

[論文]

- 1) "Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems" Tanaka, S.; Mochizuki, Y.; Komeiji, Y.; Okiyama, Y.; Fukuzawa, K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 10310–10344. (DOI: 10.1039/c4cp00316k)
- 2) "Interaction energy analysis on specific binding of influenza virus hemagglutinin to avian and human sialosaccharide receptors: Importance of mutation-induced structural change" Anzaki, S.; Watanabe, C.; Fukuzawa, K.; Mochizuki, Y.; Tanaka, S. *J. Mol. Graph. Model.* **2014**, *53*, 48–58. (DOI:10.1016/j.jmgm.2014.07.004)
- 3) "Fragment molecular orbital-based molecular dynamics (FMO-MD) simulations on hydrated Cu(II) ion" Kato, Y.; Fujiwara, T.; Komeiji, Y.; Nakano, T.; Mori, H.; Okiyama, Y.; Mochizuki, Y. *Chem-Bio Informatics J.* **2014**, *14*, 1–13. (DOI: 10.1273/cbij.14.1)
- 4) "Optimal damping algorithm for unrestricted Hartree-Fock calculations" Yamamoto, J.; Mochizuki, Y. *Chem-Bio Informatics J.* **2014**, *14*, 14–33. (DOI: 10.1273/cbij.14.14)
- 5) "Explicit solvation modulates intra- and inter-molecular interactions within DNA: electronic aspects revealed by the ab initio fragment molecular orbital (FMO) method" Fukuzawa, K.; Kurisaki, I.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; Mochizuki, Y.; Tanaka, S.; Komeiji, Y. *Comput. Theor. Chem.* **2015**, *1054*, 29–37. (DOI:10.1016/j.comptc.2014.11.020)
- 6) "Hydration effects on enzyme-substrate complex of nylon oligomer hydrolase: inter-fragment interaction energy study by the fragment molecular orbital method" Ando, H.; Shigeta, Y.; Baba, T.; Watanabe, C.; Okiyama, Y.; Mochizuki, Y.; Nakano, M. *Mol. Phys.* **2014**, (DOI:10.1080/00268976.2014.941311)
- 7) "Fragment molecular orbital-based molecular dynamics study on hydrated Ln(III) ions", Fujiwara, T.; Mori, H.; Komeiji, Y.; Mochizuki, Y. JPS-Conf. Ser., in press.
- 8) "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グанд相互作用クラスター解析", 甘利真司, 望月祐志, 加藤昭史, 福澤薫, 渡邊千鶴, 沖山佳生, 田中成典, 中野達也, *CBI 学会誌* **2014**, 2 巻 4 号, 17-25.

[総説・解説・編著書]

- 1) 特集ー「マッピング」を解説する
医薬品候補化合物とタンパク質の相互作用解析「産学官連携ジャーナル」2014年5月

[学会発表]

- 1) “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”(ポスター) 小嶋亮平, 岡田智暉, 江波幸樹, 和田亨, 望月祐志, 理論化学討論会, 名古屋大学(東山キャンパス) ES 総合館(名古屋), 2014年5月22日.

- 2) “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” (ポスター) 望月祐志, 福澤薫, 沖山佳生, 渡邊千鶴, 本間光貴, 田中成典, 蛋白質科学会, ワークピア横浜 / 横浜産貿ホール マリネリア (横浜), 2014 年 6 月 26 日.
- 3) “Theoretical calculations on proteins with fragment molecular orbital method” (Poster) T.Fujiwara, H. Mori, Y. Komeiji, Y. Mochizuki, CSW2014 conference, Tsukuba International Congress Center (Tsukuba), 2014 年 8 月 20 日.
- 4) “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)” (口頭発表) 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, 応用物理学会秋季年会 2014, 北海道大学 (札幌), 2014 年 9 月 18 日.
- 5) “Theoretical calculations on proteins with fragment molecular orbital method” (Poster) Y. Mochizuki, K. Fukuzawa, Y. Okiyama, C. Watanabe, T. Honma, S. Tanaka, CBI conference, Tower Hall Funabori (Tokyo), 2014 年 10 月 28 日.
- 6) “ABINIT-MP による京での性能について” (依頼講演) 望月祐志, 沖山佳生, 渡邊千鶴, 野口孝明, 福澤薫, 田中成典, CBI 学会 2014 年会, タワーホール船堀 (東京), 2014 年 10 月 30 日.
- 7) “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) 望月祐志, 福澤薫, 応用物理学会春期年会 2015, 東海大学湘南キャンパス (平塚), 2015 年 3 月 12 日.
- 8) “フラグメント分子軌道計算のインシリコ創薬への応用” (口頭発表) 福澤薫, 渡邊千鶴, 沖山佳生, 渡邊博文, 本間光貴, 望月祐志, 田中成典, 日本化学会 2015 年春期年会, 日本大学理工学部船橋キャンパス (習志野), 2015 年 3 月 30 日.
- 9) “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” (口頭発表) 坂口正貴, 福澤薫, 渡邊千鶴, 望月祐志, 日本化学会 2015 年春期年会, 日本大学理工学部船橋キャンパス (習志野), 2015 年 3 月 30 日.

[論文]

- 1) “RXR Partial Agonist Produced by Side-Chain Repositioning of Alkoxy RXR Full Agonist Retains Anti-type 2 Diabetes Activity without the Adverse Effects” Kawata, K.; Morishita K.; Yamada, S.; Nakayama, M.; Kobayashi, T.; Furusawa, Y.; Arimoto-Kobayashi, S.; Oohashi, T.; Makishima, M.; Naitou, H.; Ishitsubo, E.; Tokiwa, H.; Tai, A.; Kakuta, K. *J. Med. Chem.* **58(2)**, 912-926 (DOI: 10.1021/jm501863r) (2015).
- 2) “Trifluoromethanesulfonyloxy-Group-Directed Regioselective (3+2) Cycloadditions of Benzynes for the Synthesis of Functionalized Benzo-Fused Heterocycles” Ikawa, T.; Kaneko, H.; Masuda, S.; Ishitsubo, E.; Tokiwa, H.; Akai, S. *Org. Biomol. Chem.* **13**, 520-526 (DOI: 10.1039/C4OB01627K) (2014).

