新規な $\pi$ 電子系の創出とその構造・性質：

「重い芳香族」化合物の最近の展開

時任宣博先生：京都大学化学研究所 所長  
日本化学会欧文誌編集委員長

#### 講演概要

- ・ベンゼンの炭素をケイ素、ゲルマニウム、スズに置き換えた「重い芳香族」化合物の合成と性質
- ・ナフタレン、アントラセン、フェナントレンへの高周期14族元素の導入
- ・高周期元素を含む $\pi$ 結合の化学



- ・未来分子研究センター「設計に基づく分子自在制御の化学」プロジェクト、一般研究発表  
立教大学理学部化学科教員：黒田智明、山中正浩、三井正明、上谷幸治郎（各20分）

参加無料です。皆様のご来場をお待ちしております。



立教大学理学部  
未来分子研究センター  
文部科学省戦略的研究基盤形成支援事業  
高度な機能を有する未来分子材料の創製  
「設計に基づく分子自在制御の化学」

センター長：枝元一之  
副センター長：入江正浩

問合せ先：立教大学理学部  
〒171-8501東京都豊島区西池袋3-34-1  
TEL/FAX: 03-3985-4584  
E-mail: hightech@rikkyo.ac.jp  
池袋駅西口より徒歩10分、  
西口地下道C3出口より5分  
詳細はWebをご覧ください：  
<http://www2.rikkyo.ac.jp/web/mirai/>

(別紙資料 19)ニュースレターNo.3

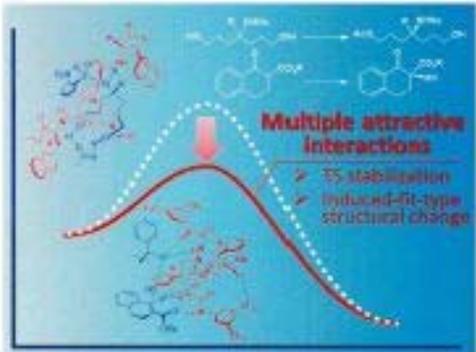
冊子表紙



平成 25 年度～平成 29 年度  
私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

# 未来分子研究センター ニュースレター

## Research Center for Smart Molecules



News Letter **No.3**

2015 年 12 月

学校法人名 学校法人立教学院  
大学名 立教大学  
研究組織名 未来分子研究センター  
研究代表者 枝元一之



Research Center for  
**Smart Molecules**

# CONTENTS

班員からの寄稿

自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性  
黒田 智明 ..... 1

理論設計支援による機能分子触媒の開発  
山中 正浩 ..... 5

時空間分解顕微計測による光電変換ダイナミクスの解明  
三井 正明 ..... 9

天然高分子を用いた機能材料の創製  
上谷 幸治郎 ..... 13

受賞・学術報告等 ..... 17

News Letter No.3  
2015. 12

---

私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

## 設計に基づく分子自在制御の化学

平成 25 年度～平成 29 年度

---

### 平成 27 年度研究成果報告書

平成 28 年 6 月

法人名 立教学院

大学名 立教大学

研究組織名 未来分子研究センター

研究代表者 枝元 一之 (立教大学理学研究科・教授)

(別紙資料 20)平成 27 年度 成果報告書  
冊子目次

目 次

1. 研究センターの概要	1
2. 研究センターの設定目的	2
3. 研究センターの研究組織	3
4. 班員の研究の進展状況	5
5. 研究成果公表の状況	19

## 未来分子研究センター講演会

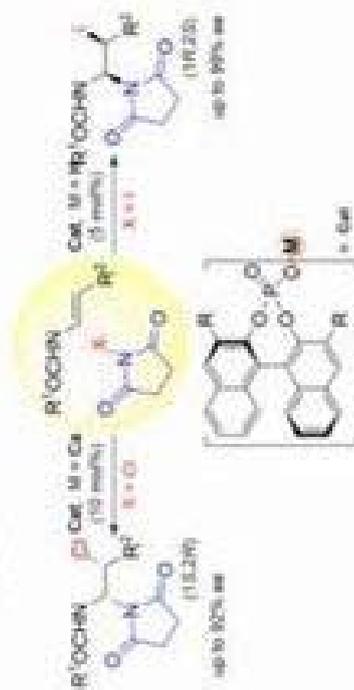
# 「Enantioselective Organocatalytic Cycloadditions via Hydrogen Bond Catalysis」

講師：Dr. Geraldine Masson  
(Institut de Chimie des  
Substances Naturelles, France)  
日時：6月23日 15:30~16:30  
場所：4号館 4405教室



Masson 博士は、不斉触媒反応の開発ならびに生理活性天然物の合成研究で活躍している、若手の有機合成化学の研究者です。

今回は、リン酸触媒反応の最新の研究成果について講演していただきます。



*G. Org. Lett.* **2016**, *18*, 1478–1481.  
*Science* **2016**, *351*, 918-919.  
*Synlett* **2016**, *27*, 559-563.  
*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*,  
11950-11953.

担当：山中(myamanak@rikkyo.ac.jp)

## 未来分子研究センター講演会

# 「Transition State Modeling in Asymmetric Catalysis: Harnessing Noncovalent Interactions in the Rational Design of Catalysts」

講師：Prof. Ragahavan B. Sunoj  
(Indian Institute of Technology)

日時：7月6日 15:30~16:30

場所：4号館 4405教室

Sunoj教授は、計算化学的なアプローチによって、主に不斉触媒反応の反応制御や立体制御について精力的に研究されています。



Prof. Sunoj mainly studies transition state modeling in asymmetric catalysis, mechanisms of multicyclic reactions, and computational design of catalysts.

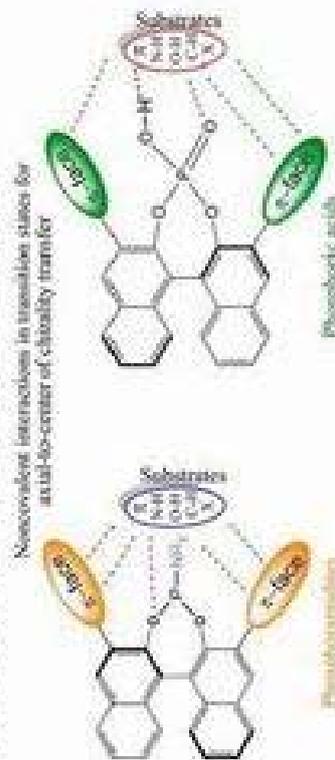
*Acc. Chem. Res.*, **2016**, *49*, 1019.

*ACS Catal.*, **2016**, *6*, 3118.

*ACS Catal.*, **2016**, *6*, 696.

*J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137*, 15712.

担当：山中(myamanak@rikkyo.ac.jp)

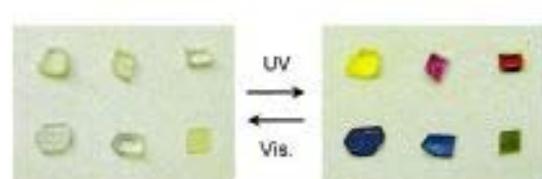




平成 25 年度～平成 29 年度  
私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

# 未来分子研究センター ニュースレター

## Research Center for Smart Molecules



News Letter **No.4**

2016 年 11 月

学校法人名 学校法人立教学院  
大学名 立教大学  
研究組織名 未来分子研究センター  
研究代表者 枝元一之



Research Center for  
Smart Molecules

# CONTENTS

班員からの寄稿

計算化学手法の開発と先導的応用  
望月 祐志 ..... 1

論理的分子設計に基づいたエネルギー変換媒体触媒の開発  
和田 亨 ..... 8

結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製  
森本 正和 ..... 12

分光分析法によるキラル分子の物性および分子間相互作用の解析  
鈴木 望 ..... 16

受賞・学術報告等 ..... 20

News Letter No.4  
2016.11

# 立教大学理学部 未来分子研究センター 公開講演会

日時：11月12日(土) 13:30~16:40

会場：立教大学 池袋キャンパス  
11号館 A203教室

## 特別講演：北川宏先生

京都大学教授、理事補 (研究担当)

2016年 文部科学大臣表彰 科学技術賞(研究部門)

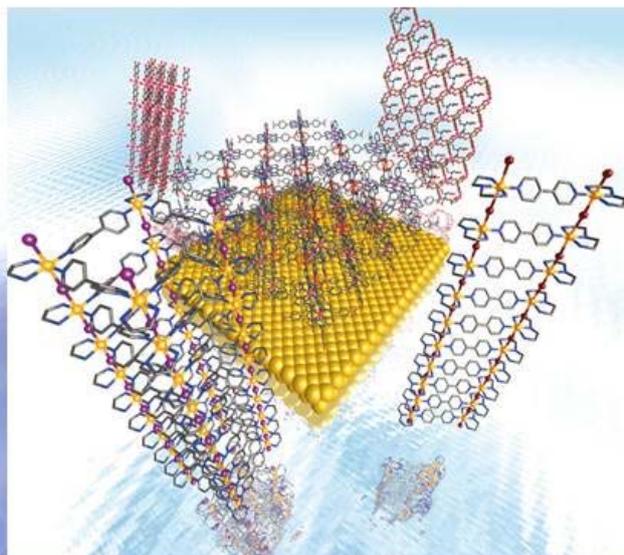
2013年 マルコポーロ・イタリア科学賞

2010年 日本化学会 学術賞

## 「次元交差領域における 新しい物質科学」

### 講演概要

未知の物性現象を探索する上で重要なことは、系の内部自由度を極限まで高めて、次元交差領域の物質開発を行うことである。例えば、ナノ粒子は0次元から3次元の交差領域に、梯子系やチューブ系は1次元から2次元の交差領域に、表面MOF (metal-organic framework) は2次元から3次元の交差領域に位置している。本講演では、1次元から2次元の次元交差領域に潜んでいる未知の物性探索の研究例について主に紹介する。



立教大学・未来分子研究センター

「設計に基づく分子自在制御の化学」プロジェクト

一般研究発表 立教大学理学部化学科教員 (各20分)

立教大学理学部化学科教員：望月祐志、和田亨、森本正和、鈴木望

連絡先：センター長 枝元一之(edamoto@rikkyo.ac.jp)

## 未来分子研究センター公開講演会

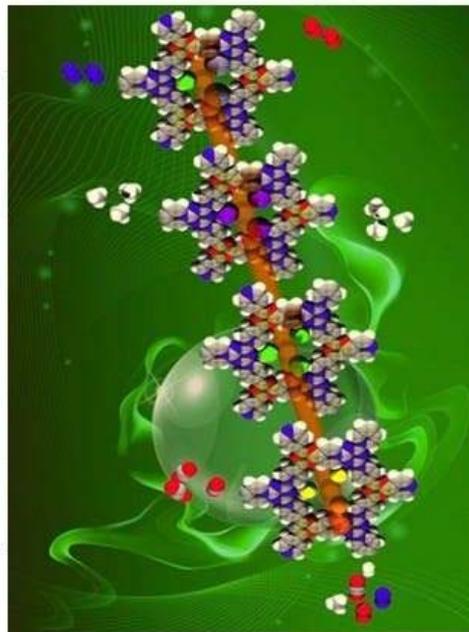
# 「Targeted Synthesis of Porous Aromatic Frameworks: From Structure Design to Advanced Application」



講師：Prof. Guangshan Zhu  
(東北師範大学教授、中国)  
日時：1月19日 18:20～19:40  
場所：4号館 4341教室

Zhu教授は、超分子多孔質金属錯体の合成と応用で世界的に著名で、これまでの論文数は300を超え、数多くの著書がある。2012年“Country's 10,000 Talents Plan”, Ministry of Science and Technology of China。

*Chem. Sci.*, **2016**, 7, 3751.  
*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, 127, 12924.  
*Nat. Commun.*, **2014**, 5, 4260.  
*Adv. Mater.* **2013**, 25, 6619.



連絡先：Ernst Horn (horn@rikkyo.ac.jp)

(別紙資料 26)第2回成果報告会

冊子表紙



第2回 成果報告会

2017年3月11日(土)

4号館 4407 教室

1班: 分子の機能性の理論的解析と分子設計

望月 祐志	計算化学手法の開発と先導的応用
常盤 広明	未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発
山中 正浩	理論設計支援による機能分子触媒の開発

2班: 反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発

ホーン・エルンスト	Self-Assembling Complexes : FTIR, UV/Visible, XRD and Mechanisms
黒田 智明	自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性
和田 亨	論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発
宮部 寛志	流通式分離系を利用する化学特性解析
箕浦 真生	高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発 ートリプチル基を活用した立体保護基の開発ー
鈴木 望	分光分析法によるキラル分子の物性および分子間相互作用の解析

3班: 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発

枝元 一之	表面反応を利用した高機能触媒の開発
入江 正浩	光スイッチ機能をもつ蛍光分子の設計と合成
松下 信之	外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価
森本 正和	結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製
大山 秀子	高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明
三井 正明	時空間分解顕微計測による光電変換ダイナミクス解明
上谷 幸治郎	天然高分子材料を用いた機能材料の創製

(別紙資料 27)平成 28 年度 成果報告書

冊子表紙

---

私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

## 設計に基づく分子自在制御の化学

平成 25 年度～平成 29 年度

---

### 平成 28 年度研究成果報告書

平成 29 年 6 月

法人名 立教学院

大学名 立教大学

研究組織名 未来分子研究センター

研究代表者 枝元 一之 (立教大学理学研究科・教授)

(別紙資料 27)平成 28 年度 成果報告書  
冊子目次

目 次

1. 研究センターの概要	1
2. 研究センターの設定目的	2
3. 研究センターの研究組織	3
4. 班員の研究の進展状況	5
5. 研究成果公表の状況	21

## 講演会のお知らせ

### **Boronic Acids: Recognition, Sensing and Assembly**

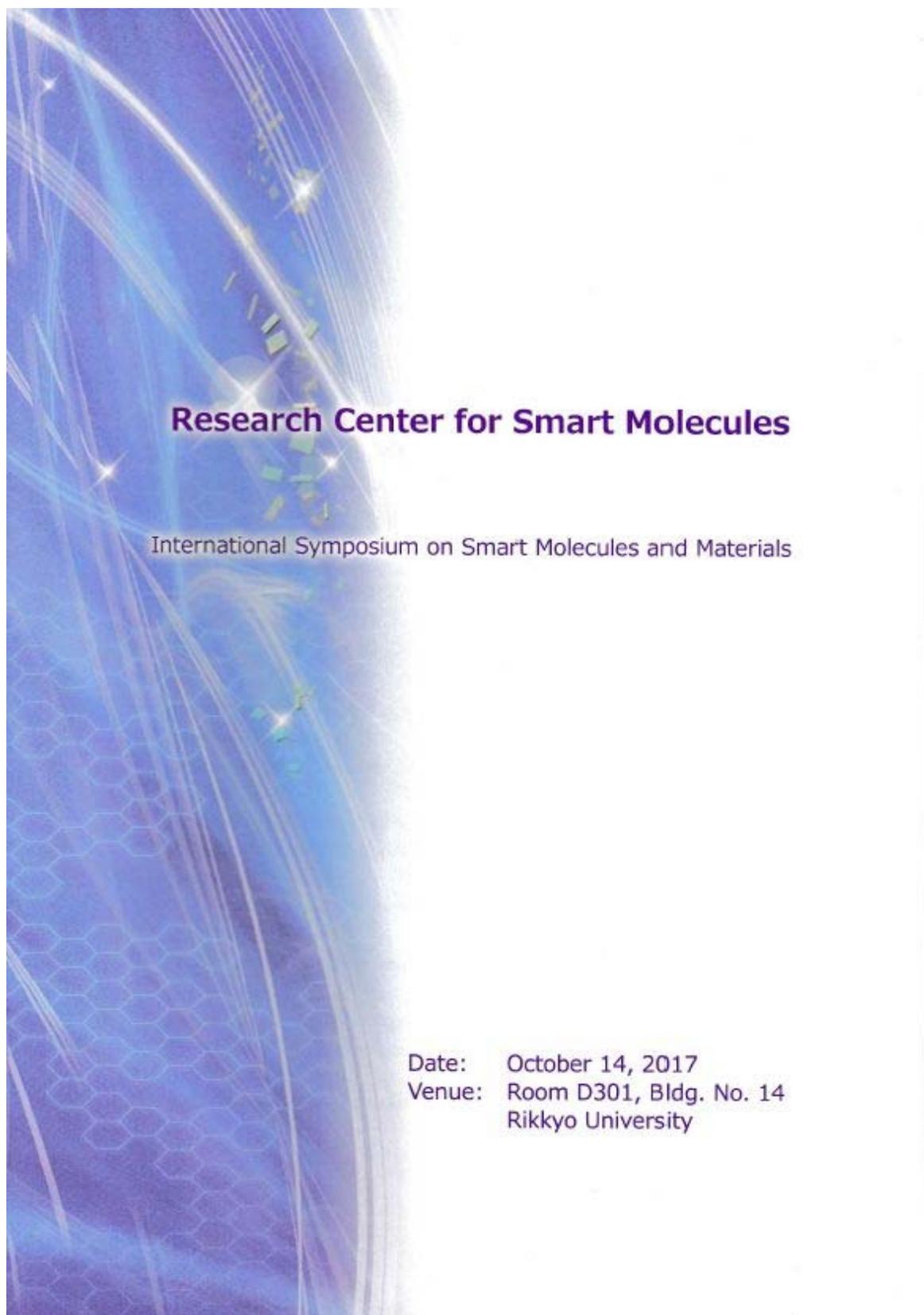
**Prof. Tony D. James  
(University of Bath)**

2017年8月31日(木) 15:00~16:30  
10号館 X204教室

Prof. Jamesは、イギリスのUniversity of Bathの教授であり、ボロン酸誘導体を用いた超分子化学の研究者として有名です。今回、来日されるのを機会に講演をお願いいたしました。講演会へのご参加をよろしくお願いいたします。

未来分子研究センター主催 問い合わせ先: 入江正浩

(別紙資料 29) 国際シンポジウム要旨  
冊子表紙



Research Center for Smart Molecules  
Rikkyo University

International Symposium on Smart Molecules and Materials

October 14, 2017  
Room D301, Bldg. No. 14

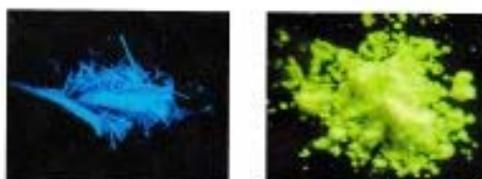
- OP-1 Masahiro Yamanaka**  
The interplay between experiment and computation:  
Rational design of bis-2-aminothiazoline as a new chiral scaffold
- OP-2 Ryosuke Tsutsumi**  
Ruthenium-Catalyzed C-C Coupling of Amino Alcohols with Dienes  
via Transfer Hydrogenation
- IL-1 Tony K. M. Shing**  
Synthetic and Biological studies of Carbasugar SGLT2 inhibitors
- OP-3 Tohru Wada**  
Water oxidation mechanism by dinuclear ruthenium complex catalysts
- OP-4 Takashi Nakazono**  
Oxygen Evolution Reactions Catalyzed by Cobalt Porphyrins
- OP-5 Nozomu Suzuki**  
Kinetic Study of Intermolecular Interaction by Capillary Electrophoresis:  
Inclusion Complex of Cyclodextrin and Phenoxypionic Acid
- IL-2 Saioa Cobo**  
Organometallic and hybrid switchable materials for molecular devices
- OP-6 Masakazu Morimoto**  
Photofunctional crystalline materials based on photochromic diarylethenes
- OP-7 Kojiro Uetani**  
Heat guiding materials developed by anisotropic  
thermally conductive *nata de coco* nanopapers
- OP-8 Yoshiki Niihori**  
Precise Separation of Functionalized Thiolate-Protected Metal Clusters



平成 25 年度 ~ 平成 29 年度  
私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

# 未来分子研究センター ニュースレター

Research Center for Smart Molecules



News Letter **No.5**

2017年11月

学校法人名 学校法人立教学院  
大学名 立教大学  
研究組織名 未来分子研究センター  
研究代表者 枝元一之



Research Center for  
Smart Molecules

# CONTENTS

班員からの寄稿

FMO 法を用いた 2 型糖尿病薬と標的タンパク質 DPP-4 の理論的結合解析  
常盤 広明・…………… 1

トリプチシル骨格を活用した新しい立体保護基の開発  
箕浦 真生・…………… 5

薄層合成によるバナジウム酸化物の MIT の探査  
枝元 一之・…………… 9

外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価  
松下 信之・…………… 13

受賞・学術報告等・…………… 17

News Letter No.5  
2017.11

立教大学理学部

## 未来分子研究センター 公開講演会

日時：11月25日(土) 13:30~16:40

会場：立教大学 池袋キャンパス

11号館 A304教室



### 特別講演：塩谷光彦先生



東京大学教授・「配位アシンメトリ」領域代表  
文部科学省科学研究費助成事業「新学術領域研究」

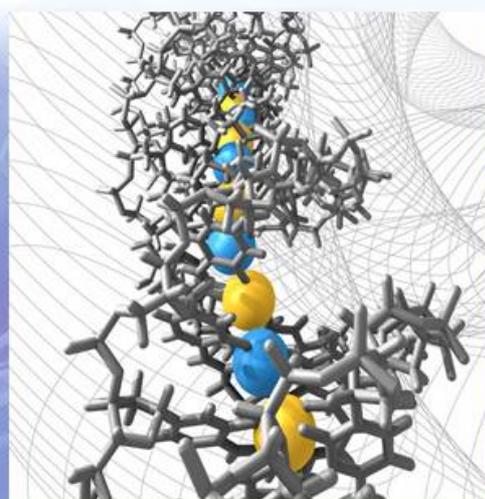
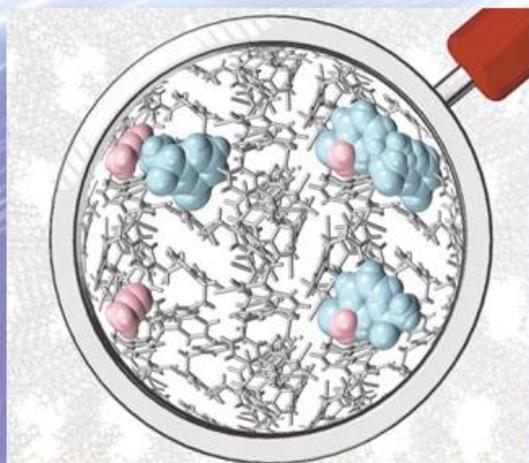
2016年 文部科学大臣表彰 科学技術賞(研究部門)

2008年 The University of Louis Pasteur Medal

2007年 日本化学会学術賞、井上学術賞

## 「超分子合成の醍醐味： 設計 vs セレンディピティー」

講演概要：合成化学者は、目的に合うように精密に設計された数々の超分子を報告してきました。一方で、思いがけない構造をもつ超分子が誕生し、新しい化学が切り拓かれてきました。本講演では、金属配列、分子機械、ナノスペースの超分子化学を例に挙げ、合理的な分子設計とセレンディピティーの境界線を歩く楽しさをお伝えします。



