

教員名	益田 祐一 (MASUDA Yuichi)
所 属	理学部化学科
学 位	理学博士 (1984 名古屋大学)
職 名	教授
URL/E-mail	masuda@cc.ocha.ac.jp

## ◆研究キーワード

プロトン移動反応 / 溶媒効果 / 磁気緩和

## ◆主要業績

総数 (1) 件

・ Y. Masuda and C. Shimizu "Solvent Effect on Intramolecular Electron Transfer Rates of Mixed-Valence Biferrocene Monocation Derivatives" J. Phys. Chem. A, 110, 7019-7029 (2006)

## ◆研究内容

プロトン移動反応に伴う電荷移動 (PT) は、周囲の環境とつよく相互作用する。特に溶液中における反応障壁の比較的小さい分子内PTプロセスでは、溶媒和の静的あるいは動的揺らぎが直接そのダイナミックスに参与する。しかしながら、このような系について、PT速度を直接観測した例は、今のところ見あたらない。本研究では、核磁気緩和に対する、PT過程による磁氣的相互作用の揺らぎの寄与を抽出し、溶液中で分子内PT速度を決定する方法を確立するとともに、2, 3のOH... O分子内水素結合系に適用した。また、同様の方法を、NH... H水素結合系へ拡張し、その分子内PT速度を決定した。これらの実験から得られた結果により、これまで行われてきた分子軌道法を中心とする理論計算の結果が、多くの場合、実測値を反映していないことが示されたとともに、この原因として、溶媒との局所的な相互作用の重要性が示唆された。

## ◆教育内容

<学部>

- ・ 「基本化学実験」：化学科新入生に対して、大学における化学特に実験に関する包括的理解と基本的な実験手法についての教育を行う。化学実験を中心に、高大の補完的な内容も含む。
- ・ 「無機実験」：配位結合の概念を機軸におき、基礎的な無機化学の定性実験を通じ、多様な無機化合物の反応を体系づけて学ぶことをめざす。
- ・ 「基礎無機化学」においては、「無機化学」の範疇を超え、今日的意味での、化学における様々なモデルやその背景についての理解を深めることをめざす。また、「分子分光学」においては、分光学の技術的、知識的側面ではなく、量子化学の实在の分子への適用といった側面から、今日の化学が根ざす理論的な背景の理解に努める。
- ・ その他、各種演習、コアクラスタ (オムニバス) など。

<大学院>

- ・ 液体、溶液に関する講義演習。核磁気共鳴法を中心とする分光法の原理と応用、測定技術に関する教育。

## ◆Research Pursuits

---

The charge migration accompanying protontransfer(PT) reactions strongly couples with the environment. Static and dynamic fluctuations of the solvation should contribute the PT dynamics in intramolecular PT processes, which have relatively low reaction barriers in most of the cases. Nevertheless, there is no report of a direct observation the PT rate.

In the present study, an method to determine the PT rates in solutions is presented: extracting the contribution of the fluctuation of magnetic interactions by PT to the magnetic relaxations. The method has been applied to several OH...H and NH...N hydrogenbond systems. The obtained rates were different from those predicted by theoretical and quantum mechanical calculations in many cases. The results were related to contribution of local solute-solvent interactions.

## ◆Educational Pursuits

---

<Undergraduate>

- "Basic Chemistry Experiment": An education for introductive chemical experimental techniques and the comprehension of chemistry at undergraduate level including complementary subjects between undergraduate and high school chemistry.

- "Inorganic Experiment": An education of the comprehension of basic inorganic chemistry through inorganic qualitative analysis and inorganic synthesis based on coordination chemistry as well as techniques for inorganic synthesis..

- "Basic Inorganic Chemistry": A lecture for an education of basic concepts and models in (inorganic) chemistry

- "Molecular Spectroscopy": A lecture for an education of understanding quantum chemistry as well as basic principle of spectroscopies.

<Graduate>

- lectures and seminars accounting for solution chemistry:

Comprehensions of basic concepts and models for solution including applications of various methodologies and their principles.

## ◆将来の研究計画・研究の展望

---

プロトン移動速度に対する溶媒効果の検証: 溶媒の特性を鑑み, P T速度の溶媒依存性について系統的な実験を行う。その結果を基に, 溶媒との相互作用の大きさ, 及び, 溶媒和の揺らぎのダイナミックスとP Tダイナミックスの相互作用メカニズムについて検証を行う。これらの結果は, 溶液中はもとより, 動的静的に揺らぎを持つ媒体中での電荷移動速度についても実証的な予測を可能にすることが期待できる。

## ◆受験生等へのメッセージ

---

自然科学の研究を行うことは, ある意味で, 演奏家の行為に似ている。モツァルトのある作品を解釈するとともに演奏家の個性と融合させながら, 楽器の演奏として表現することは, 自然界のある事象について, 観察・実験を行いその結果を第三者に認識されうる形で表現することと類似である。このような視点に立てば, 学部における様々な勉学は表現手段として, 楽器の演奏に係わる様々な技法・技術の習得に相当している部分が多い。しかしながら, 演奏家にとってもっとも大切なことは, 楽譜から何を感じ取り, また, それが脳髄のフィルターを通して何を表現するか, といった内在的なところである。自然科学を志すものは, 感じ取るみずみずしく鋭いセンサーと, センサーからのインプットと自己を融合させる柔軟な心を持ってほしい。