[学会発表]

・ 国際学会

- 1) “Endeavors to bridge a gap between wet and dry science in enzyme engineering”, Nakano, S.; Okazaki, S.; Yasukawa, K.; Dadashpour, M.; Tokiwa, H. and Asano, Y. Active Enzyme Molecule (AEM2014), December 17-19, 2014, Toyama, Japan.
- 2) “Experimental and Theoretical Analysis of NHC-Catalyzed Nucleophilic Aroylation” Dobashi, K.; Iwata, N.; Ishitsubo, E.; Tokiwa, H.; Suzuki, Y. Advanced Molecular Transformations by Organocatalysts 2nd International Conference (7th Symposium on Organocatalysis), November 21-22, 2014, Tokyo, Japan.
- 3) “Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus”, Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, Hi.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; Tokiwa, H. Joint Meeting of the Society for Glycobiology (SFG) and the Japanese Society of Carbonhydrates Research (JSCR), November 16-19, 2014, Honolulu, Hawaii, USA.
- 4) “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”, Nakano, Y.; Ishitsubo, E.; Hayamizu, K.; Han, L.; Tsuji, T.; Watanabe, Y.; Yamada, S.; Tokiwa, H. 2nd International Conference on Pharma and Food, November 5-6, 2014, Shizuoka, Japan.
- 5) “Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus”, 2nd International Conference on Pharma and Food, Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; Tokiwa, H. 2nd International Conference on Pharma and Food, November 5-6, 2014, Shizuoka, Japan.
- 6) “*In silico* analysis based on the first-principles calculations and molecular dynamics simulations of pleiotropic effect of novel inhibitor for influenza virus pathogenesis” Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Suzuki, Y.; Tokiwa, H. 13th Awaji International Forum on Infection and Immunity 2014, September 23-26, 2014, Nara, Japan.
- 7) "Rational Drug Design of Novel anti-Influenza inhibitors based on Fragment Orbital Method and

MD Simulations", Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Tokiwa, H. 3rd International Conference of Drug Design 2014, 23-25 September, 2014, St Hilda's College, Oxford, UK.

8) "Development of Novel Multi-target Inhibitor for HA & NA of Influenza Virus", Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Igarashi, M.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; Tokiwa, H. International Symposium on Sialoglyco 2014, 7-10 September 2014, Gold Coast, Australia.

9) "Development of Novel Multitarget Inhibitor for Glycoproteins of Influenza Virus Part I: Organic Synthesis and Optical Resolution", Hosozawa, T.; Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; Tokiwa, H. 9th International Symposium on Glycosyltransferases (Glyco-T 2014), June 18-21, 2014, Porto, Portugal.

10) "Development of Novel Multitarget Inhibitor for Glycoproteins of Influenza Virus Part II Rational Design and in silico Analysis", Ishitsubo, E.; Hosozawa, T.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; Tokiwa, H. 9th International Symposium on Glycosyltransferases (Glyco-T 2014), June 18-21, 2014, Porto, Portugal.

11) "Novel *in silico* investigation between pleiotropic inhibitor for multitarget and Influenza virus", Ishitsubo, E.; Kirshner, K.N.; Sriwilaijaroen, N.; Hosozawa, T. Yokoe, H.; Tsubuki, M.; Suzuki, Y.; Tokiwa, H. 3rd isirv Antiviral Group Conference, 4-6 June, Tokyo, Japan.

・国内学会

1) “高精度第一原理計算を用いた新規抗 Deng ウイルス阻害剤に対する理論的研究” 山藤 歩・阿部智子・左一八・大坪忠宗・池田潔・鈴木隆・常盤広明 27X-pm01 日本薬学会第 135 年会 兵庫医療大学 (神戸) 2015 年 3 月 27 日 (口頭発表) (報道機関向けハイライト講演)

2) “o-アミノフェノール 誘導体を用いた [5-endo-dig] 型環化反応の開発” 古畑光司・細沢拓未・横江弘雅・上森理弘・常盤広明・津吹政可 26I-pm22, 第 135 回日本薬学会年会 神戸学院大学 (神戸) 2015 年 3 月 26 日 (口頭発表)

3) “Aspoquinolone 類の全合成研究” 細沢拓未・横江弘雅・常盤広明・津吹政可 27PB-am015S, 第 135 回日本薬学会年会 神戸サンボーホール (神戸) 2015 年 3 月 27 日 (ポスター発表)

4) “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)” 横田 智洋・細沢拓未・石坪江梨花・加藤裕也・五十嵐学・KIRSHNER Karil N.・SLIWILAIJAROEN Nongluk・横江弘雅・鈴木康夫・常盤広明・津吹政可 28S-pm11, 第 135 回日本薬学会年会 兵庫医療大学 (神戸) 2015 年 3 月 28 日 (口頭発表)

5) “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)” 加藤 裕也・細沢拓未・石坪江梨花・横田智洋・五十嵐学・KIRSHNER Karil N.・SLIWILAIJAROEN Nongluk・横江弘雅・鈴木康夫・常盤広明・津吹政可 28S-pm12, 第 135 回日本薬学会年会 神戸サンボーホール (神戸) 2015 年 3 月 28 日 (口頭発表)

6) “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” 石坪江梨花・細沢拓未・五十嵐学・KIRSHNER Karl N.・SRIWILAIJAROEN Nongluk・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・常盤広明 28pm-am007S, 第 135 回日本薬学会年会 神戸サ

ンボーホール（神戸）2015年3月28日（ポスター発表）

7) “FMO法を用いたGPR40およびGPR120と ω -3/ ω -6系不飽和脂肪酸との理論的相互作用解析”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・常盤広明 26H-pm10S・第135回日本薬学会年会 神戸学院大学（神戸）2015年3月26日（口頭発表）

8) “新規 Dengue ウイルス感染阻害剤の合成 (V)” 寺岡 27PB-pm118・第135回日本薬学会年会 神戸サンボーホール（神戸）2015年3月27日（ポスター発表）

9) “NHC 触媒反応・求核的アシル化における Breslow 中間体の反応性” 土橋滉平, 岩田直人, 石坪江梨花, 常盤広明, 鈴木由美子 日本化学会第95回春季年会 日本大学理工学部船橋キャンパス（船橋）2015年3月26日～29日 船橋（口頭発表）

10) “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”・石坪江梨花・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilajaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・常盤広明 4th Negative Strand Virus-Japan Symposium ラグナガーデンホテル（沖縄）2015年1月20日（口頭発表）

11) “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” 伊東佑仁・石坪江梨花・Karl N. Kirshner・大坪忠宗・池田潔・鈴木隆・常盤広明 4th Negative Strand Virus-Japan Symposium ラグナガーデンホテル（沖縄）2015年1月20日（口頭発表）

12) “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” 藤田侑・高橋忠伸・池田 潔・鈴木 隆・常盤広明 4th Negative Strand Virus-Japan Symposium ラグナガーデンホテル（沖縄）2015年1月20日（ポスター発表）

13) “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抗インフルエンザ薬の合理的設計開発” 石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilajaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・常盤広明 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）2014年11月26日（ポスター発表）

14) “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” 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・常盤広明・黒田照夫・宮地弘幸 第32回メディシナルケミストリーシンポジウム 兵庫 2014年11月26日（ポスター発表）

15) “新規 Dengue ウイルス感染阻害剤の合成研究 (IV)” 寺岡文照・安倍智子・左一八・鈴木隆・常盤広明・大坪忠宗・池田潔 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）2014年11月26日（ポスター発表）

16) “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 *in silico* 解析”・石坪 江梨花・五十嵐 学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilajaroen・細沢 拓未・横江 弘雅・津吹 政可・鈴木 康夫・常盤 広明・第62回ウイルス学会学術集会 パシフィコ横浜会議センター（横浜）2014年11月11日（ポスター発表）

17) “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” 小西英之・上田剛・松原美香・森敬介・石川吉伸・橋本博・常盤広明・眞鍋敬 第40回反応と合成の進歩シンポジウム 東北大学川内萩ホール（仙台）2014年11月10～11日