立教大学・未来分子研究センター：一般研究発表 立教大学理学部化学科教員

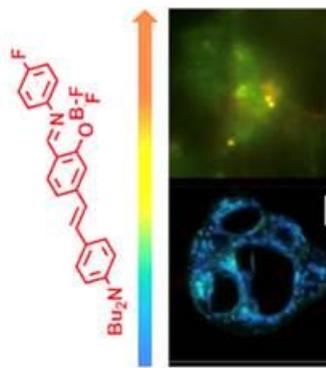
常盤広明、箕浦真生、松下信之、枝元一之

連絡先：センター長 枝元一之(edamoto@rikkyo.ac.jp)

# “Optimized fluorescent emitters based on a hydroxybenzazole or anil scaffold”

**Dr. Julien MASSUE**  
**(University of Strasbourg, France)**

2017年11月29日 (水) 15:00~16:30  
10号館X301教室



Massue博士はホウ素を鍵元素とした発光性分子の合成と特性解明を広く展開しておられます。  
今回は含ヘテロ元素二座配位子系を有する分子群の化学に関して講演を行って頂きます。

未来分子研究センター主催 問い合わせ先: 森本 正和

---

私立大学戦略的研究基盤形成支援事業

## 設計に基づく分子自在制御の化学

平成25年度～平成29年度

---

### 研究成果報告書

法人名	立教学院
大学名	立教大学
研究組織名	未来分子研究センター
研究代表者	枝元 一之 (立教大学理学研究科・教授)

(別紙資料 33) 外部評価用・成果報告書  
冊子目次

目 次

1. 研究センターの概要	1
2. 研究センターの設定目的	2
3. 研究センターの研究組織	3
4. 班員の研究の進展状況	5
5. 研究成果公表の状況	41

# 未来分子研究センター成果報告会

2018年3月10日(土)

10号館 X203教室

- \* 14:00 センター長 概要報告
- \* 14:10 - 14:30 第1班報告
- \* 14:30 - 14:50 第2班報告
- \* 14:50 - 15:10 第3班報告
- \* 15:10 外部評価委員の講評

(別紙資料 35)

森本正和 光化学協会 第 17 回光化学協会奨励賞



2017年度授賞者リスト (授賞日：2017年9月5日)

第31回光化学協会賞

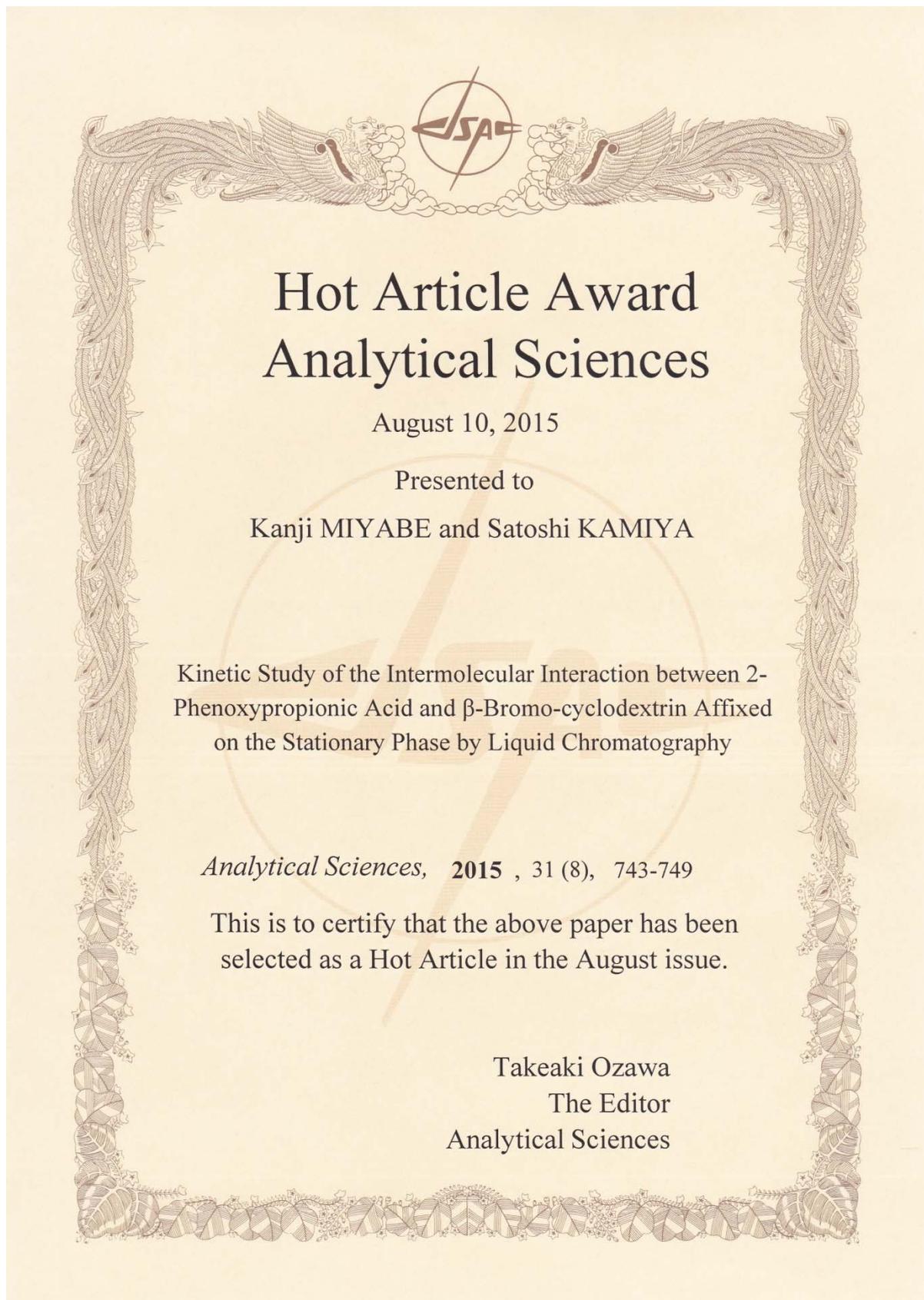
坪井 泰之	阪市大	分子系ナノ物質の光マニピュレーションと光化学への展開
森 直	阪大	電荷移動相互作用を駆使したキラル光化学の開拓

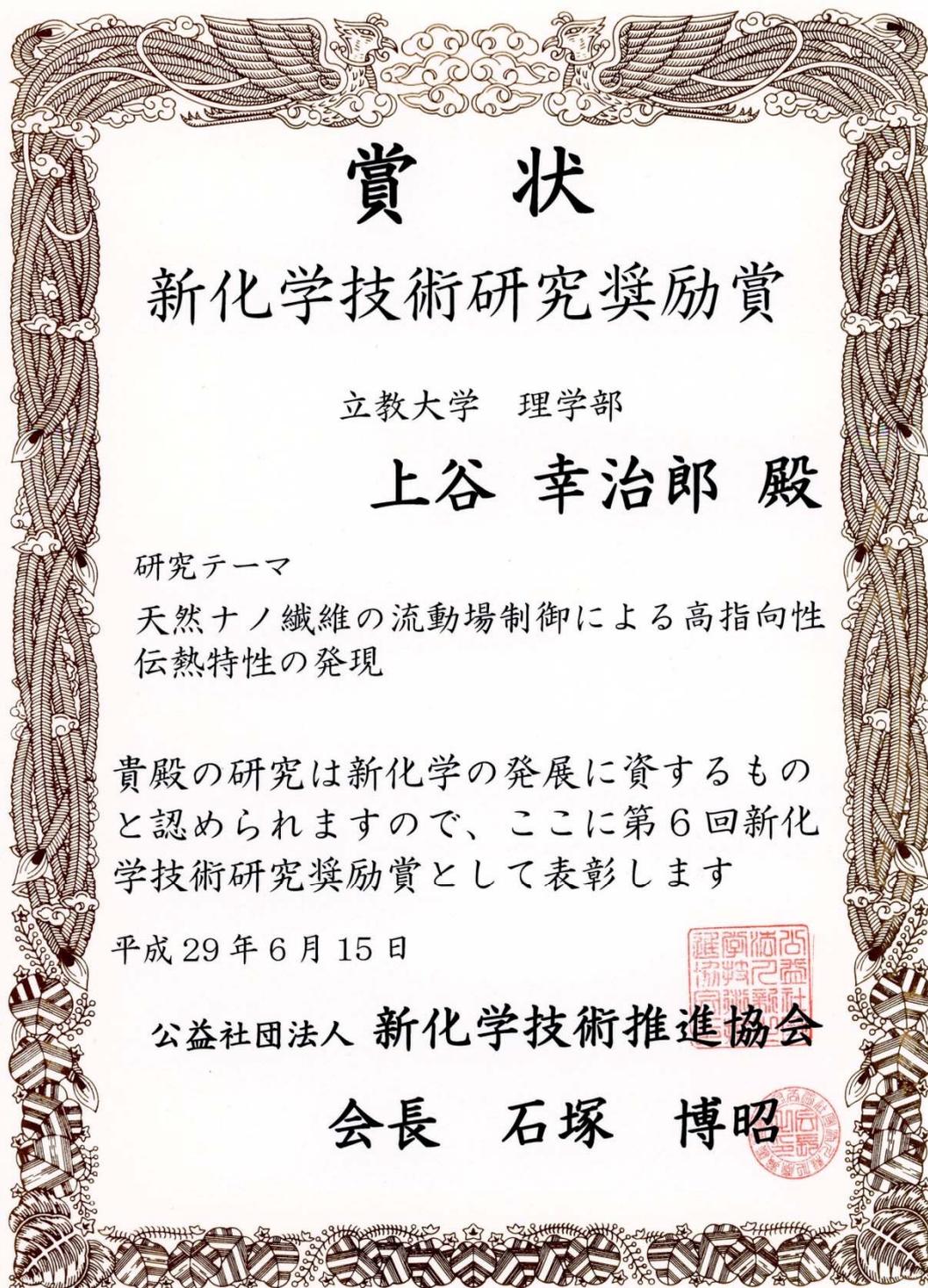
第17回光化学協会奨励賞

平田 修造	東工大	孤立芳香族分子の三重項励起状態からの光物理過程の制御
森本 正和	立教大	結晶構造制御による高次光機能分子結晶の創出

第13回光化学協会技術賞

高橋 浩三	システム・インスツルメンツ株式会社	光導波路分光測定装置の開発とその応用展開
-------	-------------------	----------------------





# 賞 状

## 新化学技術研究奨励賞

立教大学 理学部

上谷 幸治郎 殿

研究テーマ

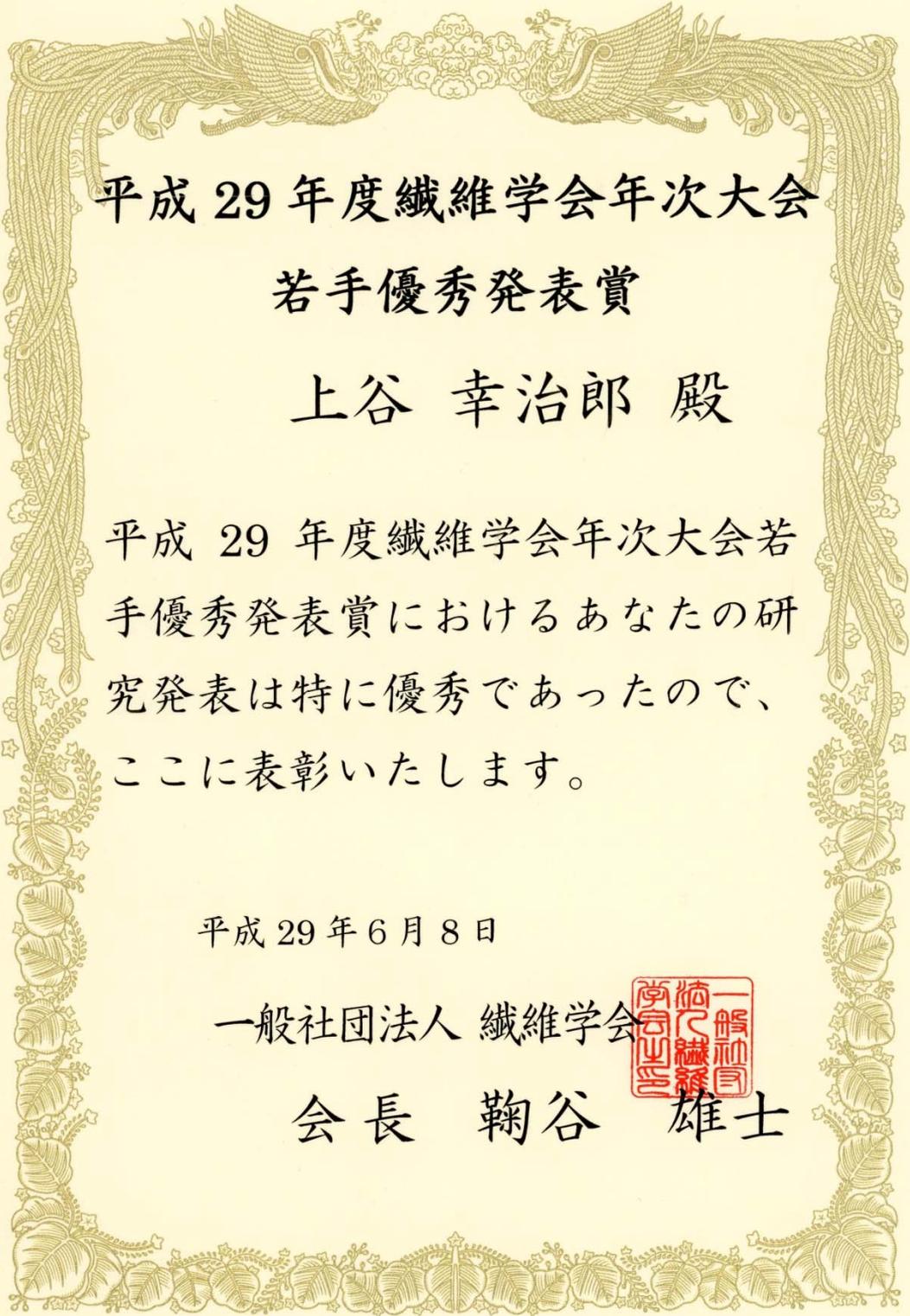
天然ナノ繊維の流動場制御による高指向性  
伝熱特性の発現

貴殿の研究は新化学の発展に資するもの  
と認められますので、ここに第6回新化  
学技術研究奨励賞として表彰します

平成29年6月15日

公益社団法人 新化学技術推進協会

会長 石塚 博昭



平成 29 年度繊維学会年次大会  
若手優秀発表賞  
上谷 幸治郎 殿

平成 29 年度繊維学会年次大会若手優秀発表賞におけるあなたの研究発表は特に優秀であったので、ここに表彰いたします。

平成 29 年 6 月 8 日

一般社団法人 繊維学会

会長 鞠谷 雄士



## 第2部：研究成果報告

## 1. 研究プロジェクトの概要

### 1-1. 研究プロジェクトの背景と必要性

化学の目的の一つは、分子の構造を様々に変えることでその性質を自在に制御し、新規な機能を持った分子・分子材料を開発していくことにある。従来、機能分子の開発は、主に天然に存在する分子を手本として試行錯誤的に分子構造変換することにより行われてきている。しかし、優れた機能を持つ分子・分子材料を合目的的に創製するには、機能の本質の理論化学的解析とそれに基づく「分子設計」、それを基とした「合成」と、構造・物性の「計測」、さらにその機能の「評価」を行い、それを理論化学的解析にフィードバックするサイクルを確立する必要がある。この手法は、「分子技術」のモデルと位置づけられ、経験的手法では生まれにくいような革新的な機能をもつ分子を創製する可能性を有している。

立教大学未来分子研究センターでは、「基礎から応用へ」の基本方針のもと、私立大学戦略的研究基盤形成支援事業「高度な機能を有する未来分子材料の創製」(平成 20 年～24 年、研究代表者: 入江正浩)と題するプロジェクトを進め、フォトクロミック分子材料、外部刺激応答機能金属錯体、機能高分子等の開発で大きな成果を収めてきた。また、本センターでは大規模分子、励起状態分子などに関する計算化学手法の開発を積極的にすすめてきた。それらの成果を踏まえ、本センターでは私立大学戦略的研究基盤形成支援事業「設計に基づく分子自在制御の化学」(平成 25 年～29 年、研究代表者: 枝元一之)と題するプロジェクトを立上げ、実験と計算が密接に連携して「設計」-「合成」-「計測」-「評価」のサイクルを確立して革新的な機能を持つ分子・分子材料の開発を目指す研究を推進した。

### 1-2. 研究プロジェクトの目的

上記で述べたように、本プロジェクトでは、実験と計算が密接に融合した新たな課題解決型研究システムを構築し、革新的な機能を持つ分子・分子材料を開発することをめざした。具体的には、計算による分子設計を担当する「設計グループ」と、実験的に機能分子の構築を行う「反応制御グループ」並びに「物性・機能制御グループ」を設け、これらのグループが互いに成果をフィードバックし合うことにより、機能分子・分子材料開発を行った。実験グループによる合成分子の物性・構造の計測結果、および機能の評価結果を「設計グループ」にフィードバックし、さらなる理論的解析を経て分子の再設計を行うサイクルを経ることにより、より高度な機能をもつ分子の開発を目指した。このような課題解決型研究システムの構築により、学術的には化学の新たな方法論を確立し、それにより革新的な機能を持つ分子・分子材料、例えば光メモリ、光駆動アクチュエーター、ドラッグデリバリーシステム、環境応答機能触媒、不斉合成触媒、水の光分解触媒、生分解性人工ポリマーなどの開発を行った。本プロジェクトで開発した機能分子・分子材料は、今後環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料の各分野に画期的な進展をもたらすと期待される。

## 2. 研究体制

未来分子研究センターに所属する立教大学大学院理学研究科教員が中心となり、計算化学による分子設計を担当するグループと、実験的に機能分子の構築を担当するグループの密接な協力により研究を進める体制を構築した。前者は「設計グループ」として機能分子の探査を目的とする計算手法の開発と応用を目指し、後者は主として分子の反応性制御を目指す「反応制御グループ」、および物性に基づく機能の制御を目指す「物性・機能制御グループ」を構成して分子の実験的構築を行った。以上の体制のもとで、計算化学による分子設計とそれに基づく分子の実験的構築を進め、実験系と計算系がそれらの成果を互いにフィードバックし合うことにより機能分子・分子材料の開発を進めた。さらに、本学理学研究科に設置されている「数理物理学研究センター」、「先端科学計測研究センター」、「生命理学研究センター」とも連携して共同研究を進めることにより、研究プロジェクトをより効率的に推進した。

### 2-1. 研究体制の概要

実験と計算が融合した新たな課題解決型研究システムを確立し、革新的な機能を持つ分子・分子材料を開発すべく、3つの班を設けて研究プロジェクトを推進した。以下にそれぞれの具体的研究内容を示す。

#### 1 班 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)

機能分子の探査を目的とする計算手法の開発を行った。さらにそれを用いて機能性の本質の理論的解析、およびそれに基づく分子・分子材料の設計を行った。

#### 2 班 反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

設計グループの分子設計を受けて、反応性に基づく機能を有する分子・分子材料の合成を行った。具体的には、人工光合成触媒、不斉合成触媒、薬理作用を有する分子、環境応答天然化合物等の合成を行った。合成物の構造・物性の計測を行い、またその機能性の評価を行った。

#### 3 班 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

設計グループの分子設計を受けて、物性に基づく機能を有する分子・分子材料の合成を行った。具体的には、光駆動分子アクチュエーター、光スイッチ機能蛍光分子、生分解性ポリマー等の合成を行った。合成物の構造・物性の計測を行い、またその機能性の評価を行った。

## 2-2. 研究組織

本プロジェクトは、立教大学大学院理学研究科教員および学外研究者により構成される以下の組織で推進した。

### 1 班 分子の機能性の理論的解析と分子設計(設計グループ)

望月 祐志	理学研究科・教授	計算化学手法の開発と先導的応用
常盤 広明	理学研究科・教授	未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発
山中 正浩	理学研究科・教授	理論設計支援による機能分子触媒の開発
堤 亮祐	理学研究科・助教	水素結合ネットワークを利用した分子認識による不斉触媒反応の自在制御
古明地 勇人	産業技術総合研究所・主任研究員	分子動力学手法の開発と応用
福澤 薫	日本大学松戸歯学部・助教	計算化学の先導的・実証的応用計算
吉澤 一成	九州大学先導物質化学研究所・教授	単一分子伝導の光制御に関する理論的研究
都築 誠二	産業技術総合研究所・上級主任研究員	計算化学手法を用いた分子間相互作用の精密解析

### 2 班 反応に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(反応制御グループ)

黒田 智明	理学研究科・教授	自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性
和田 亨	理学研究科・教授	論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発
宮部 寛志	理学研究科・教授	流通式分離系を利用する化学特性解析
箕浦 真生	理学研究科・教授	高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発
鈴木 望	理学研究科・助教	分光分析法によるキラル分子の物性および分子間相互作用の解析
中藺 孝志	理学研究科・助教	分子性触媒を基盤とした高効率な光エネルギー変換反応系の構築

### 3 班 物性に基づく機能を有する分子・分子材料の開発(物性・機能制御グループ)

枝元 一之	理学研究科・教授	表面反応を利用した高機能触媒の開発
入江 正浩	理学研究科・客員研究員	光スイッチ機能を持つ蛍光分子の設計と合成
松下 信之	理学研究科・教授	外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価

森本 正和	理学研究科・教授	結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製
大山 秀子	理学研究科・教授	高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明
三井 正明	理学研究科・教授	時空間分解顕微計測による光電変換ダイナミクスの解明
上谷 幸治郎	理学研究科・助教	天然高分子材料を用いた機能材料の創製
新堀 佳紀	上谷 幸治郎 理学 研究科・助教	機能性ナノクラスターの精密合成と構造・物性の解明
池田 潔	広島国際大学薬学部・ 教授	未来志向型機能を有するバイオプローブの合成開発
大坪 忠宗	広島国際大学薬学部・ 准教授	未来志向型機能を有するバイオプローブの合成開発

### 3. 研究成果報告

#### 計算化学手法の開発と先導的応用

理学部化学科・望月 祐志 (E-mail:fullmoon@rikkyo.ac.jp)

##### 1. 研究の構成

5年間のプロジェクト期間では、前半では実験系の研究室とのコラボレーションも重視し、フラグメント分子軌道(FMO)計算のプログラム開発と応用計算を行いました。後半では計算化学による「模擬実験」の方向性を直截に模索し、メゾスケールを扱える粗視化シミュレーションとの連携を図ると共に、機械学習を含む情報科学的なアプローチも試みてきました。以下にまとめます。

##### 2. 実験系研究室との連携

実験系研究室と行った主なテーマとしては、[松下研] 白金シアノ錯体とメチルピオロゲンの複合体の励起スペクトルの同定、[和田研] 2核 Ru 錯体の酸化還元過程の追跡、及び tacn を配位子に持つ白金錯体[1]、などがあります。論文の形には至っていないものの、学生の学会発表は多数行われており、教育面で一定の成果があったと考えています。また、学部3年次の「化学実験4」の間に行った計算研究が論文にまとまった例[2]もあります。

##### 3. フラグメント分子軌道計算

望月は、フラグメント分子軌道(FMO)法プログラム ABINIT-MP[3]の研究開発を長年に渡って主導しています。この5年間の中でも機能の向上を進めつつ、先導的な応用計算も展開してきました。特に、DNA モデル中の塩基分子間の相互作用解析[4-6]は系統的に行っています。また、インフルエンザノイラミニダーゼ阻害薬の水和・脱水和のモデリング[7]は、昨今重要度が認識されている細胞表面の糖鎖の扱いにも関係するものです。ヒドロキシアパタイトと人造ペプチドとの相互作用解析[8]は、古典分子動力学(MD)による多数構造のサンプリングをベースにしており、後述する機械学習による FMO 計算結果の統計的評価の「助走」的な要素もありました。なお、文献[8]の内容はプレス発表(2015/5/12)と新聞掲載(日経産業 2015/5/19 など)の対象となりました。

その他の FMO の応用計算では、赤色蛍光タンパク質(DsRed)の発光領域の構造の詳細解析[9]、ファイトクロームの励起スペクトルの同定、アンモニアクラスターの FMO-MD(力を FMO で直接算定)シミュレーションによる振動解析、バイオミメティック系機能性素材であるペプチドのイオン内包の相互作用解析[10]などがあります。また、ペプチドについては、凝集相での励起子ダイナミクスの計算まで進めています。これらの

応用計算の成果の論文文化を現在(2018年1月時点)進めているところです。

#### 4. 粗視化シミュレーション

FMOを含む分子軌道法、あるいは古典MDは基本的にはナノスケール・原子レベルでの相互作用に基づく計算です。一方、高分子系、コロイド、あるいは細胞などを考えるとメゾスケール(以上)の構造を持っており、通常、適当な分子単位を「粒子」としてまとめ、粒子間の有効相互作用に基づく散逸分子動力学(DPD)等の粗視化シミュレーションが使われています。こうした有効相互作用を表現するパラメータは、従来は実験値にフィットさせて決めるか、古典MDにも使われる力場によって評価されてきました。しかし、信頼性が十分でないケースがある他、参照した実験系とは定性的に異なる系に対しては適用出来ない問題がありました。そこで、ナノレベルのFMO計算に基づいて非経験的にメゾレベルの有効相互( $\chi$ )パラメータを算定するプロトコルを確立[11]し、さらに一例のワークフローをシステム化[12]しました。FMO-DPDマルチスケールシミュレーションの応用では、電解質膜であるナフィオンと水の混合系に先ず適用し、水クラスターの構造的な指標の実験データをほぼ再現しました。さらに続けて、脂質膜の形成[13]やシリカ表面への吸着[14]、さらにタイヤゴムの複合素材の凝集解析などにも計算技法を水平展開しています。

#### 5. 情報科学との関係

これまで、FMOの計算結果は人が解析することが常でした。しかし、タンパク質やDNAの構造ゆらぎを含めるために多数(例えば100個以上)のサンプルを扱うことは、相当に困難な仕事となりますし、ミス・見落としも起こり得ます。そこで、機械学習・深層学習を使って自動的に本質的な情報を統計因子も含めて抽出する試みを始めています[15,16]。

別の軸としては、メニーコア型のCPU上でのプログラムの性能を評価するベンチマーク[17]やGPUによる深層学習の時間の短縮、統計・機械学習パッケージ(TensorFlow、R、Scikit-learnなど)の導入、計算流体力学(CFD)や量子コンピュータの試行も行いました。こうした情報科学系の内容も、学生が楽しみつつ取り組んでくれたのは嬉しいことでした。

#### 文献

- [1] Wada T. et al. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2015**, *88*, 1230-1237.
- [2] 川田 他, *J. Comp. Chem. Jpn.* **2016**, *15*, 87-91.
- [3] Tanaka S. et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 10310-10344.
- [4] Fukuzawa K. et al. *Comp. Theor. Chem.* **2014**, *1034*, 7-16.
- [5] Fukuzawa K. et al. *Comp. Theo. Chem.* **2015**, *1054*, 29-37.

- [6] Yamada Y. et al. *Comp. Theor. Chem.* **2017**, 1101, 46-54.
- [7] Tokuda K. et al., *J. Mol. Graphics Model.* **2016**, 69, 144-153.
- [8] Kato K. et al. *Chem. Phys. Lett.* **2015**, 629, 58-64.
- [9] 坂口 他, *J. Comp. Chem. Jpn.* **2015**, 14, 155-163.
- [10] 川田 他, *J. Comp. Chem. Jpn.* **2016**, 15, 51-52.
- [11] Okuwaki K. et al. *J. Phys. Chem. B* **2018**, 122, 338-347.
- [12] 奥脇 他, *J. Comp. Chem. Jpn.* **2018**, 印刷中.
- [13] Doi H. et al. *Chem. Phys. Lett.* **2017**, 684, 427-432.
- [14] 土居 他, *J. Comp. Chem. Jpn.* **2017**, 16, 28-31.
- [15] 望月 他, *計算工学* **2017**, 22, 3539-3542.
- [16] 望月 他, *J. Comp. Chem. Jpn.* **2018**, 印刷中 (DOI:10.2477/jccj.2017-0051).
- [17] 齊藤 他, *J. Comp. Chem. Jpn.* **2016**, 15, 92-96.

# 未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発

理学部化学科・常盤広明\*、Sundaram Arulmozhiraja、  
広島国際大薬学部・池田潔、大坪忠宗  
(E-mail: \*tokiwa@rikkyo.ac.jp)

## 1. はじめに

国民の多くが小型情報端末を使いこなし、新聞雑誌等、多くの情報媒体がデジタル化するなど、社会的にも情報（データ）利用を取り巻く環境の変革は著しい。今や、数年前のスーパーコンピュータの性能を持つ情報端末が、手の中に収まってしまっている。その一方で、最新の計算・理論化学手法の開発、発展も目覚ましく、最近では、コンピュータによるイメージング技術として、粗視化モデルによるメゾスコピックレベルでの細胞膜シミュレーションや、経験的パラメータを一切用いない第一原理計算によるタンパク質複合体の計算が可能となってきた。計算科学および情報科学のハードならびにソフト両面における発展は、科学的領域だけに留まらず、社会をも変革するまでに至っている。実際に、実験的構造が未知な疾病標的タンパク質の理論的構造予測[1]や臨床治療において売上上位を占める抗糖尿病薬のタンパク質-阻害剤間結合解析による作用機序解析[2]など、医科学の領域にも利用可能なそれらの手法の有するポテンシャルは極めて高い。今後、合理的設計に基づく新規分子設計のアウトプットをどのように向上させていくかが重要な課題となっている。

## 2. ワクチン・化学療法剤のないウイルスに対する新規阻害剤の設計・開発

本研究では、日本独自に開発が進んでいる計算・理論化学手法を用いたウイルスタンパク質の解析例[1]をはじめ、元来はデバイスや半導体解析のために開発された計算手法を産業応用化酵素など生体系[3]などに適用した。さらに、構造を基盤とした計算・理論化学的にアプローチに加えて、これまでの膨大な実験結果を集積したビックデータを効率的に利用するバイオインフォマティクス手法の開発にも着手し、中分子薬、人工抗体設計などに応用した。この新規アミノ酸配列データ解析手法を基盤としたバイオインフォマティクス手法を活用して、ウイルスの系統樹解析や分類、さらには変異予測などを行い、新たな計算ウイルス学の可能性を示した。歴史あるウイルス学に対して、全くの異ジャンルからの挑戦になるが、最新の医科学を統合化再編した新たなカテゴリを構築したい。一般的に、ウイルス感染症への医学的対策は、ワクチンと化学療法剤が使用されている。副作用のない効率的なワクチン開発の第一歩は標的タンパク質へ特異的に結合・中和する抗体の設計である。本研究では、アミノ酸配列手法を発展拡張することで、これまでの抗体設計とは異なり、効率的に大量発現が可能な人工抗体の設計法の確立を目指し、臨床応用可能なワクチンのないウイルス感染症の標的タンパク質につ

いての人工抗体の設計開発を行った。

### 3. 生活習慣病標的タンパク質に対する新規阻害剤の設計・開発

ジペプチジルペプチターゼ 4 (DPP-4)は、ランゲルハンス島の膵β細胞からのインスリン分泌を刺激するグルカゴン様ペプチド 1(GLP-1)、およびグルコース依存性インスリン分泌刺激ポリペプチドなどのインクレチンの分解に関する酵素であり、グルカゴン分泌を抑制する。[4] 2型糖尿病はインスリン産生が不十分であることで引き起こされるため、インスリンやその分泌物ではなく DPP-4 の阻害をすることで、低血糖を伴わず安全で効率的に血漿糖代謝の改善ができる。[5] そのため、*in vivo* におけるインクレチンの効果を増強し、DPP-4 の作用を抑制することで薬効を発現する経口血糖降下薬である抗糖尿病薬、DPP-4 阻害剤が開発された[6]。これまでに、sitagliptin 1, linagliptin 2, alogliptin 3, teneligliptin 4, saxagliptin 5, vildagliptin 6 など複数の阻害剤が開発上市されている。これらの阻害剤は標的タンパク質が同一でありながら、各 DPP-4 阻害剤と DPP-4 と分子レベルでの定量的相互作用解析に関する報告はなかった。そこで本研究では、第一原理計算に基づく量子力学的フラグメント分子軌道法(FMO-QM 法)を用いて、DPP-4 と阻害剤との相互作用エネルギーを定量的に評価し、各阻害剤の作用機序の理論的解析を行った。さらに、FMO-IFIE に基づく安定化エネルギーを、実験的結合エネルギーと比較し、相関を解析した。阻害剤と DPP-4 複合体の vdW 相互作用の IFIE 値は、 $R^2 = 0.85$  で pIC50 値とよく相関しており、この結果は、PPI の結合親和性が vdW 相互作用エネルギーと相関する傾向とよく一致しているさらにこの IFIE 値は、DPP-4 と阻害剤の結合親和性( $K_D$  値)とも比較的よい相関 ( $R^2=0.69$ ) をすることが分かった。本研究により臨床応用されている各 DPP-4 阻害剤の標的タンパク質への相互作用の違いが明らかとなった。

### 4. まとめ

分子構造を基盤とする理論化学と配列を基盤とするバイオインフォマティクスを有機的に融合した新規アプローチにより、未来志向型機能を有する薬物・バイオプローブの論理的設計・開発を行った。その結果、光応答性バイオプローブの生体系への応用基盤を確立し、ワクチン・化学療法剤のないウイルスに対する新規阻害剤や副作用を軽減した生活習慣病標的タンパク質に作用する薬物の創製・開発に成功した。今後、本アプローチ手法を種々のウイルス系へと適用範囲を拡張し、さらに生理活性・機能性を向上させた日本発の新規バイオプローブ・薬物の合理的設計開発に繋げたい。

### 5. 文献

- 1) Nongluk Sriwilajaroen, Hiroaki Tokiwa, *et al.*, *J. Med. Chem.*, **59**(10), 4563-4577 (DOI: 10.1021/acs.jmedchem.5b01863) (2016).
- 2) Sundaram Arulmozhiraja, Hiroaki Tokiwa, *et al.*, *PLoS One*, **16**(10) e0166275 (DOI:

- 10.1371/journal.pone.0166275) (2016).
- 3) Shogo Nakano, Hiroaki Tokiwa, *et al.*, *J. Phys. Chem. B*, **120(41)**, pp10736-10743 (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b09328) (2016).
- 4) R. Mentlein, B. Gallwitz, W.E. Schmidt, *Eur. J. Biochem*, **214**, 829–835 (1993).
- 5) T. J. Kieffer, C. H. McIntosh, R. A. Pederson, *Endocrinology*, **136**, 3585–3586. pmid:7628397 (1995); C. F. Deacon, A. H. Johnsen, J. J. Holst, *J Clin Endocrinol Metab*, **80**, 952–957. pmid:7883856 (1995).
- 6) J. Rosenstock, B. Zinman, *Curr Opin Endocrinol Diabetes Obes*. **14**, 98–107. pmid:17940427 (2014).

# 理論設計支援による機能分子触媒の開発

理学部化学科・山中 正浩

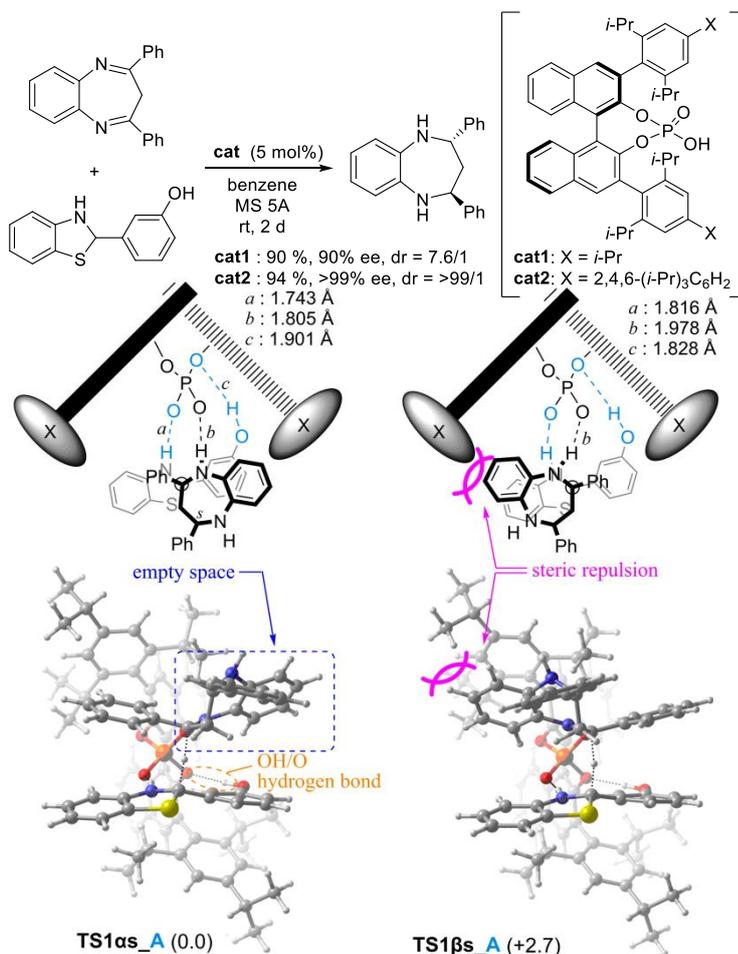
E-mail: myamanak@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

本研究では、分子触媒開発に対して量子化学計算の積極的に活用することによって、これまでの経験に基づく設計から理論的な合理設計へとパラダイムシフトさせ、新しい分子触媒の開発を目指している。不斉配位子に共鳴安定化構造や水素結合ネットワークを合理的に導入し、複数の金属中心やルイス酸・ブレンステッド酸によって協奏機能を発現する高機能分子触媒の開発を進めてきた。これまでに、「ルイス酸と水素結合の協奏効果」「複核金属中心による化学選択性の発現」「誘導適合作用による遷移状態安定化」という興味深い設計指針が得られた。

## 2. BINOL-リン酸触媒による 1,5-ベンゾジアゼピンの不斉移動水素化反応<sup>1)</sup>

BINOL-リン酸触媒は、ケトイミンの不斉移動水素化反応に対して高い不斉触媒能を示が、1,5-ベンゾジアゼピンに対しても、2位に 3-HOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub> 基を有するベンゾチアゾリンを用いることで、高エナンチオ・高ジアステロ選択的に不斉移動水素化反応を達成する。我々がすでに解明した立体制御機構に基づき<sup>2)</sup>、立体選択性決定段階について理論的検討を行った [M05-2X/6-31G\*//ONIOM(B3LYP/6-31G\*:HF/3-21G)]。ジアステロオメリックな遷移状態 (TS $\alpha$ , TS $\beta$ ) を比較したところ、ベンゾチアゾリンの OH 基がリン酸部位と水素結合して、優先する (*S,S*)-生成物を与える遷移状態 (TS $\alpha$ ) を安定化するとともに、基質を配向制御することで高エナンチオ選択性を発現することを見出した。また、3,3'-位に嵩高いビアリアル置換基を導入して深い不斉反応場を構築することにより、遠隔位の立体制御が達成さ

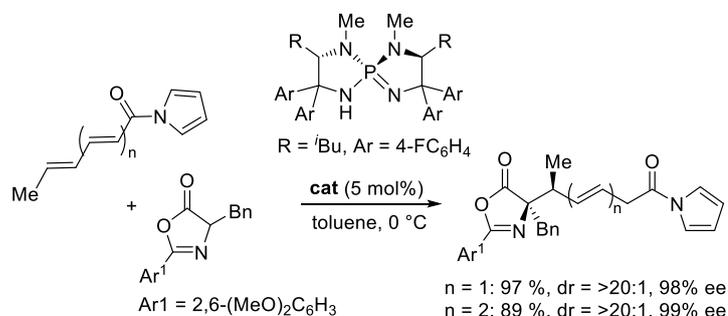


れ、高ジアステレオ選択性が発現することを見出した。

### 3. *P*-スピロイミノホスホラン触媒によるアズラクトンの不斉 1,6・1,8-選択的共役付加反応

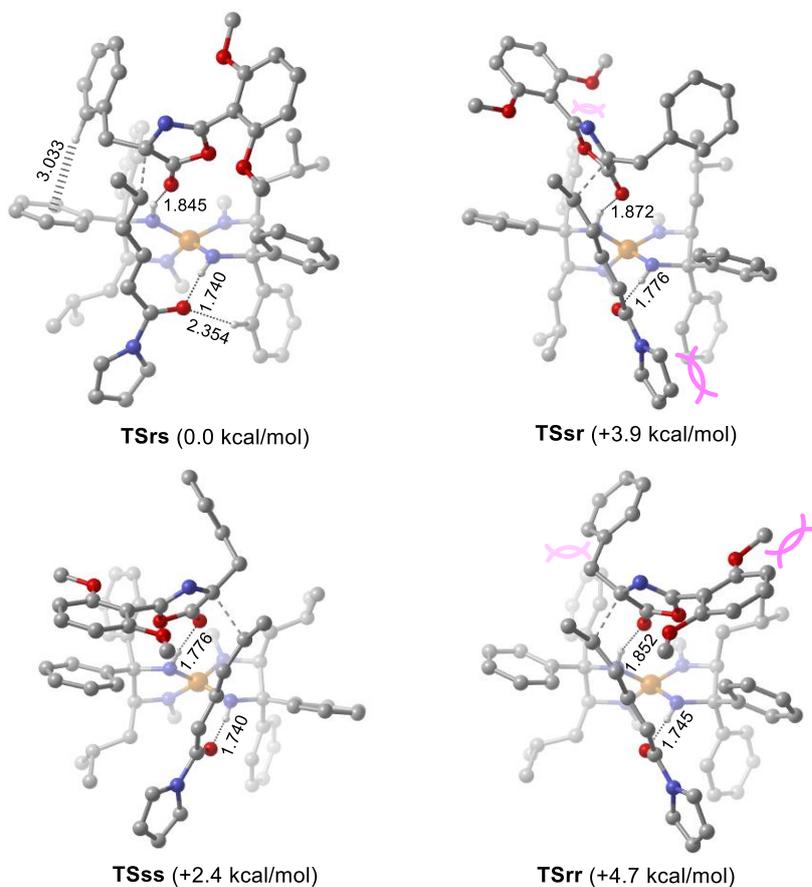
3)

*P*-スピロイミノホスホラン触媒は、アズラクトンと *N*-アシルピロールを用いた不斉 1,6-付加反応に対して、高い位置選択性、ジアステレオ選択性、エナンチオ選択性を達成することが大井、浦口によって報告されている。本研究では、そ



の反応機構の全容とともに位置選択性及び立体選択性の発現要因について、理論的検討を行った(B3LYP-D3/6-31+G\*\*//B3LYP/6-31G\*)。本反応は、アズラクトンからプロトンを引き抜いてアミノホスホニウムイオンを形成後、2つの NH 部位が二重水素結合を介してエノラートアニオンとアシルピロールを補足・活性化する反応経路であることを明らかにした。C-C 結合形成が律速段階かつ立体選択性決定段階であり、続くエノラート中間体のプロトン化では、 $\alpha$ 位炭素での  $\text{C}^\alpha$ -プロトン化が  $\text{O}$ -プロトン化・ $\text{C}^\gamma$ -プロトン化に比べて、熱力学的・速度論的に優先することが分

かった。さらに C-C 結合形成段階において、4つのジアステレオメリックな遷移状態を比較したところ、**TSrs** が最安定であり、実験事実の良い一致を示した。詳細な構造解析及び相互作用解析によって、触媒が有する剛直で狭い不斉反応場に加えて、触媒と基質との間に構築される NH/O, CH/O 水素結合や CH/ $\pi$ 相互作用が、立体制御発現に重要な役割を担っていることを明らかにした。また、*N*-アシルピロールの $\pi$ 共役系が崩れることによる不安定化が、高位置選択性の発現要因で



あることが分かった。

#### 文献

- 1) Horiguchi, K.; Yamamoto, E.; Saito, K.; Yamanaka, M.; Akiyama, T. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 8078.
- 2) Zhu, C.; Saito, K.; Yamanaka, M.; Akiyama, T. *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 388.
- 3) Yamanaka, M.; Sakata, K.; Yoshioka, K.; Uraguchi, D.; Ooi, T. *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 541.