18) “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” 常盤広明 第13回ホスファチジルセリン研究会 東京海洋大学品川キャンパス薬水会館（東京）2014年11月7日（招待講演）

- 19) “THEORETICAL STUDY ON THE ORIGIN OF SUBSTRATE SPECIFICITY OF ALKALINE-D-PEPTIDASE (ADP) BASED ON THE FIRST-PRICIPLES CALCULATIONS 2”・Erika Ishitsubo, Seiji Okazaki, Shogo Nakano, Hiroaki Tokiwa, Yasuhisa Asano 第 51 回ペプチド討論会 徳島大学大塚講堂 (徳島) 2014 年 10 月 22 日 (ポスター発表)
- 20) “ウイルス全体の全電子計算による 新規 Dengue ウイルス感染症治療薬の設計開発” 常盤広明・石川岳志・庄司光男・李秀榮・左一八・池田潔 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 筑波大学大学会館国際会議室 (筑波) 2014 年 10 月 21～22 日
- 21) “産業利用を目指した酵素群の機能解明と合理的設計” 中野祥吾・岡崎誠司・常盤広明・浅野泰久 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 筑波大学大学会館国際会議室 2014 年 10 月 21～22 日
- 22) “求核的アシル化反応の開発研究” 土橋滉平・岩田直人・石坪江梨花・常盤広明・鈴木由美子 第 4 回 CSJ 化学フェスタ タワーホール船堀 (東京) 2014 年 10 月 16 日
- 23) “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” 細沢拓未・横江弘雅・常盤広明・津吹政可 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) 2014 年 10 月 15 日～17 日
- 24) “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—”・井川貴詞・石坪江梨花・常盤広明・高木晃・赤井周司・第 64 回日本薬学会近畿支部大会 京都薬科大学 (京都) 2014 年 10 月 11 日 (口頭発表)
- 25) “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” 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・常盤広明・第 58 回日本薬学会関東支部大会 昭和薬科大学 (東京) 2014 年 10 月 4 日 (口頭発表)
- 26) “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” 佐藤菜摘・石坪江梨花・常盤広明 第 58 回日本薬学会関東支部大会 昭和薬科大学 (東京) 2014 年 10 月 4 日 (ポスター発表)
- 27) “FR901483 合成におけるチロシノール誘導体の N-アリアル化反応の検討” 佐藤大樹・田口友里・加藤誠也・細沢拓未・上森理弘・横江弘雅・常盤広明・津吹政可 第 58 回日本薬学会関東支部大会 昭和薬科大学 (東京) 2014 年 10 月 4 日 (ポスター発表)
- 28) “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” 石坪江梨花・中野佑香・太田崇文・川上 勝・常盤広明 第 58 回日本薬学会関東支部大会 昭和薬科大学 (東京) 2014 年 10 月 4 日
- 29) “プレニル化キノリノンアルカロイドの合成研究” 細沢拓未・横江弘雅・常盤広明・津吹政可 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) 2014 年 9 月 21 日
- 30) “求核的アシル化反応の開発および反応解析研究” 土橋滉平・岩田直人・石坪江梨花・常盤広明・鈴木由美子 第 44 回複素環化学討論会 札幌市民ホール (北海道) 2014 年 9 月 10～12 日

- 31) “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” 中野佑香・石坪 江梨花・速水耕介・韓 力・辻智子・常盤広明 日本脂質栄養学会第 23 回大会 東京国際交流館プラザ（東京）2014 年 8 月 30 日
- 32) “糖置換基導入による水溶化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” 常盤広明・大坪忠宗・池田 潔・阿部太洋・八木亮・高木祐太・稲留徹・森本正和・木下勉・入江正浩 第 33 回日本糖質学会年会 名古屋大学豊田講堂（名古屋）2014 年 8 月 11 日（口頭発表）
- 33) “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”・石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilajaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・常盤広明 第 33 回日本糖質学会年会 名古屋大学豊田講堂（名古屋）2014 年 8 月 11 日（ポスター発表）
- 34) “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”・細沢拓未・石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilajaroen・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・常盤広明 創薬懇話会 2014 長良川温泉ホテルパーク（岐阜）2014 年 7 月 10 日
- 35) “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”・石坪江梨花・五十嵐学・Karl N. Kirshner・Nongluk Sriwilajaroen・細沢拓未・横江弘雅・津吹政可・鈴木康夫・常盤広明 創薬懇話会 2014 長良川温泉ホテルパーク（岐阜）2014 年 7 月 10 日
- 36) “塩基によるギ酸エステルの分解反応の計算化学的解析” 森敬介・小西英之・石川吉伸・橋本博・常盤広明・眞鍋敬 第 60 回日本薬学会東海支部大会 鈴鹿医療科学大学白子キャンパス（鈴鹿）2014 年 7 月 5 日

[論文]

- 1) “Double C(sp³)-H Bond Functionalization Mediated by Sequential Hydride Shift/Cyclization Process: Diastereoselective Construction of Polyheterocycles” Mori, K.; Kurihara, K.; Yabe, S.; Yamanaka, M.; Akiyama, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 3744-3747.
- 2) “Trinuclear Zn₃(OAc)₄-3,3'-bis(aminoimino)binaphthoxide Complex for Highly Efficient Catalytic Asymmetric Iodolactonization” Arai, T.; Sugiyama, N.; Masu, H.; Kado, S.; Yamanaka, M. *Chem. Comm.* **2014**, *50*, 8287-8290.
- 3) “Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Transfer Hydrogenation of Ketimine Derivatives: Remarkable Difference in Enantioselectivity Depending on Hydrogen donor” Saito, K.; Horiguchi, K.; Shibata, Y.; Yamanaka, M.; Akiyama, T. *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 7616-7620.
- 4) “Theoretical Studies on Mechanisms and Origins of Stereocontrol in Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Asymmetric Reactions” Yamanaka, M.; Shibata, Y. *J. Syn. Org. Chem.* **2014**, *72*, 580-595.
- 5) “DFT Studies of Mechanism and Origin of Stereoselectivity of Palladium-Catalyzed Cyclotrimerization Reactions Affording *syn*-Tris(norborneno)benzenes” Yamanaka, M.; Morishima, M.; Shibata, Y.; Higashibayashi, S.; Sakurai, H. *Organometallics* **2014**, *33*, 3060-3068.
- 6) “Asymmetric Michael Addition of β -Ketoesters to Enones Catalyzed by the Lithium Salt of a Primary β -Amino Acid” Yoshida, M.; Kubara, A.; Nagasawa, Y.; Hara, S.; Yamanaka, M. *Asian J. Org. Chem.* **2014**, *4*, 523-529.
- 7) “Secondary stereocontrolling interactions in chiral Bronsted acid catalysis: study of a Petasis-Ferrier-type rearrangement catalyzed by chiral phosphoric acids” Kanomata, K.; Toda, Y.; Shibata, Y.; Yamanaka, M.; Tsuzuki, S.; Gridneva, I. D.; Terada, M. *Chem. Sci.* **2014**, *5*, 3515-3523.