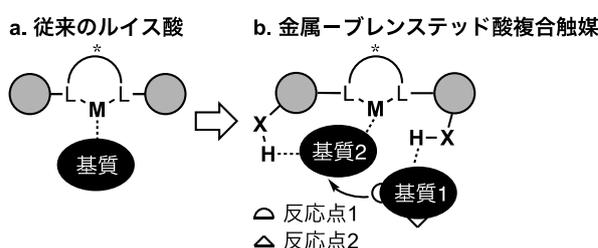
# 水素結合ネットワークを利用した分子認識による 不斉触媒反応の自在制御

理学部化学科・堤 亮祐

E-mail: r.tsutsumi@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

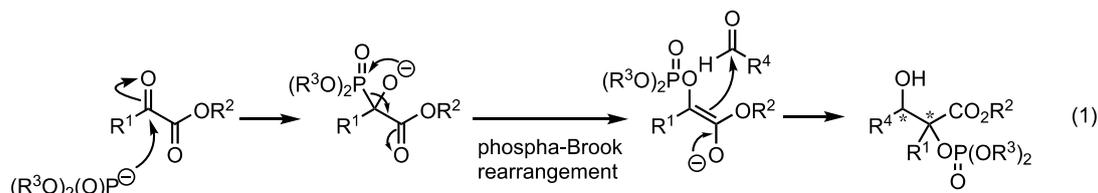
近年の触媒的不斉合成の進歩により、様々な化合物を単一のエナンチオマーとして得ることが可能になっている。しかし反応の化学・位置・立体といった様々な選択性を思いのままにコントロールする理想的な分子変換を実現するには、新しい概念に基づ



づく高機能触媒の開発が不可欠である。本研究では、基質を強力に活性化するルイス触媒作用に柔軟な水素結合を組み合わせる金属-ブレンステッド酸複合触媒に注目し、化学・位置・立体選択性の自在制御を目指した。初期的な検討として、1.  $\alpha$ -ケトエステル、アルデヒド、亜リン酸ジエステルの化学選択的三成分連結反応と 2. ブテノリドの求核的付加反応における位置・立体制御に取り組んだ。

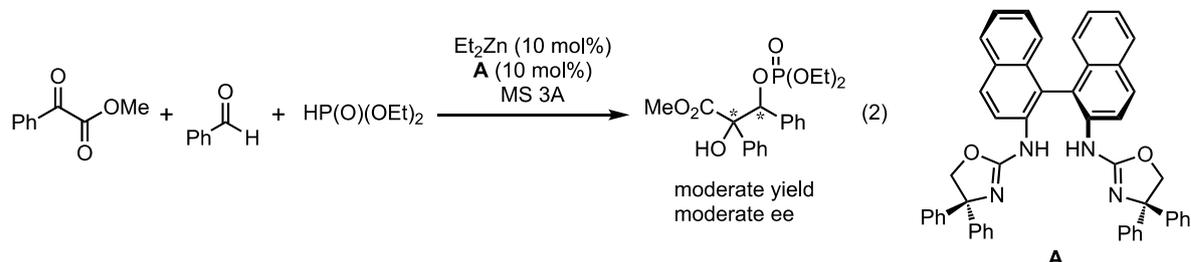
## 2. $\alpha$ -ケトエステル、アルデヒド、亜リン酸ジエステルの化学選択的三成分連結反応

我々は既に、キラルなビスアミジン配位子を用いた  $\text{Et}_2\text{Zn}$  による不斉アルキル化反応において、 $\alpha$ -ケトエステル、アルデヒド共存下  $\alpha$ -ケトエステルが優先して反応することを見出している。本触媒の  $\alpha$ -ケトエステル特異的な認識能を利用することで、 $\alpha$ -ケトエステルとアルデヒド共存下、化学選択的な三成分連結反応を効率的に実現できる可能性に着目した。すなわち、亜鉛-ビスアミジン触媒存在下、亜リン酸ジエステルが  $\alpha$ -ケトエステルに選択的に付加して **phospha-Brook** 転位を起こした後、生じたエノラートがアルデヒドと反応することで、二連続不斉中心を簡便に構築できると考えた (式 1)。



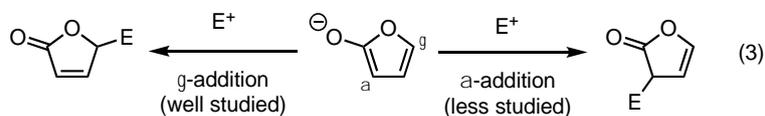
$\text{Et}_2\text{Zn}$  とビスアミジン配位子 **A** から調製した触媒を用い、 $\alpha$ -ケトエステル、ベンズアルデヒドおよび亜リン酸ジエチルを反応させたところ中程度の収率かつ比較的良好な

エナンチオ選択性で目的の三成分連結体が見出された (式 2)。今後は化学・立体選択性向上を目指し、反応条件および触媒構造の最適化を行っていく予定である。

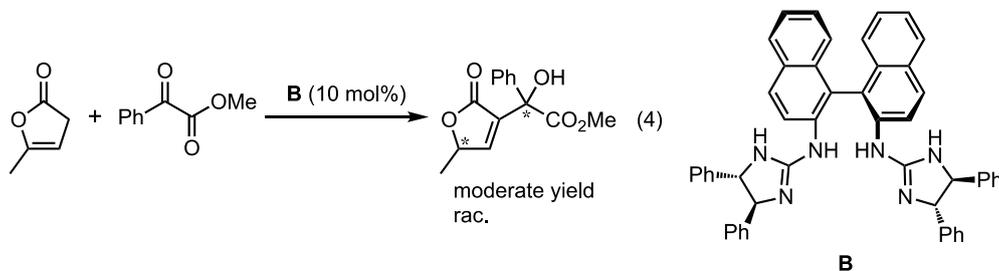


### 3. ブテノリドの求核的付加反応における位置・立体制御

複数の反応点を持つ基質を反応に付した場合、一般的に位置選択性は基質固有の立体的環境と電子的な性質により決定され、その位置選択性を外的な要因で制御するのは容易ではない。例えばブテノリドが塩基により脱プロトン化されエノラートになると、潜在的には  $\alpha$  位と  $\gamma$  位の二ヶ所で反応する可能性があるが、実際にはこれまで報告されている触媒的付加反応のほとんどが  $\gamma$  位での反応である (式 3)。本研究では、水素結合供与部位を持つ不斉配位子と金属を組み合わせた触媒を用い、ブテノリドと求電子剤の双方を認識して適切な位置に捕捉することで、通常とは異なるブテノリドの  $\alpha$  位での反応を立体選択的に実現できると想定し、研究に着手した。



金属への配位と水素結合供与の両方を担うアミジン部位を 2 個有するキラルなビスアミジン型配位子と種々の金属塩との錯体を調製し、 $\alpha$ -アンゲリカラクトンと  $\alpha$ -ケトエステルとの付加反応を検討したが、反応は進行しなかった。一方、これらの配位子の一つである **B** のみを塩基触媒として用い反応を行うと、目的の  $\alpha$ -付加体が中程度の収率で得られた。しかし、エナンチオ選択性の発現には至っていない (式 4)。今後は、立体選択性の向上を目指し触媒構造の検討を行っていく。



# 自然界におけるテルペン化合物の設計と制御および多様性

理学部化学科・黒田 智明

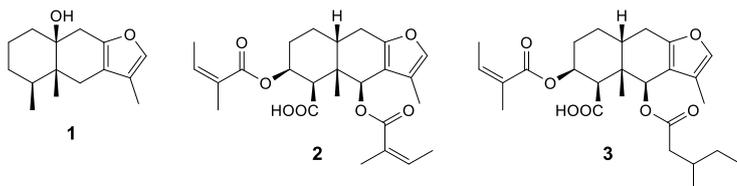
E-mail: chkkuroda@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

我々は中国横断山脈地域に生息するキク科 *Ligularia* 属植物を題材とし、テルペン化合物多様化の実態を調査している。交雑、戻し交配を経て他種の化合物を取り込むことは自然界における化合物設計のひとつである。本研究では幾つかの交雑種について化学成分の調査を行うとともに、近縁種の相互関係についても調べた。その主なものを以下に述べる。また、これらの研究を通じて、幾つかの新規化合物の構造決定を行った。一方、*Ligularia* 属からは高度に酸素官能基化されたビスボラン化合物が得られるが、多くの場合、官能基の立体構造が決定されていない。そこで、モデル化合物の合成を行って天然物の立体構造を明らかにした。

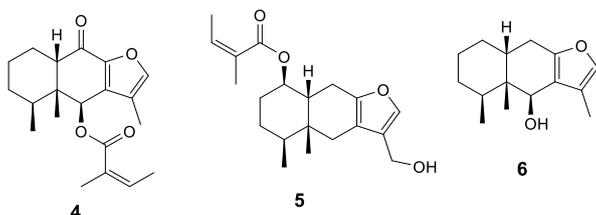
## 2. *Ligularia tongolensis* および *L. cymbulifera* の交雑種の成分<sup>1)</sup>

雲南省香格里拉県および四川省稻城県の2か所にて雑種試料を得、同時に採集した両親種とともに分析を行った。両地域の雑種試料のいずれからも *L. cymbulifera* の特徴的主成分である tetradymol (1) および共通主成分 2 が単離された一方、*L. tongolensis* の特徴成分 3 は雲南産試料からは得られたが四川産試料からは得られず、雑種成分の地域差が認められた。雲南産 *L. tongolensis* は交雑を経験していることが判明した。



## 3. 雲南省産 *Ligularia cythiceps* と *L. lamarum*/*L. subspicata* との雑種<sup>2)</sup>

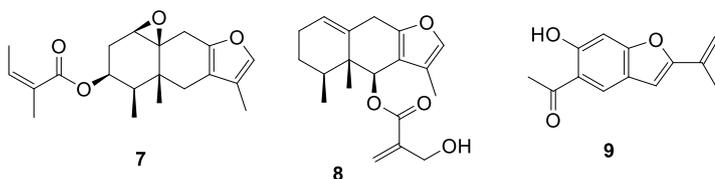
雲南省香格里拉県の天池にて採集した数試料の標記雑種について化学成分の分析を行った。その結果、雑種は3つのケモタイプに分けることができた。すなわち、(1) 化合物 4 をはじめとする 9-オキシフラノエレモフィランを主成分とするタイプ (*L. cythiceps* に近い)、(2) subspicatin A (5) を主成分とするタイプ (*L. subspicata* に近い)、および (3) 9-オキシフラノエレモフィランと ligularol (6) の両方を産するタイプ (両親の中間的)、の3つである。



9-オキシフラノエレモフィランは明らかに *L. cyathiceps* 由来である。しかし、*L. cyathiceps* では1,10位にエポキシドを有する化合物を生産するのに対し、雑種の主成分 **4** ではこの位置に酸素官能基を有しない。雑種において両親いずれとも異なる化合物の生産が見られたことは興味深い。

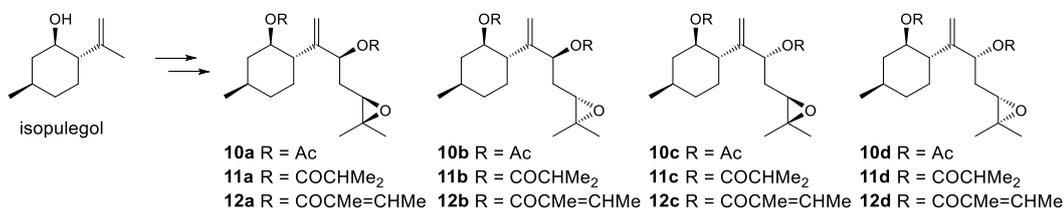
#### 4. 中国四川省産 *Ligularia anoleuca* と *Ligularia fischeri* の相同性<sup>3)</sup>

四川省標記種それぞれ数試料について成分分析を行った結果、両種の成分は互いに似ており、DNA塩基配列においても区別できないことが明らかとなった。化合物 **7**、**8** などを主成分として単離した。*L. fischeri* は、これまでフラノエレモフィラン生産種とされていたが、四川省産および重慶市産の一部に euparin (**9**) などのベンゾフランを生産する集団があることを見出した。フラノエレモフィラン生産種とベンゾフラン生産種は化学的に別系統である。

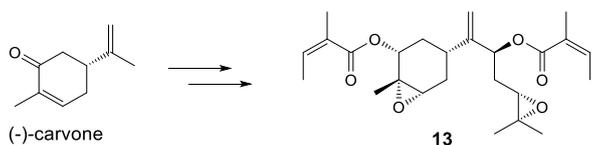


#### 5. ビサボラン化合物の構造決定を目指した合成研究<sup>4)</sup>

イソプレゴールを出発原料として、天然ビサボランのモデル化合物 **10a-d**、**11a-d**、および **12a-d** の合成を行った。これらの化合物のNMRスペクトルの解析を行い、立体構造との関係を考察した。



さらに、(-)-carvone から出発して天然物 **13** を合成した。これにより、天然ビサボラン化合物の相対および絶対立体配置が確定した。



文献

- 1) Shimizu, A. et al., *Chem. Biodiversity* **2016**, *13*, 837-844.
- 2) Shimizu, A. et al., *Chem. Biodiversity* **2014**, *11*, 1438-1448; Saito, Y. et al., *Phytochemistry* **2017**, *140*, 69-76.
- 3) Shimizu, A. et al., *Phytochemistry* **2014**, *102*, 137-144; Kuroda, C. et al., *Nat. Prod. Commun.* **2016**, *11*, 139-143.
- 4) Hirai, M. et al., *Helv. Chim. Acta* **2015**, *98*, 1035-1060.; Kobayashi, K. et al., *J. Org. Chem.* in press.

# 論理的分子設計に基づいたエネルギー変換錯体触媒の開発

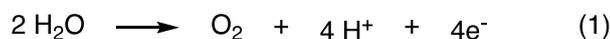
理学部化学科・和田 亨

E-mail: twada@rikkyo.ac.jp

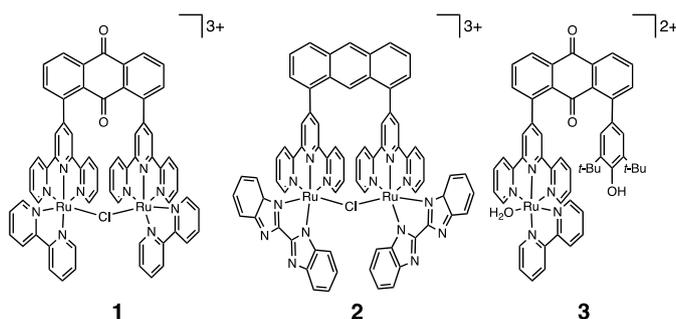
## 1. はじめに

現代社会は深刻なエネルギー・環境問題に直面している。これらを解決・緩和するためには自然エネルギーの有効活用が必要であるが、太陽光や風力は天候や地域に左右される非定常的なエネルギーである。自然界では、植物が光合成により太陽光のエネルギーを酸素と糖質といういつでも使える化学エネルギーへと変換している。好気性生物は酸素と糖質を摂取し、呼吸により生命維持に必要なエネルギーを得ている。呼吸で放出された二酸化炭素と水は、再び光合成に用いられる。自然界のような化学物質が循環するエネルギーサイクルを人工的に構築することが、エネルギー・環境問題に対する唯一の抜本的な解決策である。そのためには、基本となる水の四電子酸化反応、二酸化炭素還元反応、酸素還元反応などの電気化学的な半反応を、平衡電極電位近辺で効率よく触媒する物質の開発が不可欠である。そこで本研究では、水の四電子酸化反応、酸素還元反応、二酸化炭素還元反応に対して、合目的に精密設計した遷移金属錯体触媒の開発し、その反応機構について詳細に検討した。

## 2. 水の四電子酸化反応

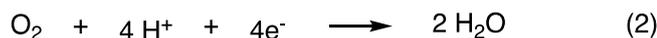


水の四電子酸化反応(式1)は、平衡電極電位が 1.23 V (vs. SCE, pH 0)と比較的高く、一度に四電子の移動を必要とするため、極めて困難な反応である。本研究では、アントラキノンで架橋した二核ルテニウム錯体 **1** が、 $(\text{NH}_4)_2[\text{Ce}(\text{NO}_3)_6]$ を酸化剤とした水の酸化反応を触媒することを明らかにした<sup>1</sup>。電気化学測定と分光測定を組み合わせ、反応機構に関する詳細な検討を行い、プロトン共役電子移動(PCET)反応により生成した $[\text{Ru}(\text{V})=\text{O} \text{O}=\text{Ru}(\text{IV})]^{5+}$ が、分子内カップリングによる酸素-酸素結合形成を経由し、酸素を発生していることを解明した。 $\text{Ru}(\text{V})=\text{O}$ 種の生成に最も大きなエネルギーを必要とするため、この二核錯体は水の酸化に強力な酸化剤を必要とする。そこで、より低電位での水の酸化を目指した新規錯体触媒の開発を行った<sup>2</sup>。その中でも、プロトン解離能を有する支持配位子ジベンズイミダゾール( $\text{H}_2\text{bimz}$ )を有する二核錯体 **2** は、pH7の水溶液中で錯体 **2** は、平衡電極電位に対して、わずか+40 mVほどの小さな過電圧で水の酸化を触媒

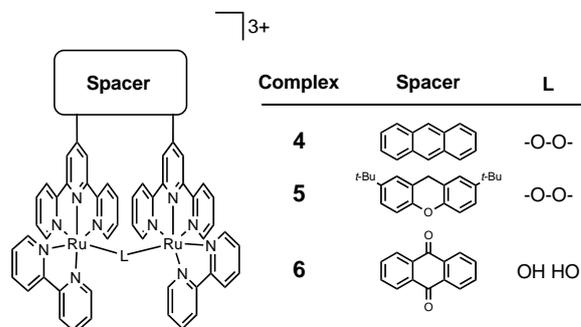


した。また、天然の光合成を模倣して分子内にフェノール部位を導入した錯体 **3** では、フェノール部位が酸化還元中心として働くことにより、効率的に水の酸化を触媒することが分かった。その他に、より安価な二核コバルト錯体での水の酸化にも成功した<sup>3</sup>。

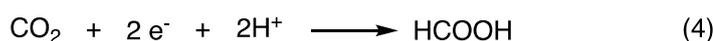
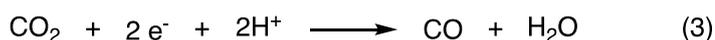
### 3. 酸素の四電子還元反応



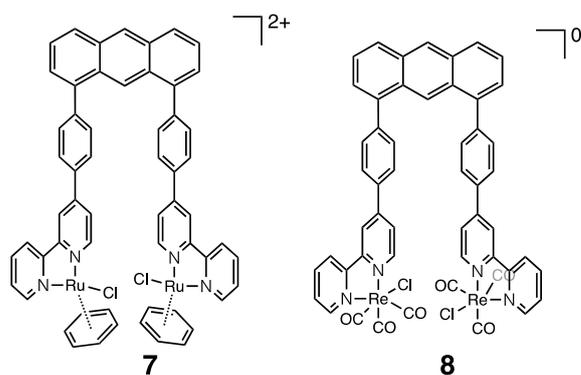
酸素の四電子還元反応(式2)は、好気性生物の呼吸の還元過程であるとともに、燃料電池のカソード反応でもあるため、エネルギー変換の観点からは最も重要な反応である。我々はこれまでにアントラセンで架橋した二核コバルト錯体 **4** が、酸素の四電子還元を効率的に触媒することを報告した<sup>3</sup>。本研究では、架橋部位をアントラセンから、キサントン、アントラキノンに換えた二核コバルト錯体(**5**, **6**)を合成し、架橋部位が反応にあたる影響について検討した。その結果、いずれの錯体も、二電子還元生成物である過酸化水素を副成することなく、酸素の四電子還元を触媒し、その反応速度は **5** > **6** > **4** であった。錯体に対してプロトンが付加する段階が律速段階であることも明らかになった。



### 4. 二酸化炭素還元反応



二酸化炭素の二電子還元による一酸化炭素とギ酸の生成については(式3と4)、ルテニウム錯体とレニウム錯体を触媒とする報告例が数多くされているが、四電子還元によるホルムアルデヒド生成や六電子還元によるメタノール生成を触媒する錯体の報告は皆無である。これらを実現するためには、二電子以上の多くの電子を錯体分子中に貯める必要があるため、多核錯体は有効だと考えられる。そこで、本研究ではビス(ピリリジルフェニル)アントラセンで架橋した二核ルテニウム錯体 **7**、二核レニウム錯体 **8** を合成した。電気化学測定から二酸化炭素還元に対して、単核錯体を上回る高い触媒活性を示すことが分



かった。現在、生成物の同定と反応選択性について検討中である。

#### 文献

- 1) Wada, T.; Nishimura, S.; Mochizuki, T.; Ando, T.; Miyazato, Y.; *Catalysts*, **2017**, *7*, 56.
- 2) Wada, T.; Hiraide, T.; Miyazato, Y. *Chem. Select*, **2016**, *1*, 3045-3048.
- 3) Ishizuka, T.; Watanabe, A.; Kotani, H.; Hong, D.; Satonaka, K.; Wada, T.; Shiota, T.; Yoshizawa, K.; Ohara, Y.; Yamaguchi, K.; Kato, S.; Fukuzumi, S.; Kojima, T. *Inorg. Chem.* **2016**, *55*, 1154-1164.
- 4) Wada, T.; Maki, H.; Imamoto, T.; Yuki, H.; Miyazato, Y. *Chem. Comm.* **2013**, *49*, 4394-4396.

# 流通式分離系を利用する化学特性解析

理学部化学科・宮部 寛志

E-mail: kmiyabe@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

流通式分離系(高速液体クロマトグラフィー(HPLC)やキャピラリー電気泳動(CE))を利用する化学特性(分子間相互作用や界面透過現象)の速度論的解析法を開発し、それを具体的実験系に適応してその妥当性を実証した。また、解析結果(速度定数)の妥当性を確認するため、速度定数の測定値を用いて数値計算法により求めた計算溶出曲線と実測溶出曲線を比較する計算化学的な方法を開発した。

## 2. HPLC を利用する分子間相互作用の解析法の開発

分子間相互作用の解析は、化学や生物学分野等における様々な現象や機能の特徴や機構を解明する上で重要な化学情報を提供する。このため各種解析法(表面プラズモン共鳴法等)が開発され、その一部は相互作用の速度論的解析(会合速度定数( $k_a$ )と解離速度定数( $k_d$ )の測定)にも利用されている。一方、HPLC系では、カラム内の物質移動抵抗や固定相表面における分子間相互作用(吸脱着や化学反応)速度の影響により溶出バンド幅が広がる。このため、バンド幅の広がりに対する物質移動過程の寄与を差し引けば、試料-固定相表面リガンド間における分子間相互作用の速度情報を解析することができる。

**2.1. モーメント式の開発と解析法の構築:** 分子間相互作用解析の基盤となるモーメント式を導出した。固定相表面のリガンドと試料分子間の相互作用速度が Langmuir 型の速度式で表わされる場合について、まずカラム内における試料物質の物質収支と物質移動速度を表わす基礎式をラプラス変換し、溶出ピークの全体像を表わす解析解をラプラス域で求めた。次に、この解析解から実時間域における溶出ピークの一次絶対モーメント( $\mu_1$ )と二次中央モーメント( $\mu_2'$ )を表わすモーメント式を導出した。これらの値から分子間相互作用の平衡情報(会合平衡定数)および速度情報( $k_a$ と $k_d$ )を求める解析法を構築した。

**2.2. 具体的実験系への適用:** 固定相として $\beta$ -臭素化シクロデキストリン(CD)修飾シリカゲル、移動相として水溶液(NaCl 0.2 M + 酢酸 1.1%)とアセトニトリルの混合溶液(90/10, v/v)を用いる光学異性体分離系を取り上げ、2-フェノキシプロピオン酸(PPA)のHPLC挙動を解析した。 $\beta$ -臭素化CD-PPA間の相互作用について会合平衡定数および $k_a$ と $k_d$ を求め、HPLCを利用する固定型リガンド-溶質分子間相互作用の解析法の妥当性を実証した。

### 3. CE を利用する分子間相互作用および界面透過現象の解析法の開発

上記の HPLC 法では、リガンドが固定相表面に固定化されているため遊離状態の分子間における本来の相互作用情報を得ることは原理的に不可能である。また、表面プラズモン共鳴法等の既往の解析法でも、実験データ測定の際には分子の固定化や化学修飾（蛍光標識化）が必要であり、分子間相互作用の解析結果に対するこれらの影響が懸念される。

そこで、アフィニティキャピラリー電気泳動（ACE）を利用する非固定型の遊離リガンド-溶質分子間相互作用の  $k_a$  と  $k_d$  を解析的に求める解析法を開発した。また、界面活性剤ミセル等を擬似固定相として利用する動電クロマトグラフィー（EKC）系の分離挙動を解析し、ミセル等の分子集合体界面における溶質の透過速度定数（集合体内部への透過： $k_{in}$ 、集合体内部から外部への透過： $k_{out}$ ）を求める速度解析法も開発した。

3.1. モーメント式の開発と解析法の構築： ACE 系および EKC 系のモーメント式を 2 つの全く異なるアプローチにより導出した。一方は拡散に関する Einstein 式とランダムウォークモデルを利用する方法であり、他方は Galilei の相対性原理に基づく方法である。後者の場合、検出器がキャピラリー内の溶質-リガンド会合体と同じ方向に同じ速度で移動する場合を想定して座標変換を行うと、実際には移動しているその会合体が変換後の座標系では見掛け上停止して見えることを利用する。相対性原理に基づくこの方法では、当該化学種の移動を理論的に（数学的に）停止させ、先ずこの変換後の座標系におけるモーメント式を導出する。その後、それを元の座標系へと逆変換することにより目的のモーメント式を求める。なお、上記の両アプローチにより開発したモーメント式は相互に一致し、またそれは他の研究者が異なる数学的処理により別に導出した式とも一致している。

3.2. 具体的実験系への適用： ACE 系の解析法により、チモール-硫酸化  $\beta$ -CD 系およびフルクトース-ボロン酸系の  $k_a$  と  $k_d$  を求めた。一方、EKC 系の解析法により、ドデシル硫酸ナトリウム（SDS）ミセルの界面における中性分子の透過速度を解析して  $k_{in}$  と  $k_{out}$  を求めた。CE 系を利用する非固定型の遊離リガンド-溶質間の分子間相互作用、および分子集合体（界面活性剤ミセル）の界面における透過現象解析法の妥当性を実証した。

### 4. クロマトグラフィック CE による分子間相互作用および界面透過現象の解析

ACE や EKC を利用する上記の解析法とは別に、クロマトグラフィック CE（CCE）法を開発した。CCE 操作では、CE 系に適切な方向と強度の外圧を印加し、試料-リガンド会合体やミセル等のキャピラリー軸方向の移動を実験的に停止させる。この時、キャピラリー内における溶質分子の物質移動挙動はクロマトグラフィー系のそれと類似した状態となる。CCE の導入によりモーメント式が簡易化され、速度定数の解析的な決定が容易になった。しかし、CE 装置性能の制限から、CCE 条件下で CE 実験を行うこと

は現実的には難しい。そこで、逆に外圧を積極的に変化させて測定した CE データを逐次近似法により解析する実用的な方法を開発し、CCE モードでの解析を可能にした。

まず、CCE 法により分子間相互作用および界面透過現象を解析するためのモーメント式を上記と同様の手順で開発した。次に、包接反応系におけるチモール-硫酸化  $\beta$ -CD 間の相互作用を CCE 法により解析し、 $k_a$  と  $k_d$  を求めた。また、SDS ミセル界面におけるチモール分子の透過現象を解析し、 $k_{in}$  と  $k_{out}$  を求めた。CCE 法が分子間相互作用および界面透過現象の速度解析法として有用であることを実証した。

## **5. 解析結果の妥当性の確認**

上記の各種方法による解析結果の妥当性を確認するため、計算化学的な方法を開発した。すなわち、速度定数の測定値に基づく数値計算法により計算溶出曲線を求め、これと実測溶出曲線を比較する。両溶出曲線の特性 ( $\mu_1$  と  $\mu_2$  等) が一致することを確認する。

# 高周期典型元素を含む機能性化合物の創製と反応開発

理学部化学科・箕浦 真生

E-mail: minoura@rikkyo.ac.jp

## ■超原子価有機テルル化合物の創製と反応開発

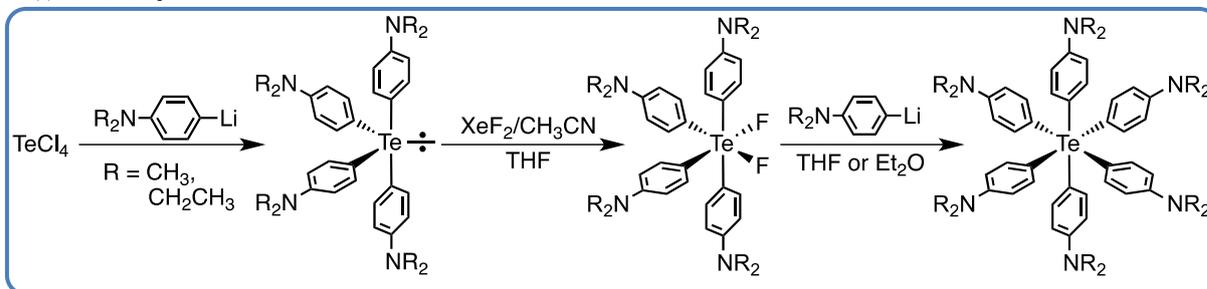
### 1. はじめに

高周期典型元素において、中心元素が形式的にオクテットを超える価電子をもつ、いわゆる超原子価化合物は、3中心4電子型の超原子価結合を有するとされ、一般に長く弱い結合に起因する構造と高い反応性を示すことが知られている。しかし、高い酸化状態を有する15族および16族有機元素化合物の性質解明と種々の酸化状態の変化に基づく高周期元素化合物の多様性の理解と系統的合成研究は十分に行われていない。その主な原因は、化合物の合成的困難さにあるとともに、特に電子供与性置換基を導入した系は高反応性でありその基本的性質は未解明である。我々はこれまでに、超原子価6価および4価有機テルル化合物  $\text{Ph}_6\text{Te}$  と  $\text{Ph}_4\text{Te}$  の独自合成法を確立し、これらの構造と性質を明らかにしてきた。

本研究では、独自の合成技術の新しい知見に基づき、とりわけ合成が困難とされている電子供与性置換基としてジアルキルアミノフェニル基を有する化合物群を合成し超原子価結合の電子状態を明らかにすることを目的とし、ジアルキルアミノフェニル基(以下 Ar)を有するテトラアリールテルルおよびヘキサアリールテルルの合成と性質の解明の検討を行った。

### 2. 4および6価超原子価有機テルル( $\text{Ar}_4\text{Te}$ 、 $\text{Ar}_6\text{Te}$ )の合成

各種合成条件を検討し、純粋なアリールリチウムを単離し供することで、中性4価  $\text{Ar}_4\text{Te}$  の合成単離に成功した。酸素・水等により容易に分解し、また微量の不純物の混入が分解を促進することも明らかとなった。合成単離した  $\text{Ar}_4\text{Te}$  は熱的にも高反応性であり、加熱により還元的脱離反応をおこし、定量的に  $\text{Ar}_2\text{Te}$  と  $\text{Ar}_2$  を与える事が明らかとなった。対応するジフルオロ体は、単離したテトラアリールテルル(IV)の二フッ化キセノンによる酸化的付加反応により合成し、無色の安定な固体として単離した。さらにジフルオロ体に二当量のアリールリチウムを反応させ、ヘキサアリールテルル(VI)を合成した。以上、初めての電子供与性置換基をもつ超原子価化合物の合成と結晶構造解析に成功した。



## ■トリプチル基を活用した立体保護基の開発と高反応性化学種への応用

### 1. はじめに

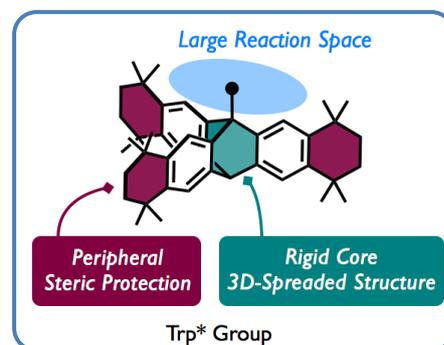
高周期典型元素化合物の化学は、嵩高い置換基を導入する速度論的安定化を用いて多

重結合（パイ結合）や低配位化合物の研究を中心に発展してきた。またそれと並んで、種々の特性をもつ嵩高い置換基そのものの開発も行われている。しかし、剛直な骨格を有し合成が容易である芳香環置換基がひろく用いられる一方で、嵩高いアルキル置換基により速度論的安定化をうけた高反応性高周期典型元素化合物は、合成例が限られており研究は立ち後れている。我々は、三次元的に広がった嵩高いアルキル置換基であるトリプチシル(Trp)基を活用し、高反応性化学種の合成に利用できる新規アルキル立体保護基の開発を目指した。トリプチシル骨格にさらに立体保護効果を付与するために、芳香環周辺を装飾した Trp\*基を設計・合成した。また、立体保護効果のみならず柔軟性を有し多重結合周りに反応空間を与えることが可能な Trp\*CH<sub>2</sub>基をデザインした。

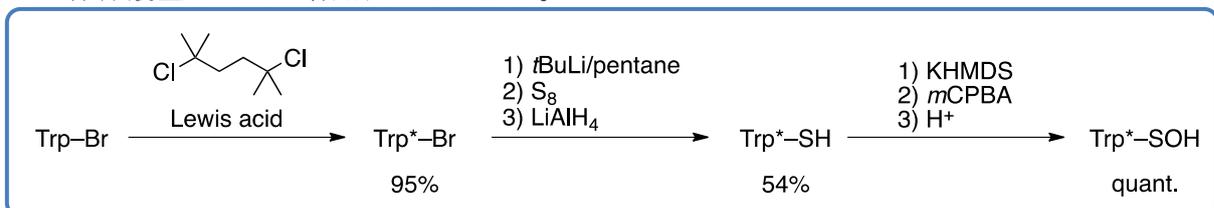
## 2. トリプチシル基を活用した嵩高い周縁立体保護基の開発とスルフェン酸の合成

トリプチセンは剛直で三次元に広がった構造を有することから、これまでも立体保護基

として活用され、種々の高反応性化学種の速度論的安定化へ応用されてきた。トリプチセン骨格にさらなる立体保護効果を付与することができれば、より汎用的に用いることが可能になると考えられる。そこで、3つの1,2,3,4-テトラヒドロ-1,1,4,4-テトラメチルナフタレンからなる縮環型アルキル基を導入した立体保護基(Trp\*基)を新たに設計・合成した。また、Trp\*基を用いて、生理活性官能基であり自己縮合過程が知られるスルフェン酸の安定化へ応用し、Trp\*基の立体保護能の評価を行った。



Trp\*-Br は9-トリプチシルブロミド(Trp-Br)に対してルイス酸触媒存在下、2,5-ジクロロ-2,5-ジメチルヘキサンを作用させると、高収率で得られることがわかった。これを *t*BuLi を用いてリチオ化後、硫黄と反応させたのち還元反応を行い対応するチオールを得た。また、発生させたチオラートの酸化反応に続くプロトン化により Trp\*基を有するスルフェン酸を無色結晶として定量的に合成・単離した。Trp\*-SOH は重ベンゼン中 80 °C で加熱しても全く分解せず熱的に非常に安定であることが明らかとなり、Trp\*基の立体保護基としての有用性が示された。

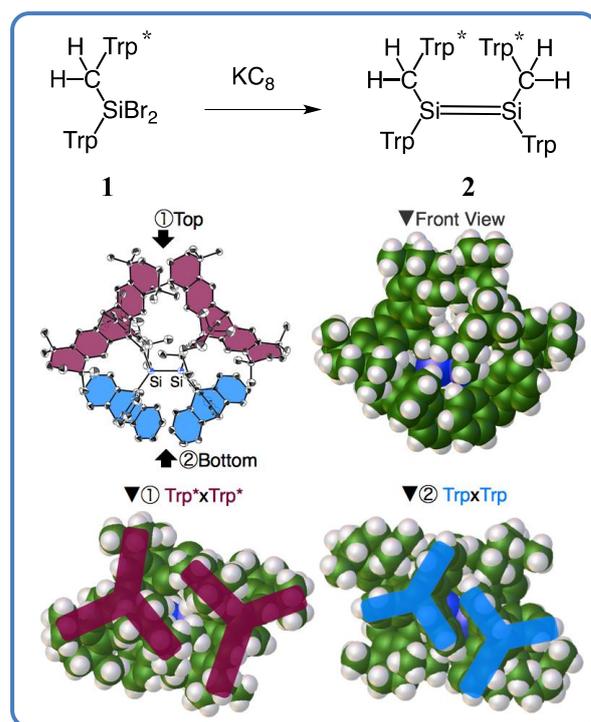


## 3. Trp\*CH<sub>2</sub> 骨格により立体的に保護されたテトラアルキルジシレン(R<sub>2</sub>Si=SiR<sub>2</sub>)の合成

嵩高く柔軟性のある置換基として開発したトリプチシル\*メチル(Trp\*CH<sub>2</sub>)基とトリプチシル基をケイ素上に導入したジプロモシラン **1** を設計、合成しジシレンの合成に用いた。

ジプロモシラン **1** を、カリウムグラファイト(KC<sub>8</sub>)を用いて還元すると、対応するジシレン **2** が高収率で得られた。X線結晶構造解析によってその構造を決定した。また、選択的にシス体のみが得られて

いることがわかった。ケイ素間結合長は 2.223(1) Å であり、一般的なケイ素-ケイ素二重結合長の範囲内(2.14~2.26 Å)であった。さらに、それぞれのトリプチシル骨格は歯車のように噛み合っており、この噛み合いにより CH<sub>2</sub>-Si=Si-CH<sub>2</sub> 部分が効果的に保護されていることが明らかになった。溶液中においても、ジシレン **2** は単一成分で観測され、トランス体への異性化反応は全く観測されなかった。ジシレン **2** は 300 °C 以上まで加熱しても分解せず、熱的に非常に安定であるが、空気中では容易に酸化されるため、トリプチシル\*メチル骨格により立体保護と反応空間の両方の供給ができていたことがわかった。



# 分光分析法によるキラル分子の物性および分子間相互作用の解析

理学部化学科・鈴木 望

E-mail: nsuzuki@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

分子間相互作用 ( $S+L\rightleftharpoons X$ ) の会合・解離速度定数 (それぞれ  $k_a$  と  $k_d$ ) を決定することは生体内におけるシグナル伝達スピードの解明や、薬物伝送システムの薬剤放出速度の評価のために重要である。従来の速度解析法として、表面プラズモン法などがあるが、測定対象を基板へ固定化の際に化学構造が変化してしまうという問題がある。本事業では宮部教授と共同で、分子を基板に固定する必要がないキャピラリー電

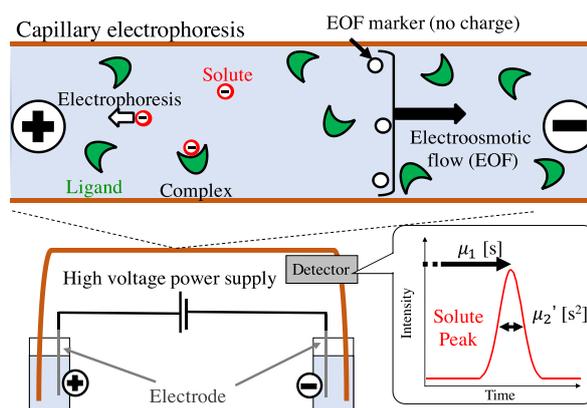


図1) キャピラリー電気泳動の模式図。

気泳動法を利用して会合・解離速度定数を決定する方法 (MA-ACE) を開発・発展させた。<sup>1)</sup> 国内外で広く使われてきた従来のアフィニティーキャピラリー電気泳動法 (ACE) では溶出ピークの「位置」の情報しか利用することができず、会合定数  $K_A$  しか得られなかった。MA-ACE ではピークの「分散」も解析することで会合速度定数  $k_a$  と解離速度定数  $k_d$  の情報を得ることが可能となった点に重要な意義がある。本方法ではピークの位置と分散にそれぞれ対応する  $\mu_1$  [s] と  $\mu_2'$  [s<sup>2</sup>] の情報 (図1) から分子間相互作用の速度定数を決定できる。ピークの分散には分子間相互作用の寄与の他に分子拡散、試料注入量、電圧を上昇させるのにかかる時間、ジュール熱、検出幅による寄与があるため、これらの影響を加味した方法論も明らかにしている。<sup>2)</sup> また、MA-ACE の理論から、分子間相互作用によって分散に違いがでることが予測されていた。実際に分散に違いがでることをキラル化合物間の相互作用を解析することで明らかにしている<sup>3)</sup>

## 2. $\mu_1$ の解析

ピークから算出した  $\mu_1$  を利用し、会合定数を求めるための数式を以下に示す。<sup>2)</sup>

$$\mu_1 = \frac{Z}{v_B} + \frac{t_{rp}}{2} = \frac{Z}{v_S + v_X K_A C_L} (1 + K_A C_L) + \frac{t_{rp}}{2} \quad (1)$$

添え字の S は試料パルスとして注入された溶質 (Solute)、L はキャピラリー内及び泳動液内に溶解しているリガンド (Ligand)、添え字の X は、溶質がリガンドと相互作用する事によって形成する複合体 (Complex) を指す。Z は試料注入口から検出器までの距離、

$v_B$  は試料バンドの移動速度、 $t_{rp}$  は電圧を上昇させるのに必要な時間、 $v_s$  と  $v_x$  は溶質と複合体の移動速度、 $K_A$  は会合平衡定数、 $C_L$  はリガンド濃度を意味する。種々の  $C_L$  における溶質の  $\mu_1$  を求め、本数式を用いることにより、未知変数の  $v_x$  や  $K_A$  を決定できる。本数式の原型も本事業で提案されたものである<sup>1)</sup>が当初は簡単のため  $t_{rp}=0$  と仮定していた。 $t_{rp}$  を考慮することによってより正確に  $v_x$  や  $K_A$  を決定できる様になった。<sup>2)</sup> $t_{rp}$  は次に述べる  $\mu_2'$  にも関連する要因であることも分かっている。

### 3. $\mu_2'$ の解析

溶質のピークの分散  $\mu_2'$  はガウス分布の場合、ピークの幅の二乗に比例する値である。この値は分子間相互作用  $\sigma'_{rk}{}^2$ 、分子拡散  $\sigma'_{diff}{}^2$ 、試料注入量  $\sigma'_{inj}{}^2$ 、検出器幅  $\sigma'_{det}{}^2$ 、ジュール熱  $\sigma'_{heat}{}^2$  などの和に比例する。

$$\mu_2' = (\sigma'_{rk}{}^2 + \sigma'_{diff}{}^2 + \sigma'_{inj}{}^2 + \sigma'_{det}{}^2 + \sigma'_{heat}{}^2) / v_B^2 \quad (2)$$

ジュール熱は電圧を上げすぎないことに注意すれば無視でき ( $\sigma'_{heat}{}^2 \sim 0$ )、検出幅については検出幅を  $W_{det}$  として  $\sigma'_{det}{}^2 = W_{det}^2 / 12$  の関係から算出できる。<sup>2)</sup>試料注入量の影響  $\sigma'_{inj}{}^2$  については、種々の注入時間で実験を行い、影響を見積もるか、面積値が多ければ試料注入量も多くなるという関係を利用してその大きさを見積もることができる。残るは分子間相互作用と分子拡散の影響である。それぞれ以下の数式で記述される。

$$\sigma'_{rk}{}^2 = \frac{2K_A C_L (v_s - v_x)^2}{k_d (1 + K_A C_L)^3} \left( \mu_1 - \frac{2t_{rp}}{3} \right) \quad (3)$$

$$\sigma'_{diff}{}^2 = \frac{2(D_{L,S} + D_{L,X} K_A C_L)}{(1 + K_A C_L)} \mu_1 \quad (4)$$

ただし、 $D_{L,S}$  や  $D_{L,X}$  はそれぞれ溶質と複合体の拡散係数である。 $D_{L,S}$  については  $C_L=0$  の条件で得られる溶質の  $\sigma'_{rk}{}^2$  が 0 であり、 $\sigma'_{diff}{}^2$  が  $2D_{L,S}\mu_1$  となることを利用して算出できる。溶質と複合体の化学式が分かれば、Wilke-Chang の式から  $D_{L,X}$  を求めることも可能である。数式(3)、(4)で未知の値は  $k_d$  のみになるため、 $k_d$  を算出できる。今回導出された数式から分子拡散は  $t_{rp}$  の影響を受けないが、分子間相互作用については、 $v_s$  や  $v_x$  が電圧に比例するため、 $t_{rp}$  の影響を受けることが明らかになった。<sup>2)</sup>

### 3. キラル分子の相互作用

本業績は未発表であるが、種々の要素を考慮した MA-ACE 法をフェノキシプロピオン酸 (PPA) とシクロデキストリン (CD) の相互作用に適用し、その妥当性の検証も行っている (図 1)。<sup>3)</sup> 数式 3 から分子間相互作用によって分散に違いがでることが予測されている。実際に分散が大きくなることもキラル化合物間 (PPA と CD 間) の分子間相互作用を解析することで明らかにしており、このことは理論の妥当性を支持するものである。

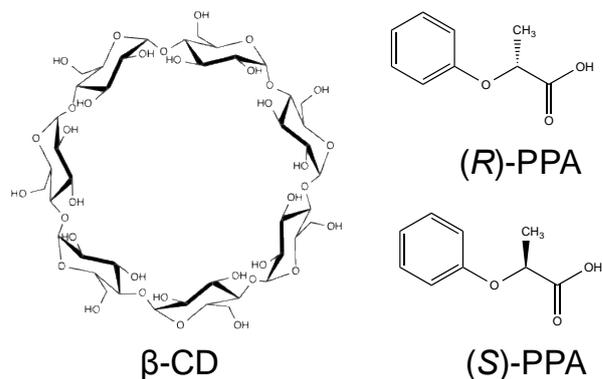


図 2) キラル化合物の化学式。

#### 文献

- 1) Miyabe, K., Suzuki, N. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2016**, *89*, 746-753.
- 2) Suzuki, N., Miyabe, K. *Anal. Chem.* **2017**, *89*, 10487-10495.
- 3) Suzuki N., M. Kinoshita, S. Watanabe, Miyabe K. *in preparation*.