[学会発表]

- 1) “ヒドリド転位型分子内 redox 系の連続利用による二重 C(sp³)-H 結合官能基化反応の開発” 森啓二、栗原一樹、矢部真之介、山中正浩、秋山隆彦、第 105 回有機合成シンポジウム、東工大、2014 年 6 月 11 日
- 2) “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” 佐藤真、山中正浩、長澤和夫、川端猛夫、分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム、北大、2014 年 6 月 20 日
- 3) “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” 長澤裕貴、柴田幸大、鹿又喬平、山中正浩、寺田眞浩、分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム、北大、2014 年 6 月 20 日
- 4) “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” 野田洋史、舟山浩介、榎山儀恵、寺田眞浩、山中正浩、分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム、北大、2014 年 6 月 20 日
- 5) “テトラロン型 β -ケトエステル α 位の有機触媒的不斉酸化反応を基盤とする β 位及び γ 位の速度論的光学分割” 古郡孝太、小田木陽、佐藤真、山中正浩、長澤和夫、分子活性化-有機分子触媒合同シンポジウム、北大、2014 年 6 月 20 日

- 6) “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” 土岐将太郎、山中正造、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、2014 年 7 月 31 日
- 7) “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” 市之瀬篤、海津溪介、山中正造、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、2014 年 7 月 31 日
- 8) “二点水素結合に基づく超分子型不斉分子触媒の開発” 宍戸健人、山中正造、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、2014 年 7 月 31 日
- 9) “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” 山中正造、2014 年有機反応機構研究会、兵庫県民会館、2014 年 9 月 23 日
- 10) “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” 伊藤結、山中正造、第 4 回 CSJ 化学フェスタ、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日
- 11) “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” 山本絵莉、山中正造、秋山隆彦、第 4 回 CSJ 化学フェスタ、タワーホール船堀、2014 年 10 月 14 日
- 12) “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” 吉田うらら、山中正造、川端猛夫、第 4 回 CSJ 化学フェスタ、タワーホール船堀（東京）、2014 年 10 月 14 日
- 13) “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” 土岐将太郎、山中正造、第 106 回有機合成シンポジウム、早大、2014 年 11 月 6 日
- 14) “グアニジン-ウレア触媒を用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：(+)-Linorexipin の全合成” 小田木陽、古郡孝太、山本祥晴、佐藤真、山中正造、長澤和夫、第 106 回有機合成シンポジウム、早大、2014 年 11 月 7 日
- 15) “Theoretical Study of Asymmetric Desymmetrization of 4-Nosylamino-1,7-heptanediol via 4PPY-Catalyzed Enantioselective Acylation” Makoto Sato, Masahiro Yamanaka, Takeshi Shigeta, Takumi Huruta, Takeo Kawabata, 2th International Conference, The University of Tokyo, Nov. 21, 2014
- 16) “Theoretical Study on the Mechanism of Stereoselectivity in Chiral Phosphorus Acid Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of 1,5-Benzodiazepine Using Benzothiazoline” Eri Yamamoto, Kousaku Horiguchi, Koudai Saito, Takahiko Akiyama, Masahiro Yamanaka, 2th International Conference, The University of Tokyo, Nov. 21, 2014
- 17) “Theoretical Study on Chiral Phosphoric Acid Catalyzed Asymmetric Transfer Hydrogenation of Trifluoromethylated N-H Ketimine Using Benzothiazoline” Hirofumi Noda, Takahiko Akiyama, Masahiro Yamanaka, 2th International Conference, The University of Tokyo, Nov. 21, 2014
- 18) “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” 野田洋史、秋山隆彦、山中正造、日本化学会第 95 回春季年会、日大、2015 年 3 月 27 日

- 19) “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触媒活性種の探索” 市之瀬篤、山中正造、日本化学会第 95 回春季年会、日大、2015 年 3 月 28 日
- 20) “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” 宍戸健人、山中正造、日本化学会第 95 回春季年会、日大、2015 年 3 月 28 日
- 21) “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” 土岐将太郎、山中正造、日本化学会第 95 回春季年会、日大、2015 年 3 月 27 日
- 22) “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” 堀口耕作、山本絵莉、斉藤巧泰、山中正造、秋山隆彦、日本化学会第 95 回春季年会、日大、2015 年 3 月 27 日
- 23) “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” 山本絵莉、山中正造、堀口耕作、斉藤巧泰、秋山隆彦、日本化学会第 95 回春季年会、日大、2015 年 3 月 27 日
- 24) “キラル Ag(I)-ビスアミジン触媒を用いたインドールと α -置換- 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” 野本拓実、山中正造、日本化学会第 95 回春季年会、日大、2015 年 3 月 28 日

[論文]

- 1) “Twelve new compounds from *Ligularia melanothyrsa*; isolation of melanothyrsins A-E, normelanothyrsin A, and other eremophilane sesquiterpenoids” Saito, Y.; Ichihara, M.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Kuroda, C.; Tori, M. *Tetrahedron* **2014**, *70*, 2621-2628. (DOI: 10.1016/j.tet.2014.02.080)
- 2) “Chemical and genetic similarity and diversity of *Ligularia anoleuca* and *L. fischeri* collected in the Hengduan Mountains of China” Shimizu, A.; Suzuki, Y.; Hanai, R.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; Kuroda, C. *Phytochemistry* **2014**, *102*, 137-144. (DOI: 10.1016/j.phytochem.2014.03.019)
- 3) “中国横断山脈地域に生育するキク科 *Ligularia* 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” 黒田智明, 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. *有機合成化学協会誌* **2014**, *72*, 717-725.
(DOI: org/10.5059/yukigoseikyokaishi.72.717)
- 4) “Chemical and Genetic Study on Hybrid of *Ligularia subspicata* and *L. cyathiceps* Collected in Yunnan Province of China” Shimizu, A.; Watanabe, S.; Hanai, R.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; Kuroda, C. *Chem. Biodiversity* **2014**, *11*, 1438-1448. (DOI: 10.1002/cbdv.201400133)
- 5) “Structure and Cytotoxic Evaluation of 12-Oxygenated Eremophilanes from *Ligularia lingiana*” Saito, Y.; Sasaki, Y.; Komiyama, T.; Ohsaki, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Kuroda, C.; Tori, M. *Tetrahedron* **2014**, *40*, 5878-5883. (DOI: 10.1016/j.tet.2014.06.030)
- 6) “Isolation and structure of three bislactones, eremopetasitenin B4, eremofarfugins F, and G, from *Ligularia przewalskii* and revision of the structure of an epoxy-lactone isolated from *Ligularia intermedia*” Saito, Y.; Kamada, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Kuroda, C.; Tori, M. *Chem. Lett.* **2014**, *43*, 1740-1742.
(DOI: 10.1246/cl.140745)
- 7) “Germacranolides and their diversity of *Eupatorium heterophyllum* collected in China” Saito, Y.; Mukai, T.; Iwamoto, Y.; Baba, M.; Takiguchi, K.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Kawahara, T.; Kuroda, C.; Tori, M. *Chem. Pharm. Bull.* **2014**, *62*, 1092-1099. (DOI: org/10.1248/cpb.c14-00426)
- 8) “Structures of Six New Compounds from *Ligularia brassicoides*” Saito, Y.; Sasaki, Y.; Ohsaki, A.; Okamoto, Y.; Gong, X.; Kuroda, C.; Tori, M. *Tetrahedron* **2014**, *70*, 9726-9730.
(DOI:10.1016/j.tet.2014.10.003)
- 9) “Natural Hybridization and Introgression between *Ligularia cymbulifera* and *L. tongolensis* (Asteraceae, Senecioneae) in Four Different Locations” Yu J.; Kuroda, C.; Gong, X. *Plos One*, **2014**, e115167. (DOI: 10.1371/journal.pone.0115167)
- 10) “Chemotypes of *Ligularia vellerea*, its hybrids, and *L. melanothyrsa*” Shimizu, A.; Inoue, K.; Ichihara, M.; Hanai, R.; Saito, Y.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Gong, X.; Kuroda, C. *Nat. Prod. Commun.* **2015**, *10*, 9-12.
(DOI なし)
- 11) “Diversity in the Flavonoid Composition of *Stellera chamaejasme* in the Hengduan Mountains” Shirai, K.; Okamoto, Y.; Tori, M.; Kawahara, T.; Gong, X.; Noyama, T.; Watanabe, E.; Kuroda, C. *Nat. Prod. Commun.* **2015**, *10*, 53-56. (DOI なし)