# 分子性触媒を基盤とした高効率な光エネルギー変換反応系の構築

理学部化学科・中 藪 孝志

E-mail: tnakazono@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

近年、エネルギー問題、環境問題が深刻化する中、再生可能エネルギーに関する研究及び技術開発の必要性が増している。

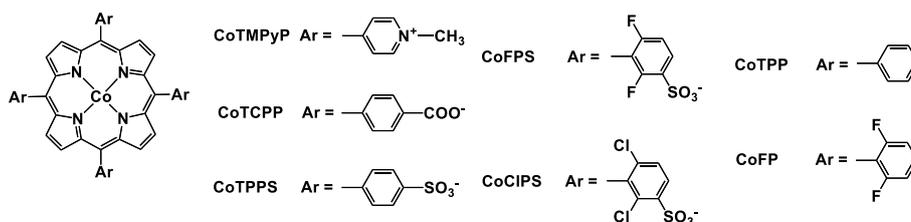


図1 コバルトポルフィリン錯体の構造

とりわけ人工光合成は太陽光エネルギーを用いて水素あるいは二酸化炭素の還元生成物を製造するエネルギー変換技術として注目されている。植物は光合成において、水を酸化 ( $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$ ) し、電子を取り出している。この反応を高効率に触媒するのが Oxygen Evolving Complex (OEC) と呼ばれるマンガン等からなる金属錯体である<sup>1)</sup>。水の4電子酸化反応を効率化は人工光合成の達成の最重要課題の一つであり、高活性な人口の触媒の開発が必要不可欠である。我々はこれまで、コバルトポルフィリン錯体(図1)に着眼し、その酸素発生触媒機能ならびに酸素発生反応中における耐久性制御に関する研究を行ってきた<sup>2),3)</sup>。その研究の中で、配位基に嵩高い置換基を導入することで、光酸素発生反応中における触媒分子の分解過程の抑制し、触媒活性および耐久性を飛躍的に向上させることに成功した<sup>4)</sup>。本研究ではコバルトポルフィリン錯体の酸素発生反応機構の解明および、新規錯体触媒の開発を行った。さらに光増感剤に  $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$  及び犠牲酸化試薬に  $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$  を用いた光酸素発生反応系(図2)への応用を目指し、新規酸素発生触媒の開発に取り組んだ。

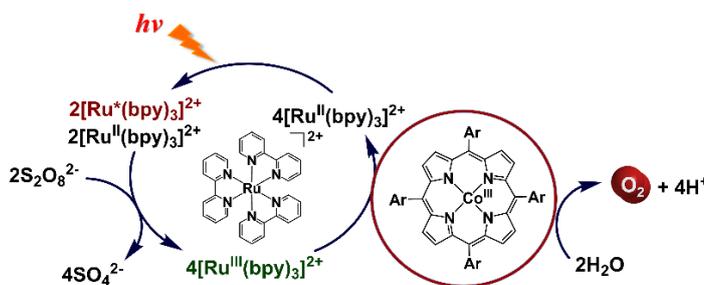


図2 光酸素発生触媒反応系

## 2. コバルトポルフィリン錯体の酸素発生反応機構の解明に関する研究

本課題では、コバルトポルフィリン **CoTPP** 及び **CoFP** (図1) 修飾電極を作成し、その電気化学的酸素発生触媒機能及びその酸素発生反応機構に関して研究を行った。コバルトポルフィリン修飾電極はキャスト法により、グラッシーカーボン、金及びITO電極

上に物理吸着させることによって作成した。これらの修飾電極は水溶液中で高い酸素発生反応に対して高い活性と安定性を示した。また、酸素発生反応中の電極表面のその場ラマン分光測定により、触媒反応中間体である  $\text{Co(III)=O}$  種及び、 $\text{Co(III)-OOH}$  種の生成を新たに確認することに成功した。それに加えて、分光電気化学測定及び酸素発生の  $\text{H}_2\text{O}$  または  $\text{D}_2\text{O}$  中での速度論的同位体効果を評価することにより、触媒反応の律速過程を明らかにするとともに、酸素発生反応機構の解明に成功した<sup>5)</sup>。

### 3. ルテニウムポルフィリン錯体触媒の光酸素発生触媒反応への応用及び新規触媒の合成

本課題では、より高活性な光酸素発生反応の実現を目的とした。そこで既存のコバルトポルフィリン錯体より高い活性と安定性を有すると期待されるルテニウムポルフィリン錯体に着目した。触媒反応の評価は主に **RuTPP** および **RuTPPS** (図3) に対して行った。その光物性および電気化学的触媒挙動を

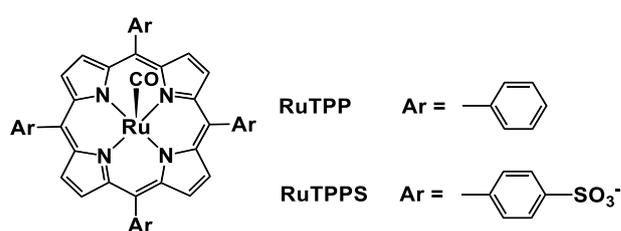


図3 ルテニウムポルフィリン錯体の構造

評価することにより光酸素発生反応への応用を検討した。さらに、酸素発生触媒と光増感剤を化学結合させ、分子内で電子移動を起こすことが可能な単一分子光酸素発生触媒の開発を行った。触媒部位 **RuTPP** と光増感剤部位  $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$  誘導体 (**PS**) を直接化学結合した単一分子光酸素発生触媒 **RuP-PS** の合成を行った (図4)。

まず、**RuTPP** の電極触媒としての活性を評価した。キャスト法によって **RuTPP** をITO電極に修飾し、修飾電極を用いたサイクリックボルタンメトリー測定を pH 9 のホウ酸緩衝液中で行った。その結果、0.9 V (vs. SCE)以上の電位で触媒電流の立ち上がりが見られ、高い触媒活性を有することが明らかとなった。また、**RuTPPS** は pH 8 以上の塩基性条件下において、光酸素発生触媒として活性を持つ事も明らかとした。さらに、単一分子光酸素発生触媒 **RuP-PS** を合成した (図4)。新規の非対称ポルフィリン **P-bpy** を合成した後、 $\text{cis-}[\text{RuCl}_2(\text{bpy})_2]$  と反応させ、**P-PS** を合成した。さらに、 $\text{Ru}_3(\text{CO})_{12}$  と反応させることで、ポルフィリン中心にルテニウムを配位させ、**RuP-PS** を合成することに成功した (図4)<sup>6)</sup>。

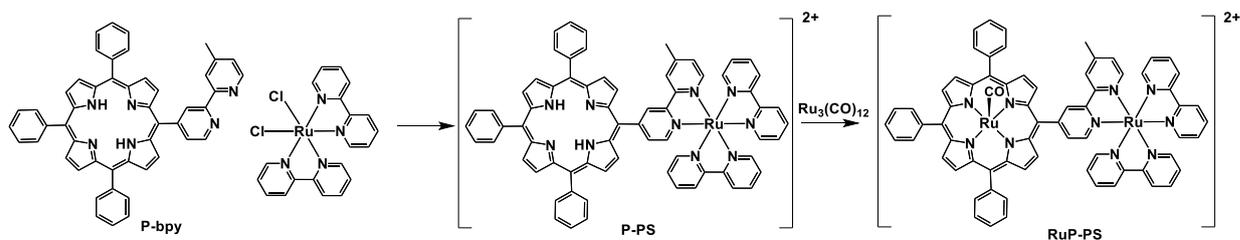


図4. **RuP-PS** の合成反応機構

【参考文献】

- 1) Umena, Y; Kawakami, K; Shen, J.-R.; Kamiya, N. *Nature*, **2011**, *473*, 55–60.
- 2) Nakazono, T.; Parent, A. R.; Sakai, K. *Chem. Commun.*, **2013**, *49*, 6325-6327.
- 3) Nakazono, T.; Parent, A. R.; Sakai, K. *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 6723-6726.
- 4) Nakazono, T.; Sakai, K. *Dalton Trans.*, **2016**, *45*, 12649-12652.
- 5) Nakazono, T.; Tse, E. C. M.; Wada, T.; Gewirth, A. A.; Sakai, K. *in preparation*.
- 6) Nakazono, T.; Yamada, M.; Wada, T. *in preparation*.

# 表面反応を利用した高機能触媒の開発

理学部化学科・枝元 一之

E-mail: edamoto@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

金属酸化物は、代表的な強相関系として物性科学的に最も重要な研究対象の一つであり、また光触媒、太陽電池等への応用的重要性からおびただしい量の研究が蓄積されている。最近、結晶表面上にエピタキシャル成長した酸化物超薄膜は、三次元結晶と異なる構造、物性を持つ場合があることが見出され、新たな機能材料として注目を集めている。本プロジェクトでは、高活性光触媒として注目されている二次元  $\text{TiO}_2$  薄膜を金属上に形成することを目指し、さらに学術的に興味深い  $\text{VO}_x$  薄膜の合成とその電子状態の解明を目指した。また、次世代水素化脱硫反応触媒として注目されている遷移金属リン化物薄膜表面の反応性の、リン偏析による制御を目指した研究を行った。

## 2. 二次元 $\text{TiO}_2$ 薄膜の合成

二次元  $\text{TiO}_2$  は、三次元結晶と異なる構造(lepdocrocite 型)を持ち、低次元化による量子収率の向上が期待されている。しかし、物性研究が可能なサイズの単結晶の合成は困難であり、光触媒作用のカギとなる電子状態の研究が進んでいない。本研究では、二次元  $\text{TiO}_2$  単結晶薄膜を、結晶の整合性の良い  $\text{Ag}(110)$  上にエピタキシャル的に合成することを目指した。

$\text{Ag}(110)$  上に  $5 \times 10^{-6}$  Torr の酸素雰囲気下で  $\text{Ti}$  を蒸着し、さらに  $500^\circ\text{C}$  で 30 分間加熱することにより、下地と  $(1 \times 1)$  周期で整合した  $\text{TiO}_2$  薄膜が合成できた。図 1 は、 $(1 \times 1)\text{TiO}_2$  薄膜に覆われた  $\text{Ag}(110)$  の LEED 像および PES スペクトルである。内殻 PES、および NEXAFS の結果より、薄膜はアナターゼ  $\text{TiO}_2$  に類似した構造を持つことが明らかとなった。しかしアナターゼ  $\text{TiO}_2$  は  $\text{Ag}(110)$  と整合する結晶面を持たず、以上の結果はアナターゼと構造が類似しつつ  $\text{Ag}(110)$  と  $(1 \times 1)$  で整合する lepdocrocite 型  $\text{TiO}_2$  が生成したことを示している。価電子帯 PES の測定より、 $(1 \times 1)\text{TiO}_2$  薄膜では低次元化によるバンド狭窄が起きていることが明らかとなった。

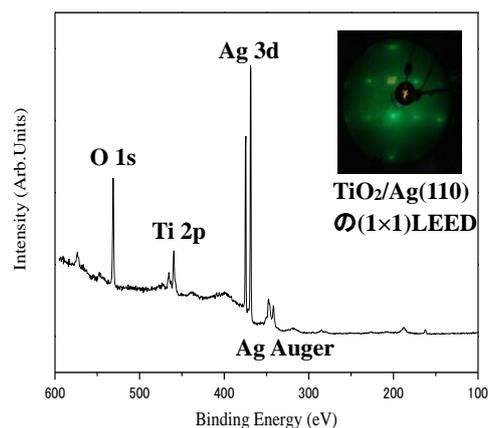


図 1.  $\text{Ag}(110)$  上に作成した  $(1 \times 1)\text{TiO}_2$  薄膜の PES および LEED。

### 3. V 酸化物薄膜の合成

Ag(100)上に酸素雰囲気下でV原子を蒸着することにより、酸化物薄膜を合成した。結晶性薄膜が得られる合成条件を探索した結果、それぞれ(1×1)、hexagonal、(4×1)のLEEDパターンを与える、少なくとも3種類の結晶性薄膜が作成しうることがわかった<sup>2)</sup>。これらの合成条件を、図2に示した。

このうち、hexagonalパターンを与える薄膜についてNEXAFS、PESによる解析を行い、これがV<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の組成を持つことがわかった。LEEDの解析より、この薄膜はコランダムV<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の(0001)面に同定できることが分かった。また、(1×1)薄膜については、VO(100)薄膜と同定された。バナジウム酸化物の電子状態については、MITの起源と密接に関連するため、これまで膨大な量の研究が行われてきた。その中において、VOのみは合成が難しく、特に分光学的研究が可能なサイズの単結晶は得られていないため、電子状態の実験的データはほとんど得られていない。また、MITに関しては、その転移温度はおろか、その存在自体が未解明である。今回、我々はAg(100)上に合成したVO(100)薄膜に対してPES測定を行い、少なくとも4.86 K以上においてMITは存在しないことを明らかとした。

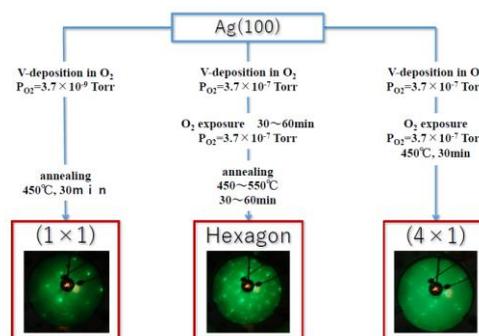


図2. Ag(100)上のVO<sub>x</sub>薄膜の作成条件。

### 4. Fe<sub>2</sub>P表面の電子状態

Fe<sub>2</sub>P(10-10)の価電子帯PES測定を行い、スペクトルはFe 3d-P 3p混成バンド(mainバンド)とサテライトからなり、それぞれ0-4 eVおよび5-8 eVに観測されることを見出した<sup>3)</sup>。

共鳴PES(図3)の測定より、Fe 3d準位はフェルミ準位近傍で高状態密度を持つことが見出された<sup>3)</sup>。Fe<sub>2</sub>P(0001)においても、ほぼ同様の結果が得られた<sup>4)</sup>。以上より、Fe<sub>2</sub>P表面のFeサイトにおいて電子状態は偏析P原子の影響をほとんど受けず、リガンド効果が有効でないことが分かった。これは、偏析P原子との結合によりNiサイトの安定化が起きるNi<sub>2</sub>P表面と対比的な結果である<sup>5)</sup>。Ni<sub>2</sub>Pの触媒活性はFe<sub>2</sub>Pより著しく高いことが知られており、以上の結果はリン化物触媒の活性が表面金属サイトの電子状態に支配されていることを示すものである。

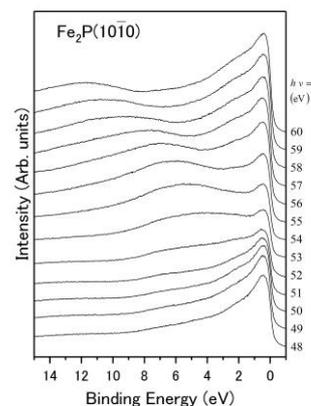


図3. Fe<sub>2</sub>P(10-10)の共鳴PESスペクトル。

文献

- 1) Sugizaki. Y.; Ozawa. K.; Edamoto. K. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2017**, *56*, 085501 1-5.
- 2) Nakamura. T.; Sugizaki. Y.; Ishida. S.; Edamoto. K.; Ozawa. K. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2016**, *55*, 075501 1-5.
- 3) Sugizaki. Y.; Motoyama. H.; Edamoto. K.; Ozawa. K. *Surf. Sci.* **2017**, *664*, 50-55.
- 4) Sugizaki. Y.; Ishida. S.; Kakefuda. Y.; Edamoto. K.; Matsunami. M.; Hajiri. T.; Kimura. S. *Surf. Sci.* **2014**, *624*, 21-24.
- 5) Ishida. S.; Sugizaki. Y.; Nakamura. T.; Edamoto. K.; Matsunami. M.; Hajiri. T.; Kimura. S. *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **2015**, *13*, 93-98.

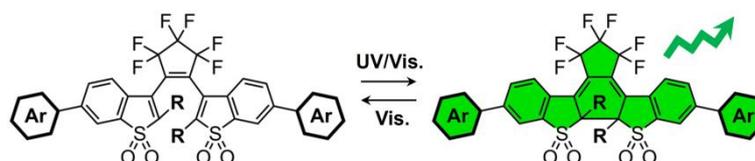
# 光スイッチ機能をもつ蛍光分子の設計と合成

理学部化学科・入江 正浩

E-mail: iriem@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

バイオイメージングとは、蛍光分子を生体分子にラベル化し、生体組織の微細構造、働き（機作）を可視化する技術のことを言う。もし、蛍光分子に、外部刺激により、あるいは外部環境に応じて蛍光が on/off する機能が付与されれば、より豊富な情報を与えるバイオイメージングが期待される。本研究では、光刺激により蛍光性を on/off するジアリールエテンフォトクロミック分子の機能設計の指針を確立するとともに、蛍光性ジアリールエテンを超解像バイオイメージングに応用できることを実証した<sup>1</sup>。



## 2. 置換基修飾による光開環反応量子収率の制御<sup>2,3</sup>

ビスベンゾチエニルエテンの硫黄原子をスルホン化し、反応点にエチル基を、また6,6'位に芳香族基を導入すると、紫外光照射により生成する閉環体が強い蛍光を示す。この分子の光開環反応量子収率は $\sim 10^{-4}$ であり、RESOLFT に用いるには一桁程度大きくすることが必須である。6,6'位フェニル基のオルト位にメチル基あるいはフルオロ基を導入することにより、ベンゾチオフェン環との $\pi$ 共役が制限され、光開環反応量子収率は一桁程度向上し、なおかつ蛍光量子収率は大きく低下することのないことが認められた。また、反応点炭素にイソブチル基を導入することによっても光開環反応量子収率が增大することを見出した。

## 3. 可視光に応答するフォトクロミック分子の設計と合成<sup>4,5</sup>

フォトクロミック分子をバイオイメージングに用いるには、生体の侵襲を防ぐために、可視光で可逆的にスイッチすることが求められる。蛍光性ジアリールエテンに可視光応答性を付与するために、従来の分子のヘキサフルオロシクロペンテンをジシアノエテンで置き換えた分子を合成した。この分子の開環体の吸収端は460 nm 付近までのびており、405 nm 光の照射により閉環反応が起こり、蛍光性の閉環体が生成した。また、反応点にペリレンを有するジアリールエテンが560 nm 光により閉環反応を、405 nm 光により開環反応を示し、どちらの反応も90%以上の変換率で進行することが認められた。可視光応答フォトクロミック分子の新しい設計指針を提示することができた。

#### 4. 単一波長可視光照射による蛍光スイッチング<sup>6,7</sup>

蛍光性ジアリールエテン開環体の 0-0 遷移吸収帯よりも長波長の可視光 ( $420 \text{ nm} < \lambda < 470 \text{ nm}$ ) を照射することで蛍光性の閉環体が生成する現象を見出した。この現象について詳細に検討した結果、この長波長域においても振動励起に伴う吸光係数が  $1 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$  以下の弱い吸収帯 (hot bands) が存在し、その光励起により閉環反応が進行することが明らかとなった。この現象により、単一の可視レーザー光を照射するだけでジアリールエテン分子一つ一つの蛍光スイッチングが可能となり、PALM/STORM 超解像顕微鏡への応用に成功している。

#### 5. 蛍光性ジアリールエテンを用いた超解像バイオイメージング<sup>8,9</sup>

超解像バイオイメージングへの応用に向けて、8つのカルボキシル基を有する蛍光性ジアリールエテン **1** を合成した。**1** はリン酸緩衝生理食塩水 (PBS; pH 7.4) 中において良好な蛍光スイッチングを示した。**1** の光開環反応量子収率は  $2.0 \times 10^{-3}$  と比較的大きく、RESOLFT に適している。**1** でラベルした二次抗体を用いて Vero 細胞の RESOLFT 超解像イメージングを行った。RESOLFT により半値全幅約 75 nm の空間分解能が達成され、 $\alpha$ -tubulin の微細構造が明瞭に観測された (図 1)。また、末端にメトキシ基を有する蛍光性ジアリールエテン **2** の光開環反応量子収率は  $1.3 \times 10^{-4}$  と小さく、単一分子局在化法に基づく STORM 超解像蛍光イメージングに適している。紫外光を照射することなく 488 nm 光を照射するだけで **2** の蛍光スイッチングが観測され、Vero 細胞の STORM 画像が得られた (図 2)。

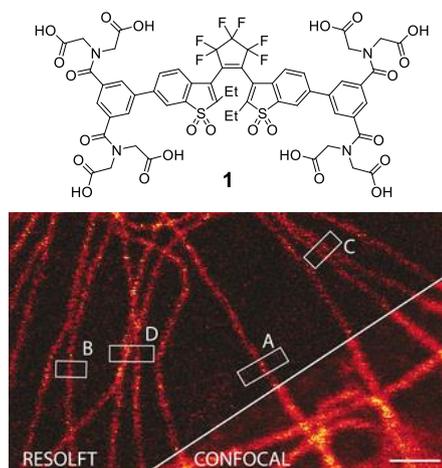


図 1 ジアリールエテン **1** を用いた Vero 細胞の RESOLFT 超解像蛍光イメージ (Scale bar: 1  $\mu\text{m}$ )

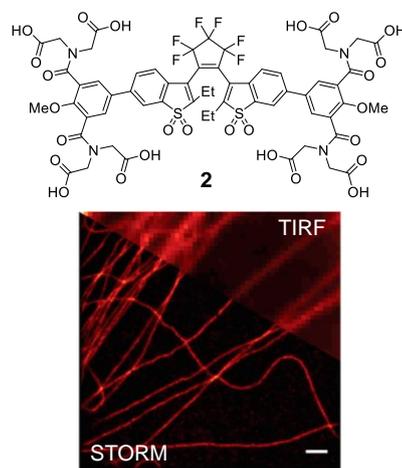


図 2 ジアリールエテン **2** を用いた Vero 細胞の STORM 超解像蛍光イメージ (Scale bar: 1  $\mu\text{m}$ )

文献 (1) Irie, M.; Morimoto, M. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2018**, in press (DOI: 10.1246/bcsj.20170365). (2) Takagi, Y.; Morimoto, M.; Kashiwara, R.; Fujinami, S.; Ito, S.; Miyasaka, H.; Irie, M. *Tetrahedron* **2017**, *73*, 4918-4924. (3) Morimoto, M.; Sumi, T.; Irie, M. *Materials* **2017**, *10*, 1021. (4) Sumi, T.; Kaburagi, T.; Morimoto, M.; Une, K.; Sotome, H.; Ito,

S.; Miyasaka, H.; Irie, M. *Org. Lett.* **2015**, *17*, 4802-4805. (5) [Fukaminato](#), T.; [Hirose](#), T.; [Doi](#), T.; [Hazama](#), M.; [Matsuda](#), K.; [Irie](#), M. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 17145-17154. (6) Kashihara, R.; Morimoto, M.; Ito, S.; Miyasaka, H.; Irie, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 16498-16501. (7) Arai, Y.; Ito, S.; Fujita, H.; Yoneda, Y.; Kaji, T.; Takei, S.; Kashihara, R.; Morimoto, M.; Irie, M.; Miyasaka, H. *Chem. Commun.* **2017**, *137*, 214-220. (8) Roubinet, B.; Bossi, M. L.; Alt, P.; Leutenegger, M.; Shojaei, H.; Schnorrenberg, S.; Nizamov, S.; Irie, M.; Belov, V. N.; Hell, S. W. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 15429-15433. (9) Roubinet, B.; Weber, M.; Shojaei, H.; Bates, M.; Bossi, M. L.; Belov, V. N.; Irie, M.; Hell, S. W. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 6611-6620.

# 外部刺激応答性を持つ金属錯体分子・結晶の設計・構築と機能評価

理学部化学科・松下 信之

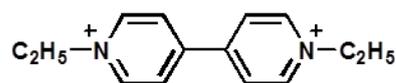
E-mail: cnmatsu@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

配位構造と物性の相関が高い物質群である遷移金属錯体は、外部刺激によって配位構造に変化をもたらせば、配位子場を通して電子物性、機能を変化、制御できる系を構築できると期待させる。このような視点から、遷移金属錯体分子に分子間相互作用を働かせることにより、光、温度、ガス等の外部刺激に応答する物性の創出を目指している。本プロジェクトでは、電子アクセプター有機分子との組合せで、金属錯体分子を電子ドナーとして機能させ、分子間相互作用に電荷移動相互作用を導入する設計戦略のもと、外部刺激応答性を有する新規金属錯体分子性物質の構築を目指した。

## 2. ジエチルピオロゲン塩の結晶構造と発光特性に関する成果

有機アクセプターカチオンにジエチルピオロゲン、金属錯体イオンにテトラシアニド金属(II)酸イオン ( $[M(CN)_4]^{2-}$ ;  $M = Ni, Pd, Pt$ ) を用いて構成した各種塩の構築と結晶構造決定、発光特性測定と解析を行った。



ジエチルピオロゲン( $EV^{2+}$ )

(1)  $EV[Ni(CN)_4]$ 塩  $K_2[Ni(CN)_4]$ 水溶液とジエチルピオロゲンの臭化物  $EVBr_2$ 水溶液を混合して、黄色針状結晶を得た。固体拡散反射スペクトルでは、孤立した状態の構成要素の  $[Ni(CN)_4]^{2-}$  や  $EV^{2+}$  には見られない、電荷移動遷移に帰属できる新たな吸収帯 (吸収の立ち上がり: 450 nm 付近) が現れていることを確かめた。しかしながら、電荷移動相互作用が確かめられたが、Pd 塩、Pt 塩とは異なり発光は確認できなかった。単結晶 X 線構造解析の結果、図 1 に示す通り、結晶水を含んだ五水塩結晶、 $(EV)[Ni(CN)_4] \cdot 5H_2O$  であることがわかった。

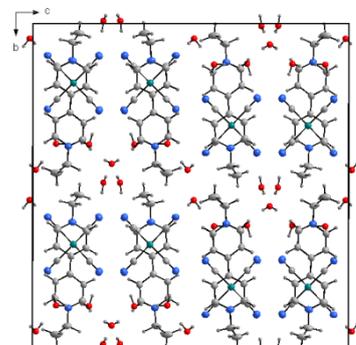


図 1.  $(EV)[Ni(CN)_4] \cdot 5H_2O$  の結晶構造

(2)  $EV[Pd(CN)_4]$ 塩  $K_2[Pd(CN)_4]$ 水溶液とジエチルピオロゲンの臭化物  $EVBr_2$ 水溶液を混合して、無色針状結晶を得た。この結晶は図 2 に示すように、365 nm 紫外光照射下、青色発光することが確かめられた。

り、回折パターンが一致することから、同形構造をとることがわかった。



図 2.  $(EV)[Pd(CN)_4] \cdot 5H_2O$  結晶の 365 nm 紫外光照射下の発光の様子

粉末 X 線回折測定よる  $(EV)[Ni(CN)_4] \cdot 5H_2O$  と  $(EV)[Pd(CN)_4] \cdot 5H_2O$

(3)  $\text{EV}[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  塩  $\text{K}_2[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  水溶液とジエチルピオロゲンの臭化物  $\text{EVBr}_2$  水溶液を混合して、無色針状結晶を得た。この結晶は図 3 に示すように、365 nm 紫外光照射下、黄色発光することが確かめられた。この結晶は、単結晶 X 線構造解析の結果、Ni 錯体塩、Pd 錯体塩と同形構造の、結晶水を含んだ五水塩結晶、 $(\text{EV})[\text{Pt}(\text{CN})_4] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  であることがわかった。

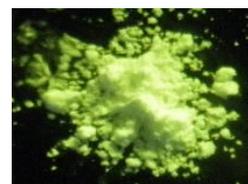
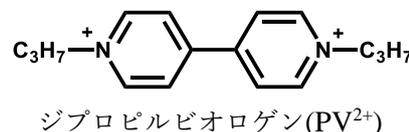


図 3.  $(\text{EV})[\text{Pt}(\text{CN})_4] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  結晶の 365 nm 紫外光照射下の発光の様子

3 種の塩は同形構造をとるいずれも電荷移動塩にもかかわらず、発光の有無、発光色の違いがみられ、金属の違いにより発光を制御できることが明らかとなった。

### 3. ジプロピルピオロゲン塩の結晶構造と発光特性についての成果

有機アクセプターカチオンにジプロピルピオロゲンイオン、金属錯体ドナーにテトラシアニド白金酸イオン ( $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$ ) を用いて構成した新規電荷移動塩を構築し、結晶構造決定、発光特性などの物性調査を実施した。この錯体ドナーと有機アクセプターの組合せの塩には、湿度に依存して、無発光相と色の異なる発光相 2 相の計 3 相が存在することがわかり、それぞれの結晶構造と発光特性、相間の変化の詳細を明らかにした。



(1)  $\text{PV}[\text{Pt}(\text{CN})_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (Wet 相) ジプロピルピオロゲン臭化物  $(\text{PV})\text{Br}_2$  水溶液と  $\text{K}_2[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  水溶液を混合して、無色矩形結晶を得た。紫外光 (365 nm) 照射下、黄色発光する (図 4)。単結晶 X 線構造解析の結果 (図 5)、結晶中には結晶水を含んでおり六水塩結晶、 $(\text{PV})[\text{Pt}(\text{CN})_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  であることがわかった。



図 4.  $(\text{PV})[\text{Pt}(\text{CN})_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  結晶の (a) 室内灯下と (b) 紫外

図 6.  $(\text{PV})[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  結晶の紫外光

(2)  $\text{PV}[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  (Dry-1 相) Wet 相を室温で乾燥条件下におくと結晶相が変化し、発光色も水色へと変化した。合成した試料を有機溶媒にて再結晶することにより、水色発光相の単結晶 (相変化させた粉末試料と PXRD 一致) が得られ (図 6)、結晶構造 (図 7) は、無水塩相の  $(\text{PV})[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  であった。この相は水蒸気に暴露すると Wet 相に戻り、発光のベイポクロミズムを発現した。

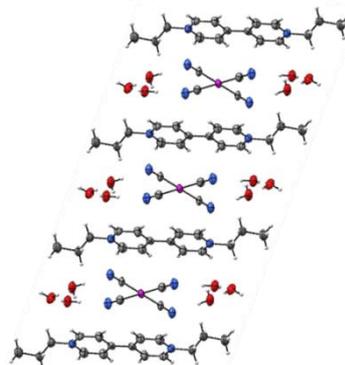


図 5.  $(\text{PV})[\text{Pt}(\text{CN})_4] \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

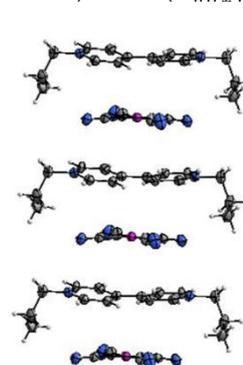


図 7.  $(\text{PV})[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  構造

(3)  $\text{PV}[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  (Dry-2 相) 一方、Wet 相を加熱乾燥すると、

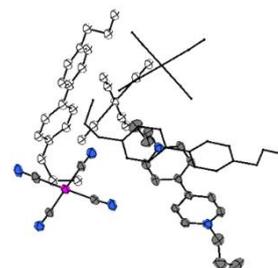


図 8.  $(\text{PV})[\text{Pt}(\text{CN})_4]$  (Dry-2 相) の結晶構

無発光の結晶相に変化した。この相も有機溶媒から析出条件を変えた再結晶で単結晶を得ることができた。Dry-1 相同様，無水塩(PV)[Pt(CN)<sub>4</sub>]で，結晶構造（図 7）は他の 2 相と異なり，カラム構造をとっていなかった。

多形，擬多形の関係にある 3 種のテトラシアニド白金(II)酸ジプロピルピオロゲン塩は，電子ドナー・アクセプターが同じ組み合わせでも発光の有無や，発光色が異なること，すなわち，分子間ドナー・アクセプター電荷移動相互作用が異なることを示している。この分子間電荷移動相互作用に基づく発光特性の制御には，結晶構造のデザインが重要な因子であることを明らかにすることができた。

# 結晶構造制御に基づく光機能分子結晶の創製

理学部化学科・森本 正和

E-mail: m-morimoto@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

分子結晶の反応や物性は、構成分子の化学構造だけでなく結晶構造（結晶中での分子立体配座や分子配列様式など）にも強く依存するため、分子結晶の新しい機能を創出するにはこれらの相関を明らかにする必要がある。本研究では、適切な分子設計により結晶構造と機能を制御するための指針を見だし、それに基づき新しい光機能分子結晶を創製することを目的とした。フォトクロミック分子を中心として、非共有結合性相互作用の適用、あるいは異種分子との混晶や共結晶の形成により結晶構造を構築し、フォトクロミック分子の光異性化反応に伴う電子構造変化あるいは立体構造変化を反映した光応答機能の創出を目指した。

## 2. フォトクロミック分子とキラル分子からなる水素結合性二成分結晶の不斉光反応

ピリジル基を有するジアリールエテンとキラルな(R)-1,1'-ビ-2-ナフトールを混合して再結晶すると、分子間 O-H $\cdots$ N 型水素結合による一次元鎖構造を含む結晶が得られた(図1)<sup>1</sup>。この結晶において、すべてのジアリールエテン分子のヘキサトリエン部位は P-helix 構造に固定されており、紫外光照射によりジアリールエテン分子の不斉選択的な光閉環反応が起こった。結晶構造と立体選択性の制御における分子間水素結合の有用性を見出した。

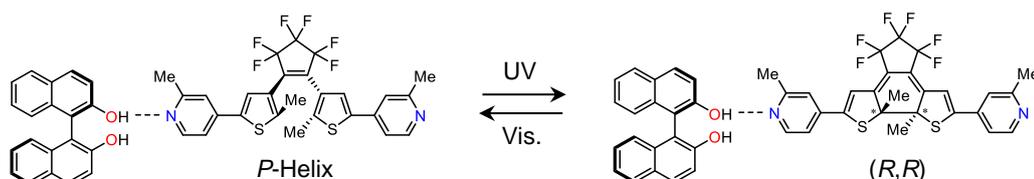


図1 ピリジル基を有するジアリールエテンとピナフトールからなる二成分結晶における光異性化反応

## 3. フォトクロミック分子結晶の蛍光スイッチング

ベンゾチオフェン S,S-ジオキシドを有するジアリールエテンが単結晶状態においてフォトクロミズムとともに turn-on 型蛍光スイッチングを示すことを見出した(図2)<sup>2</sup>。結晶に対してパターン化した光を照射すると、光照射された領域で光異性化反応が起こり、結晶内部に文字を書き込むことができた。光により蛍光情報の書き換えが可能な分子結晶は光メモリやディスプレイとしての機能を示す可能性がある。また、ベンゾホルホル基を有するジアリールエテン誘導体を新規に合成し、溶液中でフォトクロミズムと蛍光スイッチングを示すこと、また固体状態で蛍光量子収率が增大することを見出した(図3)<sup>3,4</sup>。

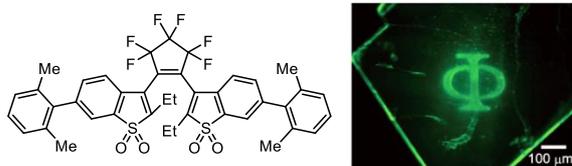


図2 ジアリーレエテン単結晶の蛍光スイッチング

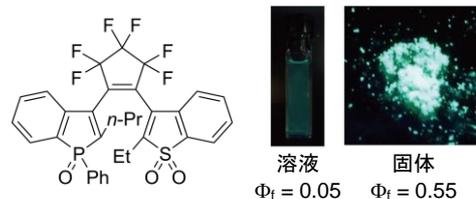


図3 ベンゾホスホル基を有するジアリールエテンの固体状態における蛍光増強  
 $\Phi_f = 0.05$      $\Phi_f = 0.55$

#### 4. フォトクロミック分子結晶のフォトメカニカル機能

応答波長の異なるジチアゾリルエテンとジチエニルエテンからなる二成分混晶について、照射する光の波長を変えることによる二成分の選択的異性化反応を反映した屈曲変形が観測された(図4)<sup>5</sup>。この変形を解析した結果、光誘起結晶変形において隣接分子同士の協同効果の寄与は小さく、個々の分子が光異性化反応によってそれぞれ独立に変形ひずみを起こすことで屈曲変形が起こることが示唆された。また、光照射により破裂やジャンプなどの動き(フォトサリエント効果)を示すフォトクロミック分子結晶の光誘起結晶格子変形をX線構造解析により明らかにした(龍谷大学内田欣吾教授との共同研究)<sup>6,7</sup>。

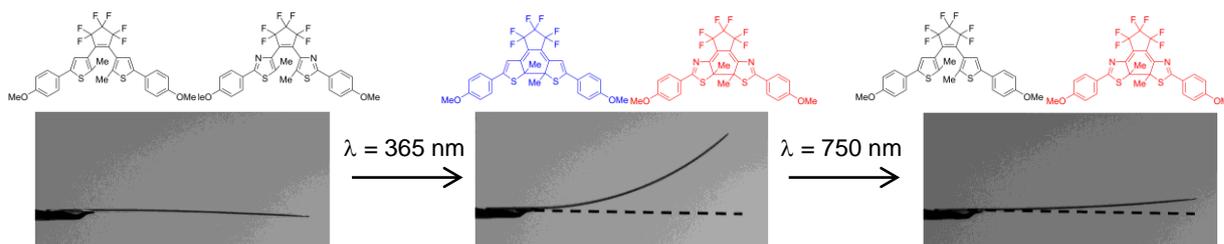


図4 二成分混晶の光誘起屈曲変形

#### 5. イミダゾールを有する水素結合性フォトクロミック分子結晶の合成

誘電物性の光制御を目指して、水素結合部位としてイミダゾールを、光反応部位としてジアリールエテン骨格を採用し、これらを融合した水素結合性フォトクロミック分子を設計・合成した。多くの誘導体は結晶中において分子間 N-H...N 型水素結合により一次元鎖構造を形成し(図5)、またフォトクロミズムを示した。一部の結晶は分子間プロトン移動に由来する誘電応答を示した。誘電応答の有無は結晶構造の対称性に依存することが分かった。水素結合性フォトクロミック分子を用いることで、プロトン移動に由来する誘電応答と光化学反応性とを併せもつ結晶を構築できることが分かった。

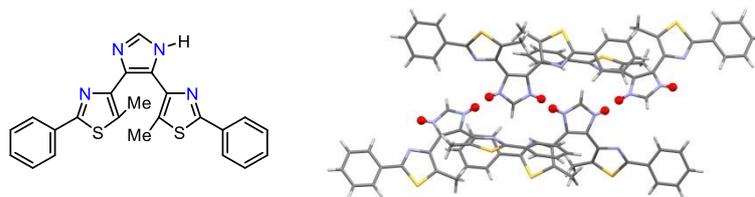


図5 水素結合性フォトクロミック分子結晶の結晶構造

文献

- (1) Ichikawa, T.; Morimoto, M.; Irie, M. *Photochem. Photobiol. Sci.* **2014**, *13*, 199-204. (2) Morimoto, M.; Kashihara, R.; Mutoh, K.; Kobayashi, Y.; Abe, J.; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; Irie, M. *CrystEngComm* **2016**, *18*, 7241-7248. (3) Ichikawa, T.; Morimoto, M.; Sotome, H.; Ito, S.; Miyasaka, H.; Irie, M. *Dyes Pigm.* **2016**, *126*, 186-193. (4) Ichikawa, T.; Morimoto, M.; Irie, M. *Dyes Pigm.* **2017**, *137*, 214-220. (5) Ohshima, S.; Morimoto, M.; Irie, M. *Chem. Sci.* **2015**, *6*, 5746-5752. (6) Hatano, E.; Morimoto, M.; Hyodo, K.; Yasuda, N.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 12680-12683. (7) Hatano, E.; Morimoto, M.; Imai, T.; Hyodo, K.; Fujimoto, A.; Nishimura, R.; Sekine, A.; Yasuda, N.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 12576-12580.

# 高分子系機能材料の創出と機能発現メカニズムの解明

理学部化学科・大山 秀子 (E-mail: hideko-oyama@rikkyo.ac.jp)

## 1. はじめに

本プロジェクトでは異種高分子を用いたアロイ化・ブレンド化や無機物質とのコンポジット化などの手法により、高性能・高機能な新規高分子材料の創出を目指す。異種物質が接する「界面」における相互作用や反応に注目しつつ、主に①ポリ乳酸、②ポリプロピレン、③エンジニアリングプラスチックを対象に研究を行った。

## 2. 高分子系機能材料

### 2-1. 環境低負荷材料であるポリ乳酸(PLA)の高性能化・高機能化

#### ステレオコンプレックス結晶を有するポリ乳酸 (PLA) アロイ

PLA は植物由来の樹脂であり再生可能な持続性材料として期待されているが、その脆弱性と耐熱性の低さが問題であった。本研究では PLA の L 体、D 体、そしてエチレン-メチルアクリレート-グリシジルメタクリレートランダム共重合体(EMA-GMA)の 3 成分系アロイを創出し、EMA-GMA との界面反応で脆弱性の克服を、ステレオコンプレックス(sc)生成にて耐熱性の向上を達成した。[1] 本研究が sc-PLA アロイの初めての報告例となった。

#### 水誘起型易崩壊性ポリ乳酸 (PLA) ブレンド

ポリ(L 乳酸)(PLLA)は生体適合性・生分解性を有するが分解が非常に遅いため徐放性製剤や再生医療の用途として用いるには限界があった。そこで、当研究室ではポリ(アスパラ銀酸-L 乳酸)(PAL)、またはポリ(リンゴ酸-L 乳酸)(PML)を PLLA に添加して、40°C、pH7.4 の緩衝液中における加水分解挙動を検討した。その結果、ブレンド化により著しく分解速度が促進し[2,3]、さらに高次構造が加水分解にも影響を及ぼすことを見出した。[4]

#### 熱誘起相分離法によるポリ乳酸 (PLA) モノリスの創出

ポリ乳酸の鏡像異性体を用いて熱誘起相分離法にてステレオコンプレックス(sc)-PLA の多孔質体を創出した。[5] 多孔質体は鏡像異性体の組成により構造が変化し、耐熱性だけでなく耐薬品性も向上する事が示された。

### 2-2. ポリプロピレン(PP)の高性能化・高機能化

#### ポリプロピレン(PP)／異なる 2 価の金属種と Al から成る層状複水酸化物(LDH)系コンポジットの作製と熱特性

ポリプロピレン(PP)は最も使用されている樹脂であるが易燃焼性であることが大きな欠点とされている。本研究では異なる 2 価と 3 価の金属種から成る層状複水酸化物(LDH)を合成して、PP とのコンポジット化を図り難燃化の効果を検証した。その結果、空気中での熱重量分析装置(TGA)において PP と合成した LDH の最大重量減少温度が近

いほど、コーンカロリメーター法による燃焼試験で PP コンポジットが高難燃性を示すことを見出した。

### ポリプロピレン(PP)/ポリ(エーテルスルホン)(PES)系アロイ

これまで PP と最も耐熱性の高いスーパーエンジニアリングプラスチックとのブレンドまたはアロイの報告例はない。本プロジェクトではグリシジルメタクリレート(GMA)で変性した PP(mPP)存在下で、PP とスーパーエンジニアリングプラスチックであるポリ(エーテルスルホン)(PES)のアロイを創出した。その結果、mPP と PES 間の界面反応で生成した mPP-PES 共重合体が溶融混練中に界面から引き抜かれ、粒径 30nm のナノミセル（ミセルの核は粒径 10nm の PES）を形成することが観察された。さらにこのナノミセルは耐熱性向上に大きく貢献する事が示された。[6]

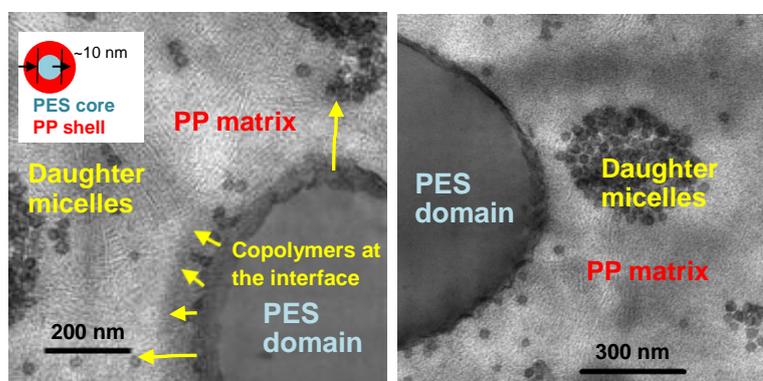


Fig. 1 Scanning transmission electron micrographs of (70/10/20) PP/mPP/PES stained by RuO<sub>4</sub>.