[学会発表]

- 1) “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” 黒田智明, 第4回天然物パワーシンポジウム, 東京大学弥生講堂(東京都), 2014年7月19日
- 2) “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” 平井美咲, 廣田 洋, 黒田智明, 第58回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年9月20日
- 3) “中国産キク科 *Ligularia pleurocaulis* の新規化学成分と多様性” 通 元夫, 高橋宏明, 齋藤義紀, 中島勝幸, 岡本育子, 龔 洵, 黒田智明, 花井 亮, 第58回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年9月20日
- 4) “中国産キク科 *Ligularia sagitta* の新規化学成分” 通 元夫, 谷口瑞穂, 大坪孝徳, 岩本夢子, 中島勝幸, 岡本育子, 齋藤義紀, 龔 洵, 黒田智明, 第58回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年9月20日
- 5) “中国産横断山脈産 *Ligularia vellerea* および *L. melanothyrsa* のケモタイプ” 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, 第58回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年9月21日
- 6) “中国四川省産 *Aquilegia* 未同定種の新規アビエタン型ジテルペン” 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, 第58回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年9月21日
- 7) “中国雲南省および重慶市産キク科 *Eupatorium heterophyllum* の新規セスキテルペイド” 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, 第58回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年9月21日
- 8) “中国産キク科 *Ligularia liatroides* の化学成分” 八百板康範, 龔 洵, 黒田智明, 第58回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年9月21日
- 9) “数種の中国横断山脈産 *Ligularia* 雑種の化学成分” 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, 第56回天然有機化合物討論会, 高知県民文化ホール(高知市), 2014年10月15日
- 10) “酸素官能基化されたピサボ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” 平井美咲, 高木広和, 廣田 洋, 黒田智明, 日本化学会第95春季年会, 日本大学(船橋市), 2014年3月
- 11) “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” 大友郁美, 黒田智明, 日本化学会第95春季年会, 日本大学(船橋市), 2014年3月

[総説・解説・編著書]

1) “Water Oxidation by Ruthenium Complexes with Non-Innocent Ligands” Wada, T.; Tanaka, K.; Muckerman, J. T.; Fujita, E. p77-111. Llobet, A. (Edt.) *Molecular Water Oxidation Catalysis*, John Wiley & Sons, Ltd. (UK) **2014**, ISBN: 9781118413371. (Chapter Author)

[学会発表]

- 1) “Ru-C 結合を有するルテニウム錯体による水の酸化反応” 和田 亨, 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(東京) 2014年1月30日
- 2) “Ru-C 結合を有するルテニウム錯体による水の酸化反応”, 和田 亨, 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) 2014年3月26日
- 3) “ピ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” 真木英孝・宮里 裕二・和田 亨, 錯体化学会第64回討論会, 琉球大学(沖縄市), 2014年9月18日.
- 4) “キサンテンにより架橋された二核コバルト錯体における酸素の四電子還元反応の選択性” 和田 美里・宮里 裕二・和田 亨, 錯体化学会第64回討論会, 琉球大学(沖縄市), 2014年9月18日.
- 5) “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” 西村 俊祐・宮里 裕二・和田 亨, 錯体化学会第64回討論会, 琉球大学(沖縄市), 2014年9月18日.
- 6) “ピロリン酸架橋型二核Ru錯体における支持配位子の変換と性質への影響調査” 宮里 裕二・谷田貝 美那・和田 亨, 錯体化学会第64回討論会, 琉球大学(沖縄市), 2014年9月18日.
- 7) “Water oxidation catalyzed by ruthenium complexes having a Ru-C bond” Wada, T.; Hiraide, N.; Onishi, Y., Miyazato, Y. 2014 International Conference on Artificial Photosynthesis (ICARP2014), 淡路島夢舞台国際会議場(兵庫) 2014年11月25日.

[論文]

- 1) “Measurement of Pore Diffusivity in Separation Media for High Performance Liquid Chromatography” Miyabe, K.; Matsumoto, Y.; Ando, N.; Teratani Y. *Anal. Sci.* **2013**, 29, 315-323. (DOI: 10.2116/analsci.29.315)
- 2) “Moment Equations for Chromatography Based on Langmuir Type Reaction Kinetics” Miyabe, K. *J. Chromatogr. A* **2014**, 1356, 171-179. (DOI: 10.1016/j.chrom.2014.06.052)
- 3) “Moment Analysis of Chromatographic Behavior of Separation Media for Fast HPLC” Miyabe, K.; Murata, Y. *Anal. Sci.* **2014**, 30, 277-283. (DOI: 10.2116/analsci.30.277)

[解説]

- 1) “クロマトグラフィー分離機構のモーメント解析理論” 宮部寛志 *ぶんせき* **2014**, No.11, 604 - 611.

[学会発表]

- 1) “固定相リガンド-溶質分子間相互作用のモーメント解析法の開発” 宮部寛志, 第 74 回分析化学討論会, 日本大学工学部 (郡山市), 2014 年 5 月 24 日
- 2) “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” 島崎裕紀・甲原翔太・宮部寛志, 第 74 回分析化学討論会, 日本大学工学部 (郡山市), 2014 年 5 月 24 日
- 3) “HPLC を用いる分子間相互作用のモーメント解析法の開発” 宮部寛志, 第 27 回バイオメディカル分析科学シンポジウム, 帝京大学板橋キャンパス (東京都板橋区), 2014 年 8 月 20 日
- 4) “Development of New Moment Equations for Chromatography Based on Langmuir Type Reaction Kinetics” Kanji Miyabe, 20th International Symposium on Separation Sciences (ISSS 2014), Hotel DAP (Prague, Czech Republic), 2014 年 8 月 31 日
- 5) “固定相リガンド-試料分子間相互作用のモーメント解析” 宮部寛志・神谷諭司, 日本分析化学会第 63 年会, 広島大学東広島キャンパス (東広島市), 2014 年 9 月 18 日
- 6) “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” 島崎裕紀・豊島 輝・甲原翔太・都築誠二・望月祐志・宮部寛志, 日本分析化学会第 63 年会, 広島大学東広島キャンパス (東広島市), 2014 年 9 月 18 日
- 7) “Chromatographic Behavior in Reversed-Phase Liquid Chromatography Using Water as the Mobile Phase Solvent” Yuuki Shimazaki, Seiji Tsuzuki, Yuji Mochizuki, Kanji Miyabe, Pittsburgh Conference 2015 (Pittcon 2015), Ernest N. Morial Convention Center (New Orleans, LA USA), 2015 年 3 月 8 日
- 8) “Analysis of Equilibrium and Kinetic Characteristics of Intermolecular Interaction between β -Bromo-cyclodextrin and 2-Phenoxypropionic Acid by Liquid Chromatography” Kanji Miyabe, Satoshi Kamiya, Pittsburgh Conference 2015 (Pittcon 2015), Ernest N. Morial Convention Center (New Orleans, LA USA), 2015 年 3 月 11 日

[論文]

- 1) “Unexpected Dehalogenation Reactions of Dichloroborane Bearing a NCN-Pincer Ligand: Formation of a Borenium Salt” Saito, M.; Matsumoto, K.; Fujita, M.; Minoura, M. *Heteroat. Chem.* **2014**, 25, 354-360. (DOI:10.1002/hc.21211)
- 2) “Synthesis, Structure, and Thermolysis of Tetracoordinated 1 λ 4,2-Selenazetidines Bearing Two Chiral Centers at the 3- and 4-Positions” Daicho, Y.; Kano, N.; Yukimoto, M.; Minoura, M.; Kawashima, T. *Heteroat. Chem.* **2014**, 25, 492-499. (DOI:10.1002/hc.21177)
- 3) “Aziridine formation with retention of configuration from a pentacoordinated 1,2-thiazetidine bearing two chiral centers at the 3- and 4-positions” Daicho, Y.; Watanabe, Y.; Kano, N.; Yukimoto, M.; Minoura, M.; Kawashima, T. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2014**, 87, 1005-1012. (DOI:10.1246/bcsj.20140132)
- 4) “Enhancement of stannylene character in stannole dianion equivalents evidenced by NMR and Mossbauer spectroscopy and theoretical studies of newly synthesized silyl-substituted dilithiostannoles” Kuwabara, T.; Guo, J.-D.; Nagase, S.; Minoura, M.; Herber, R. H.; Saito, M. *Organometallics* **2014**, 33, 2910-2913. (DOI:10.1021/om5003717)
- 5) “Fluorinative hydrolysis of phosphorothioic acid esters with a binaphthyl group through axis-to-center chirality transfer leading to the formation of P-chiral phosphorothioic monofluoric acid salts” Murai, T.; Hayashi, T.; Yamada, K.; Maekawa, Y.; Minoura, M. *Chem. Commun.* **2014**, 50, 12473-12475. (DOI:10.1039/C4CC05198J)

[学会発表]

- 1) “SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF α,β -UNSATURATED SULFENIC ACID” Mao MINOURA, Mariko YUKIMOTO, 26th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ORGANIC CHEMISTRY OF SULFUR, (ISTANBUL, TYRKEY), 2014年8月26日
- 2) “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” 行本万里子, 箕浦真生, 第25回基礎有機化学討論会, 東北大学川内北キャンパス・萩ホール(仙台市), 2014年9月7日
- 3) “ α, β -不飽和スルフェン酸からスルフィンへの互変異性化” 行本万里子, 箕浦真生, 第4回CSJ化学フェスタ, タワーホール船堀(東京都), 2014年10月15日
- 4) “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”, 行本万里子, 箕浦真生, 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年11月27日
- 5) “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” 小林 翔・箕浦真生, 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年11月27-29日
- 6) “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”, 箕浦真生, 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年11月28日
- 7) “複数のトリプチシル基を有する嵩高い置換基の合成” 行本万里子, 原奈摘子, 入江達

也，鈴木文陽，野田聡，箕浦真生，日本化学会第 95 春季年会，日本大学理工学部船橋キャンパス，（船橋市）2015 年 3 月 26 日

8) “9-トリプチル基を立体保護基とするエンスルフェン酸の反応性” 行本万里子，箕浦真生，日本化学会第 95 春季年会，日本大学理工学部船橋キャンパス，（船橋市）2015 年 3 月 26 日

9) “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” 浜崎絢子，行本万里子，箕浦真生，日本化学会第 95 春季年会，日本大学理工学部船橋キャンパス，（船橋市）2015 年 3 月 26 日

10) “超原子価(4-FC₆H₄)₅Sb および ToI₄Te 間でのリガンド交換反応” 一瀬 翔・秋葉欣哉・箕浦真生，日本化学会第 95 春季年会，日本大学理工学部船橋キャンパス（千葉） 2015 年 3 月 26-29 日

11) “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” 速川琴菜・小林 翔・箕浦真生，日本化学会第 95 春季年会，日本大学理工学部船橋キャンパス（千葉） 2015 年 3 月 26-29 日

[論文]

1) "The interaction of gold nanoparticles with a TiO₂ film formed on Si(100)" Kakefuda, Y.; Munakata, S.; Edamoto, K.; Igari, Y.; Komeda, T. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2014**, 53, 075002 1-4. (DOI: 10.7567/JJAP.53.075002)

[学会発表]

1) "Comparison of the electronic structure of Ni₂P(0001) and Fe₂P(0001): Soft X-ray photoelectron spectroscopy study" Edamoto, K.; Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.

The 7th International Symposium on Surface Science, November 2014, Matsue, Japan

2) "The electronic structure of a (1×1) TiO₂ thin film on Ag(100): LEED, PES and NEXAFS study" Sugizaki, Y.; Ishida, S.; Nakamura, T.; Chikaba, T.; Yoshikawa, S.; Seimiya, M.; Tanimoto, A.; Kakefuda, Y.; Edamoto, K.; Ozawa, K.

The 7th International Symposium on Surface Science, November 2014, Matsue, Japan

3) "Change in the surface electronic structure of Fe₂P(0001) induced by P segregation" Ishida, S.; Sugizaki, Y.; Nakamura, T.; Edamoto, K.