### 2-3. 耐熱性に優れたエンジニアリングプラスチックのさらなる高機能化：PPS/PPSU

結晶性スーパーエンジニアリングプラスチックの一つであるポリフェニレンスルフィド(PPS)と非晶性スーパーエンジニアリングプラスチックであるポリフェニルスルホン(PPSU)のブレンドについて検討を行った。その結果、両ポリマーは非相溶性で相分離するが、部分相溶性を有することが分かった。さらにその部分相溶性は、耐衝撃性と引張試験における破断伸度を著しく上昇させることを見出した。PPSU は新規な高分子材料であるので、そのブレンドについての報告例はほとんどなく、耐熱性だけでなく耐衝撃性に優れた PPSU の持つ有用性がこの研究によっても改めて確認された。[7]

### 3. まとめ

以上、多成分系高分子材料の生成法-構造-物性の相関を明らかにしながら、様々な高分子系において高性能化・高機能化の研究を遂行し、その成果を学術論文や特許出願にて報告した。

### 文献

[1] [Oyama, H.T.](#); Abe, S. *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2015**, *3*, 3245-3252. (DOI: 10.1021/acssuschemeng.5b00832)

[2] [Oyama, H. T.](#); Tanishima, D., Maekawa, S. *Polym. Degrad. Stabil.*, **2016**, *134*, 265-271. (DOI: 10.1016/j.polymdegradstab.2016.10.016)

- [3] Oyama, H. T.; Tanishima, D., Maekawa, S. *Polym. Degrad. Stabil.*, Data-in-Brief, **2017**, *10*, 377-380. (DOI: 10.1016/j.dib.2016.11.088)
- [4] Oyama, H. T.; Tanishima, D.; Ogawa, R. *Biomacromolecules* **2017**, *18*, 1281-1292. (DOI: 10.1021/acs.biomac.7b00016)
- [5] 大山秀子、菅野智成「ポリ乳酸ステレオコンプレックス組成物多孔質体およびその製造方法」特願 2013-261424 (出願日 2013 年 12 月 18 日)
- [6] Oyama, HT \*; Nakayama, R.; Takase, K.; Furuta, M. *Polymer* **2018**, in press. (DOI:10.1016/j.polymer.2017.12.061)
- [7] Nara, S.; Oyama, H. T.\* *Polymer J.* **2014**, *46*, 568-575. (DOI:10.1038/pj.2014.21)

# 時空間分解顕微計測による光電変換ダイナミクスの解明

理学部化学科・三井 正明

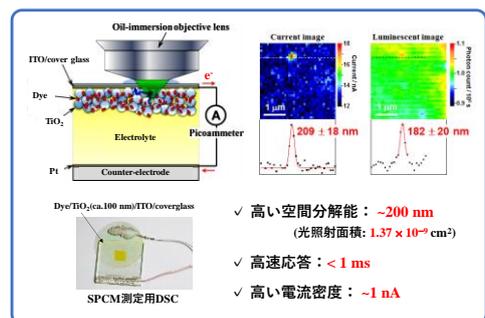
E-mail: mitsui@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

太陽電池などの太陽光利用技術に関わるエネルギー変換材料・デバイスに関する研究のほとんどは、試料全体を評価する、いわゆる集団平均（アンサンブル）測定による評価が行われてきた。本研究では、エネルギー変換デバイスの“構成部品”であるナノ物質（有機色素、超分子、ナノ粒子）の光物性や励起子ダイナミクス、デバイスの“部分構造”である高分子膜系や半導体電極系、さらには実際のデバイスに至る系までを対象とし、時空間分解レーザー顕微分光法を駆使して、エネルギー変換ダイナミクスを分子レベルで解明することを目指した。その結果、下記のような研究成果を挙げた。

## 2. 光電流-発光顕微計測による色素増感太陽電池の空間分解分析<sup>1)</sup>

低コストな次世代太陽電池の一つとして実用化が期待されている色素増感太陽電池（DSC）では、光電変換の舞台となる多孔質酸化チタン/色素単分子膜/電解液の界面においてメソスケールの不均一構造が存在し、そこで起こる色素の光酸化（電子注入）・還元（色素再生）過程が DSC の光電変換効率に大きな影響を及ぼしている。しかしながら、これまでの DSC の



光電変換に関する研究の多くは、試料（受光面）全体を測定対象としたマクロな計測手法によって行われてきた。我々は、光電変換に関わる素過程の不均一性をより明確に捉えることを目的とし、高空間分解能かつ太陽電池デバイス全般に適用可能なレーザー走査光電流-発光顕微計測（SPCM）法を開発した。この研究において我々は、カバーガラス透明電極を利用した高速応答な顕微計測用セルを独自に作製することにより、従前の光電流顕微鏡よりも 10 倍以上の高空間分解能化を実現させ、光電流と発光を 200 nm 程度の空間分解能で同時並列計測することを可能にした。この SPCM 法を用いて、DSC 中の同一微小領域に存在する“超高速な電子注入を起こす吸着色素（無発光な色素）”と“遅い電子注入を起こす吸着色素（発光する色素）”を同時に検出することに成功し、それらの存在割合や光電変換過程（電子注入、色素再生過程）の速度定数・量子収率の違いを定量的に明らかにした。これにより、遅い電子注入を起こす吸着色素の存在割合を減少させるセルの作製条件を定量的に検証することが可能となり、これまでにない新たな観点からの DSC の特性評価・性能改善のアプローチを確立させた。

## 3. 高分子膜中における有機色素の光誘起電荷移動<sup>2),3)</sup>

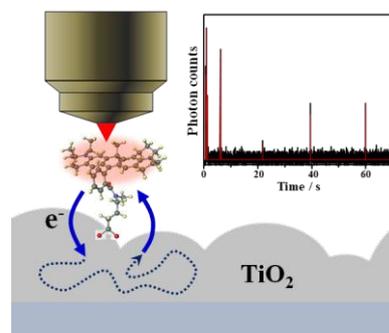
分子中の色素の光誘起電荷移動によって引き起こされる蛍光ブリンキングは、長らく

“べき乗則”に従うと考えられてきた。本研究では、ポリメチルメタクリレート (PMMA) やシクロデキストリン (CD) の薄膜中におけるペリレンジイミド (PDI) 誘導体の蛍光プリンキングを通じて、PDI と PMMA との光誘起電荷移動および PDI と CD との光誘起水素原子移動に関する研究を行った。最尤推定法と Kolmogorov-Smirnov (KS) 検定を組み合わせた統計学的にロバストな解析法を実行した結果、on-time と off-time の累積度数分布はともに、べき乗則関数では再現されず、対数正規関数や Weibull 関数で再現されるという従来の認識を覆す事実を明らかにした。この結果に基づき、この系の励起状態緩和過程の合理的なスキームを構築し、その全容を明らかにした。



#### 4. 酸化チタン界面における有機色素の光誘起電荷移動<sup>4)</sup>

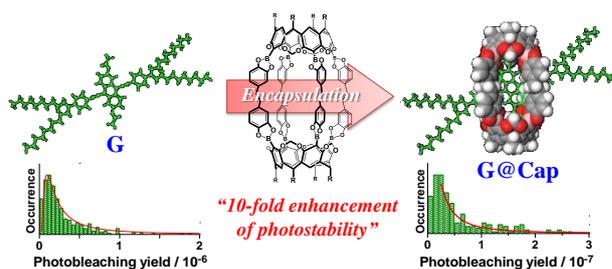
色素-半導体系の界面電荷移動 (ICT) は単一時間定数 (first-order kinetics) では記述できない “dispersive kinetics” を示す。この起源を明らかにするため、表面構造やモルフォロジーの異なる様々な酸化チタン上に吸着させた ATTO647N 色素の ICT に対する研究を行った。プリンキングに伴う on-time、off-time の分布が、どのようなモデル関数で最もよく再現されるかを精査した。その結果、on-time 分布はべき乗則関数、off-time 分布は対数正規関数で再現されることを明らかにした。



とりわけ、off-time の対数正規分布に対しては、電子拡散と電荷再結合を連動させたモデルに基づくシミュレーションによって実験結果をよく再現できることを示した。

#### 5. アントラセン誘導体の超分子錯体の光物性の解明<sup>5-8)</sup>

新規に合成開発された種々の高発光性アントラセン誘導体の光物性や励起状態緩和過程を明らかにした。とりわけ、励起状態緩和過程や光安定性に対するカプセル化の影響を単一分子分光により調査し、光安定性が劇的に向上することを定量的に示した。



文献

- 1) Mitsui, M.; Kawano, Y.; Mori, K.; Wakabayashi, N. *Langmuir* **2015**, *31*, 7158–7165.
- 2) Mitsui, M.; Unno, A.; Azechi, S. *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 15070–15081.
- 3) Mitsui, M.; Fukui, H.; Takahashi, R.; Takakura, Y.; Mizukami, T. *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 1577–1586.
- 4) Mitsui, M.; Unno, A.; Mori, K. *Chem. Lett.* **2017**, *46*, 866–869.

- 5) Mitsui, M.; Higashi, K.; Takahashi, R.; Hirumi, Y.; Kobayashi, K. *Photochem. & Photobiol. Sci.* **2014**, *13*, 1130–1136.
- 6) Mitsui, M.; Higashi, K.; Hirumi, Y. Kobayashi, K. *J. Phys. Chem. A* **2016**, *120*, 8317–8325.
- 7) Takaki, Y.; Ozawa, R.; Kajitani, T.; Fukushima, T.; Mitsui, M.; Kobayashi, K. [\*Chem. Eur. J.\* \*\*2016\*\*, \*22\*, 16760–16764.](#)
- 8) Hirumi, Y.; Tamaki, K.; Namikawa, T.; Kamada, K.; Mitsui, M.; Suzuki, K.; Kobayashi, K. *Chem. Asian J.* **2014**, *9*, 1282–1290.

# 天然高分子材料を用いた機能材料の創製

理学部化学科・上谷幸治郎

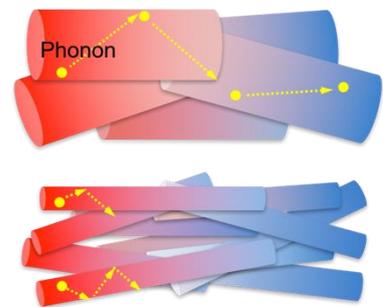
E-mail: uetanik@rikkyo.ac.jp

## 1. はじめに

セルロースは長らく断熱材として認知され、断熱容器や建材として広く活用されている。これら断熱材は総じて多孔性であり、空隙を多く内包する構造によっても断熱性能が高められている。また、素材の観点から見ても、セルロースを含む高分子材料は一般的に低熱伝導性と見なされる。高分子の結晶ラメラ間には折り畳みや非晶鎖、絡み合いが存在し、熱の伝搬を阻害する（フォノンの平均自由行程を低減する）欠陥構造が多く含まれるためである。しかし天然セルロースは、人為的に調製できない Cellulose I 型の伸び切り鎖結晶で構成され、欠陥因子が本来少ない構造をとる。すなわち、微視的な観点に立てば、熱伝搬を妨げにくい構造ではないかと考えられた。本研究では、この特徴的な結晶構造を維持した天然セルロースのナノファイバーを出発材料とし、高密度なシート状 2 次元材料とすることで初めて天然セルロースの伝熱性評価を行い、他の高分子系フィルムに比べて有意に高い熱伝導性および特徴的な異方性を持つことを見出した [1]。

## 2. 繊維太さに依存する伝熱性[2]

天然セルロース繊維を解繊処理して得られる多様なナノファイバー群は、いずれも製膜・乾燥により自己接着し、2 次元ランダムな不織フィルム材料（ナノペーパー）を与える。本研究では、マボヤ、バクテリアセルロース、コットン、スギを原料として 7 種類のナノファイバーを個別に調製し、それぞれナノペーパーとすることで熱伝導性を評価した。熱伝導性の評価には、2 次元材料の厚み方向と面内方向を独立して測定する熱拡散率測定装置を適用した。その結果、ホヤ由来のナノペーパーが面内方向に 2.5 W/mK を示し、ポリオレフィン系プラスチックフィルムの 3~10 倍程度高い熱伝導率が観測された。一方、木材由来のナノペーパーでは 1 W/mK 前後と低い値を示した。この面内方向熱伝導率は、X 線回折より判明した結晶子幅に相関した。すなわち、太い繊維ほどより伝熱しやすく、フォノンの平均自由行程が太さに比例する古典的サイズ効果の発現が推測されている。一方、いずれのナノペーパーにおいても、厚み方向熱伝導率は 0.3 W/mK 程度であった。ナノペーパーの伝熱性は構造依存的であり、繊維太さや配向性、あるいは界面性状などに影響されていると考えられる。



### 3. 透明と伝熱の両立[3]

ナノペーパーは、透明樹脂を複合することで透明化する。複合樹脂により表面散乱と内部散乱の双方を低減できるためである。しかし前者の場合、表面の樹脂のコーティング層が形成されるため、熱伝導性が低下するジレンマが発生する。本研究では、ナノペーパー表面に樹脂層を形成しない手法を開発することで伝熱骨格である繊維を露出し、透明性と伝熱性を同時に発揮させた複合フィルム材料を開発した。ホヤのナノファイバーを用いた場合、面内方向熱伝導率が  $2.5 \text{ W/mK}$  を維持したまま 70% 程度の直線透過率を示した。FESEM、顕微ラマン分光のマッピング測定および光学顕微鏡を用い、フィルム表面に樹脂単体の層が存在せず、ナノファイバーと樹脂のモザイク表面が形成されていることを確認した。このフィルムは、ナノファイバーを伝熱骨格とするため、熱伝導性は繊維率に依存した。これは、ファイバーの充填量で熱伝導性を制御することが可能であることを示している。

### 4. 異方性の巨視的発現[4]

先述の結果[2]から、ナノペーパーの面内および厚み方向で熱伝導率が約 8 倍異なるため、ナノファイバーの配向により異方性が発現していると考えられた。そこで、面内方向にナノファイバーを段階的に一軸配向させたナノペーパーを調製し、各方位における熱伝導性の変化を観測した。まず、バクテリアセルロースのハイドロゲルを機械的に延伸することでナノファイバーを一軸配向させ、熱プレス機で乾燥させてナノペーパーとした。2次元 X 線回折により算出した配向度パラメータと延伸の程度が相関し、段階的な一軸配向化を達成した。このナノペーパーにおいて、面内熱伝導率が延伸方向では上昇し、その垂直方向には低下した。最大で 220% 程度の伝熱異方性を観測し、熱流方向を配向によって制御する材料を開発した。一方、線熱膨張係数は熱拡散率と反比例の傾向を示し、寸法安定性が高い方位により伝熱するという相関が確認された。このような伝熱異方性フィルム材料は、効果的な排熱性能を発揮するフレキシブル電子デバイスの基材へ応用が志向される。

### 5. 断熱性能の向上[5]

セルロースナノファイバーとキトサンを水系で複合し凍結乾燥により調製した多孔質材料が、空気の熱伝導率に匹敵する  $0.029 \text{ W/mK}$  という低熱伝導率を示した。キトサンを添加することで高い親水性と生体適合性を発揮し、セルロース骨格の柔軟性と耐熱性を併せ持つことが確認された。これらの複合特性および多孔質構造を活用するため、水油混合溶液を濾過する濾過膜として用いた所、水分のみ透過させ油分を保持分離するという選択透過性が確認された。同等の性能が  $90^\circ\text{C}$  の高温溶液に対しても確認でき、使い捨てが可能な耐高温汚水浄化フィルターとしての利用が期待される。

文献

- [1] Uetani, K.; Hatori, K. *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2017**, *18*, 878–892.
- [2] Uetani, K.; Okada, T.; Oyama, H. T. *Biomacromolecules* **2015**, *16*, 2220–2227.
- [3] Uetani, K.; Okada, T.; Oyama, H. T. *J. Mater. Chem. C*, **2016**, *4*, 9697–9703.
- [4] Uetani, K.; Okada, T.; Oyama, H. T. *ACS Macro Lett.* **2017**, *6*, 345–349.
- [5] Wang, Y.; Uetani, K.; Liu, S. *et al. ChemNanoMat* **2017**, *3*, 98–108.

## 発光性金属クラスターの光物性に関する研究

理学部化学科・新堀 佳紀

E-mail: niihori@rikkyo.ac.jp

### 1. はじめに

金属原子が凝集した金属クラスターは、対応するバルク金属とは異なる様々な物性を示すことから、新規機能性ナノ材料の構成単位としての活用が期待されている。中でも配位子で保護された金や銀などからなるクラスターは、化学的に安定であり、構成原子数を正確にそろえて合成することが可能である。配位子保護金属クラスターには可視発光を示すものが多数報告されており、発光素子やバイオイメージングなどへの応用が期待されている。しかしながらその発光のメカニズムや光励起に伴う電荷移動など、発光に関する基礎的かつ詳細な知見は未だに得られていない。本研究では発光性を示す金属クラスターに対して、光物性に関する以下の2つの研究を行った。

### 2. 発光性銀クラスターの光誘起電荷移動

近年、金属クラスターを増感型太陽電池や光触媒に応用する研究が盛んに行われている。このような光を利用した反応の効率は、光励起されたクラスターの電荷がもう一方の物質に移動する現象(光誘起電荷移動)の速度が重要となる。しかし、金属クラスターの電荷移動速度定数のドライビングフォース( $-\Delta G^\circ$ )依存性などの基本的な知見は得られていない。ここでは、最近メチルビオローゲンとの光誘起電子移動が観測された銀クラスター  $\text{Ag}_{29}(\text{BDT})_{12}(\text{TPP})_4$  ( $\text{BDT} = 1,3\text{-benzenedithiolate}$ ,  $\text{TPP} = \text{triphenylphosphine}$ ) (以下  $\text{Ag}_{29}$ ) (図 1)<sup>1,2</sup> に対し、種々のドライビングフォース( $-\Delta G^\circ$ )を有する消光剤との溶液中での光誘起電荷移動速度定数を測定した。

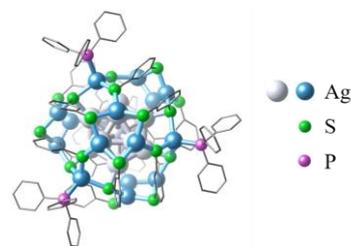


図 1.  $\text{Ag}_{29}(\text{BDT})_{12}(\text{TPP})_4$  の構造。

図 2 に一例として消光剤である Co ビピリジン錯体 ( $[\text{Co}(\text{bpy})_3]^{2+}$ ) 添加に伴う  $\text{Ag}_{29}$  の発光スペクトルの強度変化とその Stern-Volmer プロットを示す。消光剤添加量の増加に伴い、 $\text{Ag}_{29}$  由来の発光強度が減少していく様子が見られ、 $\text{Ag}_{29}$  と  $[\text{Co}(\text{bpy})_3]^{2+}$  間で光誘起電荷移動(ホール移動)が起こっていることが示唆された。 $\text{Ag}_{29}$  の発光寿命  $\tau_0$  とプロットの線形フィットの傾き  $K_{\text{SV}}$  から消光速度定数  $k_q = 3.04 \times 10^{10} \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$  が得られた。同様な実験を他の消光剤を用いても行い、各消光剤の  $k_q$  を決定した。 $\text{Ag}_{29}$  と各消光剤における電荷移動の  $-\Delta G^\circ_{\text{CS}}$  を求め、 $k_q$  の  $-\Delta G^\circ_{\text{CS}}$  依存性が得られた(図 3)。 $k_q$  はドライビングフォースの増大とともに急激に増大し、 $-\Delta G^\circ_{\text{CS}} > 0.3 \text{ eV}$  において拡散律速と同程度の値に収束した。また、電子移動とホール移動で依存性に大きな違いは見られなかったが、電荷を持つ消光剤において  $k_q$  が大きくなる傾向が見られた。以上のように光誘起電荷移動におけるドライビングフォース依存性を評価することに成功した。

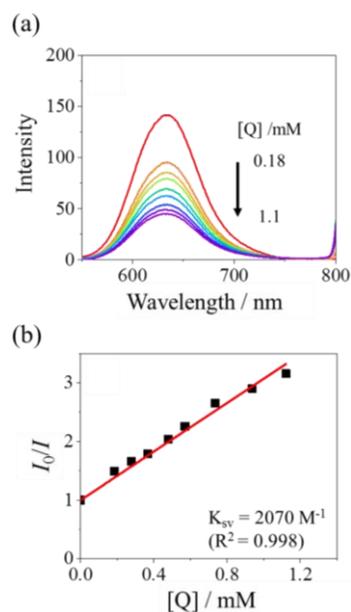


図 2.  $[\text{Co}(\text{bpy})_3]^{2+}$  添加による  $\text{Ag}_{29}$  の (a) 発光スペクトルの強度変化、(b) Stern-Volmer プロット。

### 3. 発光性金銀合金クラスターの単一分子計測

最近、純金クラスターに銀などの異原子をドーピングすることにより、その発光強度が大きく向上することが報告され、注目を集めている<sup>3</sup>。しかし、このような合金クラスターを合成する際には、ドーピング数が異なる様々な混合物が同時に得られてしまう。そのため、生成物の物性値は異なる組成のクラスターから得られる物性値のアンサンブル平均になっており、個々の組成を有するクラスターの物性値を評価することは困難である。本研究では高輝度に発光する金銀合金クラスター  $\text{Ag}_{13}\text{Au}_{12}(\text{TPP})_{10}(\text{PET})_5\text{Cl}_2$  (TPP = triphenylphosphine, PET = phenylethanethiolate) (以下  $\text{Ag}_{13}\text{Au}_{12}$ ) (図 4)<sup>3</sup> に対し、単一分子計測による評価を行うことで、アンサンブル平均を除外した一粒子レベルでの光物性評価と励起状態のダイナミクスに関する研究を行った。

図 5 に、ポリメタクリル酸メチル (PMMA) 中に分散した  $\text{Au}_{25-x}\text{Ag}_x$  の発光スペクトルと発光強度の時間変化の一例を示す。 $\text{Ag}_{13}\text{Au}_{12}$  に類似した発光スペクトルが観測され(図 5(a))、その発光強度の時間変化には発光の明滅(ブリンキング)と一段階の光退色が観測された(図 5(b))。これらの結果は、単一の  $\text{Ag}_{13}\text{Au}_{12}$  を検出できていることを示唆している。発光極大波長はジクロロメタン溶液中(667 nm)のときよりも 50 nm ほど長波長側に観測され、PMMA 中においてクラスターが大きな安定化を受けていることが分かった。発光強度の時間変化において、秒オーダーの“発光が観測されない時間(off-time)”が度々観測されていることから、励起されたクラスターと PMMA 膜中に存在する何らかのトラップサイトとの間で電荷移動を起こしているものと推測される。このように発光性金属クラスターにおける単一分子計測技術を駆使することにより、初めてクラスターの発光のブリンキング現象を観測することに成功した。

#### 文献

- 1) AbdulHalim, L. G.; Bootharaju, M. S.; Tang, Q.; Gobbo, S. D.; AbdulHalim, R. G.; Eddaoudi, M.; Jiang, D.; Bakr, O. M. *J. Am. Chem. Soc.*, **2015**, *137*, 11970-11975.
- 2) Aly, S. M.; AbdulHalim, L. G.; Besong, T. M. D.; Soldan, G.; Bakr, O. M.; Mohammed, O. F. *Nanoscale*, **2016**, *8*, 5412-5416.
- 3) Wang, S.; Meng, X.; Das, A.; Li, T.; Song, Y.; Cao, T.; Zhu, X.; Zhu, M.; Jin, R. *Angew. Chem.*

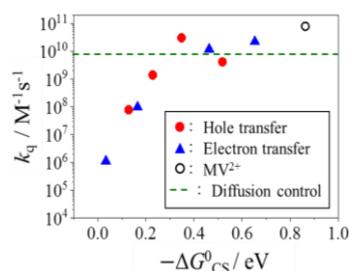


図3. 各消光剤を用いた時の昇降速度定数  $k_q$  のドライビングフォース  $-\Delta G^0_{CS}$  依存性。

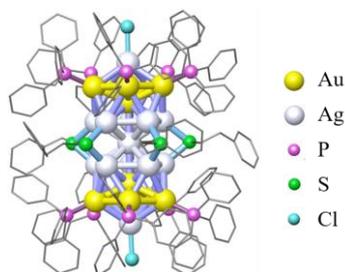


図4.  $\text{Ag}_{13}\text{Au}_{12}(\text{TPP})_{10}(\text{PET})_5\text{Cl}_2$  の構造。

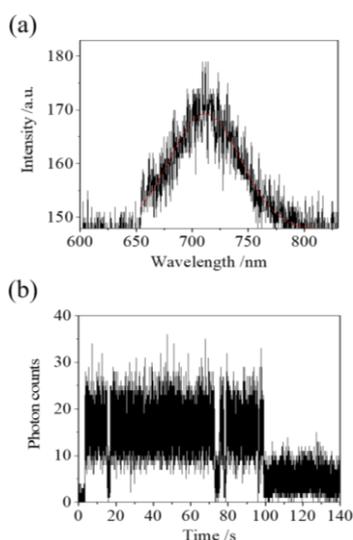


図5. 一分子計測による  $\text{Ag}_{13}\text{Au}_{12}$  の(a) 発光スペクトル、(b) 発光強度の時間変化。

*Int. Ed.*, **2014**, 53, 2376-2380.