The 7th International Symposium on Surface Science, November 2014, Matsue, Japan

4) "光電子分光および X 線吸収端微細構造による Ag(110)上の TiO₂ 超薄膜の評価" 杉崎裕一、枝元一之、掛札洋平、小澤健一、間瀬一彦、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、2014 年 7 月、名古屋

5) "Ni₂P(0001)および Fe₂P(0001)の軟 X 線光電子分光" 枝元一之、石田周平、杉崎裕一、中村卓哉、滝川早紀、山口祐太、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、2014 年 7 月、名古屋

6) "遷移金属リン化合物単結晶表面の電子状態" 石田周平、杉崎裕一、中村卓哉、掛札洋平、枝元一之、第 34 回表面科学学術講演会、2014 年 11 月、松江

7) "Ag(110)上に合成した(1×1)TiO₂ 超薄膜の電子状態" 杉崎裕一、石田周平、中村卓哉、枝元一之、掛札洋平、小澤健一、間瀬一彦、近葉善、清宮真由、谷本彩、第 34 回表面科学学術講演会、2014 年 11 月、松江

[論文]

- 1) “Control of the single-molecule magnet behavior of lanthanide-diarylethene photochromic assemblies by irradiation with light” Pinkowicz, D.; Ren, M.; Zheng, L.-M.; Sato, S.; Hasegawa, M.; Morimoto, M.; Irie, M.; Breedlove, B. K.; Cosquer, G.; Katoh, K.; Yamashita, M. *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 12502-12513. (DOI: 10.1002/chem.201402647)
- 2) “Molecular design strategy toward diarylethenes that photoswitch with visible light” Fukaminato, T.; Hirose, T.; Doi, T.; Hazama, M.; Matsuda, K.; Irie, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 17145–17154. (DOI: 10.1021/ja5090749)
- 3) “Anisotropic dissymmetry factor, g : Theoretical investigation on single molecule chiroptical spectroscopy” Wakabayashi, M.; Yokojima, S.; Fukaminato, T.; Shiino, K.-I.; Irie, M.; Nakamura, S. *J. Phys. Chem. A* **2014**, *118*, 5046-5057. (DOI: 10.1021/jp409559t)
- 4) “Photochromism of diarylethene molecules and crystals: Memories, switches, and actuators” Irie, M.; Fukaminato, T.; Matsuda, K.; Kobatake, S. *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 12174-12277. (DOI: 10.1021/cr500249p)

[総説・解説・編著書]

- 1) Irie, M. “Photochromic Polymers” in “Encyclopedia of Polymeric Nanomaterials”, Müllen, K., Kobayashi, S. Editors, Springer, 2013.

[招待講演]

- 1) "Diarylethene Crystals that Convert Light into Mechanical Work: An Approach to Molecular Machinery" (Plenary) Irie, M., NIMS Conference 2014, Tsukuba International Congress Center, Japan, July 1-3, 2014
- 2) “Making and Breaking Bonds with Light: Discovery and Development of Photochromic Diarylethenes” (Porter Medal Lecture) Irie, M., XXVth IUPAC Symposium on Photochemistry, Palais des Congrès in Bordeaux, France, July 13-18, 2014
- 3) “Photochromism of Diarylethene Molecules and Crystals” Irie, M., Le Giornate di Chimica Organica a Pavia, Pavia, Italy, October 15, 2014
- 4) “光機能を創る” 入江正浩, 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年9月26日
- 5) “New Frontiers in Photochromism” Irie, M., Photochromism School, Dourdan, France, December 7-10, 2014
- 6) “光機能を創る” 入江正浩, 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年12月22日

[特許出願]

- 1) “水溶性フォトクロミック分子” PCT 出願, 入江正浩 他

3 班・松下信之

[学会発表]

- 1) “ヘキサシアニド鉄(II)酸電荷移動塩の酸蒸気による二段階ベイポクロミズム” 田中李叶子・松下信之，第4回CSJ化学フェスタ2014，タウンホール船堀（東京），2014年10月14日～16日
- 2) “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” 田中李叶子・松下信之，第8回分子科学討論会，広島大学・東広島キャンパス（東広島市），2014年9月21日～24日
- 3) “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” 田中李叶子・松下信之，錯体化学会第64回討論会，中央大学・後樂園キャンパス（東京），2014年9月18日～20日
- 4) “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” 松下信之・田中李叶子・小中尚・佐々木明登，錯体化学会第64回討論会，中央大学・後樂園キャンパス（東京），2014年9月18日～20日
- 5) “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” 渡邊永治・吉田真那・松下信之，錯体化学会第64回討論会，中央大学・後樂園キャンパス（東京），2014年9月18日～20日
- 6) “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” 上之原和佳・松下信之，錯体化学会第64回討論会，中央大学・後樂園キャンパス（東京），2014年9月18日～20日
- 7) “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” 橋本愛・松下信之，錯体化学会第64回討論会，中央大学・後樂園キャンパス（東京），2014年9月18日～20日
- 8) “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” 眞柄勇希・松下信之，錯体化学会第64回討論会，中央大学・後樂園キャンパス（東京），2014年9月18日～20日
- 9) “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” 田中李叶子・松下信之，第23回有機結晶シンポジウム，東邦大学・習志野キャンパス（船橋市），2014年9月15日～17日
- 10) “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” 和田芳樹・松下信之・大橋直樹，日本物理学会2014年秋季大会，中部大学・春日井キャンパス（春日井市），2014年9月7日～10日

[論文]

- 1) “Control of the single-molecule magnet behavior of lanthanide-diarylethene photochromic assemblies by irradiation with light” Pinkowicz, D.; Ren, M.; Zheng, L.-M.; Sato, S.; Hasegawa, M.; Morimoto, M.; Irie, M.; Breedlove, B. K.; Cosquer, G.; Katoh, K.; Yamashita, M. *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 12502-12513. (DOI: 10.1002/chem.201402647)
- 2) “Photochromic reaction of diarylethenes having phenol moiety as an aryl ring” Yamaguchi, T.; Kamihashi, Y.; Ozeki, T.; Uyama, A.; Kitai, J.; Kasuno, M.; Sumaru, K.; Kimura, Y.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Morimoto, M.; Uchida, K. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2014**, *87*, 528-538. (DOI: 10.1246/bcsj.20130252)
- 3) “Photochromism and fluorescence properties of 1,2-bis(2-alkyl-1-benzothiophene-3-yl)perhydrocyclopentenes” Yamaguchi, T.; Hosaka, M.; Shinohara, K.; Ozeki, T.; Fukuda, M.; Takami, S.; Ishibashi, Y.; Asahi, T.; Morimoto, M. *J. Photochem. Photobiol. A* **2014**, *285*, 44-51. (DOI: 10.1016/j.jphotochem.2014.04.007)
- 4) “A photo- and halochromic multicolor switching system consisting of diarylethene and malachite green moieties” Tatsumi, Y.; Fujinaga, N.; Kasuno, M.; Morimoto, M.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *New J. Chem.* **2014**, *38*, 5706-5714. (DOI: 10.1039/C4NJ00434E)
- 5) “A diarylethene as the SO₂ gas generator upon UV irradiation” Kodama, R.; Sumaru, K.; Morishita, K.; Kanamori, T.; Hyodo, K.; Kamitanaka, T.; Morimoto, M.; Yokojima, S.; Nakamura, S.; Uchida, K. *Chem. Commun.* **2015**, *51*, 1736-1738. (DOI: 10.1039/C4CC07790C)

[招待講演]

- 1) “Photochromism of diarylethene single crystals: photoinduced shape change and photomechanical performance” Morimoto, M., Breaking and Making Bonds with Light Workshop, Colorado, USA, June 30-July 4, 2014.
- 2) “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” 森本正和, 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 年 12 月 12 日

[学会発表]

- 1) “水溶性蛍光ジアリールエテンの合成” 稲留徹・八木亮・高木祐太・森本正和・松浦智夏・片山哲郎・伊都将司・宮坂博・入江正浩, 2014 年光化学討論会, 北海道大学 (札幌市), 2014 年 10 月 11-13 日, 口頭発表
- 2) “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” 千葉宏香・森本正和・入江正浩, 2014 年光化学討論会, 北海道大学 (札幌市), 2014 年 10 月 11-13 日, ポスター発表
- 3) “熱退色型フォトクロミックジアリールエテンの置換基効果” 稲葉航平・森本正和・入江正浩, 2014 年光化学討論会, 北海道大学 (札幌市), 2014 年 10 月 11-13 日, ポスター発表

- 4) “可視光に応答する蛍光性フォトクロミックジアリールエテン” 蕪木智弘・須見貴樹・森本正和・入江正浩, 2014 年光化学討論会, 北海道大学 (札幌市), 2014 年 10 月 11-13 日, ポスター発表
- 5) “ホスホール基を有するフォトクロミックジアリールエテンの合成” 市川智浩・森本正和・入江正浩, 2014 年光化学討論会, 北海道大学 (札幌市), 2014 年 10 月 11-13 日, ポスター発表

3 班 大山秀子

[総説・解説・編著書]

1) “Setsuro Tamaru and Fritz Haber: Links between Japan and Germany in Science and Technology”, Oyama, H. T., *Chem. Rec.*, *in press*. (DOI: 10.1002/tcr.201402086) (招待)

[学会発表]

- 1) “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” 菅野智成・大山秀子, 第 63 回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場 (名古屋), 2014 年 5 月 28 日. ポスター発表
- 2) “ポリ乳酸系水崩壊性ブレンドの加水分解挙動の研究” 谷島大介・大山秀子、前川真太郎・宇杉真一, 第 63 回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場 (名古屋), 2014 年 5 月 28 日. ポスター発表
- 3) “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” 清水祐子・菅野智成・大山秀子, 第 63 回高分子学会年次大会, 名古屋国際会議場 (名古屋), 2014 年 5 月 28 日. ポスター発表
- 4) “Poly(aspartic acid-co-L-lactide) (PAL) and poly(malic acid-co-L-lactide) (PML) as accelerators for hydrolytic degradation of poly(L-lactic acid) (PLLA)” Tanishima, D; Oyama, H. T.; Maekawa, S; Usugi, S., Preprint of Division of Polymeric Materials: Science and Engineering, American Chemical Society (ACS) National Meeting, San Francisco (August 12, 2014). ポスター発表
- 5) “Silica xerogels synthesized using silane monomers and poly(dimethylsiloxane) as precursors” Shimizu, Y; Kanno, T; Oyama, H. T. Preprint of Division of Polymeric Materials: Science and Engineering, 248th American Chemical Society (ACS) National Meeting, San Francisco (August 12, 2014). ポスター発表
- 6) “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” 菅野智成・大山秀子, 第 4 回 CSJ 化学フェスタ 2014, タワーホール船堀 (東京), 2014 年 10 月 14 日～16 日. ポスター発表 (優秀ポスター賞受賞)
- 7) “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” (Effects of uniaxial drawing on the structure and hydrolytic degradation of water-disintegrative poly(L-lactic acid)(PLLA) blend films) 谷島大介・大山秀子, プラスチック成形加工学会 成形加工シンポジウム'14, 朱鷺メッセ 新潟コンベンションセンター (新潟), 2014 年 11 月 14 日. ポスター発表・口頭発表

[招待講演]

- 1) “ブレンド・アロイ化によるポリ乳酸の機能性付与”, 大山秀子, 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 年 10 月 21-22 日
- 2) “Functionalization of Poly(lactic acid) via Alloying and Blending”, Oyama, H. T., Hangzhou Normal University (Nov. 6, 2014), Host: Prof. Yongjin Li (College of Material, Chemistry and Chemical Engineering, Hangzhou Normal University, China)

- 3) “Development of novel poly(propylene carbonate) alloy”, Furuta, M.; Oyama, H. T., Hangzhou Normal University (Nov. 6, 2014), Host: Prof. Yongjin Li (College of Material, Chemistry and Chemical Engineering, Hangzhou Normal University, China)
- 4) “キャリアとライフ～Diversity の視点から”、大山秀子、熊本大学 女性研究者研究活動支援事業 (拠点型) シンポジウム 「多様性が未来を拓く」、基調講演、2014 年 12 月 4 日 熊本大学 (熊本)

[特許出願]

- 1) ”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、特願 2013-224269 (出願日 2013 年 10 月 29 日)
- 2) “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、特願 2013-261424 (出願日 2013 年 12 月 18 日)
- 3) “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、特開 2014-101467 (公開日 2014 年 6 月 5 日)
- 4) “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、特願 2014-167604 (出願日 2014 年 8 月 20 日)
- 5) “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、特許第 5644989 号 (2014 年 11 月 14 日)
- 6) “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、特許第 5649114 号 (2014 年 11 月 21 日)

[論文]

- 1) “Enhanced Photostability of an Anthracene-based Dye due to Supramolecular Encapsulation: A New Type of Photostable Fluorophore for Single-molecule Study” Mitsui, M.; Higashi, K.; Takahashi, R.; Hirumi, Y.; Kobayashi, K. *Photochem. & Photobiol. Sci.*, **2014**, *13*, 1130-1136. (DOI: 10.1039/C4PP00065J)
- 2) “Formation and Electronic Structures of Organoeuropium Sandwich Nanowires” Hosoya, N.; Takegami, R.; Suzumura, J.; Yada, Y.; Miyajima, K.; Mitsui, M.; Knickelbein, M. B.; Yabushita, S.; Nakajima, A. *J. Phys. Chem. A*, **2014**, *118*, 8298-8308. (DOI: 10.1021/jp5011007)
- 3) “Encapsulation with Protrusion of Cruciform 9,10-Bis(arylethynyl)anthracene Derivatives in a Self-assembled Boronic Ester Cavitand Capsule: Photochemical and Photophysical Properties” Hirumi, Y.; Tamaki, K.; Namikawa, T.; Kamada, K.; Mitsui, M.; Suzuki, K.; Kobayashi, K. *Chem. Asian J.* **2014**, *9*, 1282-1290 (DOI: 10.1002/asia.201400042)

[総説・解説・編著書]

- 1) 「光化学の事典 ~だれでもわかる光化学の初歩~」 (朝倉書店) 第9章 9.2, 光化学協会編集, 分担執筆

[学会発表]

- 1) “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” 海野紹・三井正明, 2014年光化学討論会, 北海道大学 札幌キャンパス (札幌市), 2014年10月11日
- 2) “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” 並河知孝・蛭海洋平・玉木健斗・三井正明・小林健二・鎌田賢司, 2014年光化学討論会, 北海道大学 札幌キャンパス (札幌市), 2014年10月11日
- 3) “色素-酸化チタン界面電荷移動の単一分子蛍光分光” 海野紹・三井正明, CSJ 化学フェスタ, タワーホール船堀 (江戸川区), 2014年10月15日