

# 履 歴 書



氏名           ながおかしんいち  
                  長岡   伸一  
生年月日    昭和31年1月1日生  
本籍地       大阪府  
連絡先       〒790-8577  
                  松山市文京町2番5号  
                  愛媛大学理学部化学科

E-mail nagaoka[a]jd5.so-net.ne.jp

## 学 歴

昭和49年	3月 1日	大阪府立大手前高等学校卒業
同	4月 1日	京都大学理学部入学
同 53年	3月24日	同 卒業
同	4月 1日	京都大学大学院理学研究科修士課程（化学専攻）入学
同 55年	3月24日	同 修了
同	4月 1日	同 博士後期課程 進学
同 58年	3月23日	同 単位取得
同	3月31日	同 退学
同	11月24日	同 修了
同		京都大学理学博士学位授与

## 職 歴

昭和57年	4月 1日	日本学術振興会大学院博士課程奨励研究員
～58年	3月31日	
同 58年	4月 1日	北海道大学応用電気研究所（現在、電子科学研究所） 助手に採用
同 60年	10月 1日	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所分子集団研究系 助手に転任
平成 元年	4月 1日	総合研究大学院大学数物科学研究科助手に併任
～ 元年	10月15日	
同 元年	10月16日	愛媛大学理学部助教授に昇任
同 6年	7月11日	アメリカ合衆国ミネソタ大学化学科客員教授に併任
～7年	1月 9日	
同 11年	4月 1日	岡崎国立共同研究機構分子科学研究所極端紫外光科学研究系助教授に 転任
同 11年	5月 1日	愛媛大学理学部講師に併任
～13年	3月31日	
同 11年	7月 1日	広島大学放射線科学研究センター客員研究員に併任
～14年	6月30日	
同 13年	4月 1日	東京大学物性研究所嘱託研究員に併任
～13年	9月30日	
同 13年	4月 1日	愛媛大学理学部助教授に転任
同 16年	2月 1日	放送大学非常勤講師に併任
～16年	3月31日	
同 17年	8月 1日	愛媛大学理学部教授に昇任
同 18年	4月 1日	愛媛大学大学院理工学研究科教授に配置換
同 19年	10月 1日	三重大学大学院工学研究科非常勤講師に併任
～20年	3月31日	

## 賞罰

- 昭和52年 3月 9日 財団法人学徒援護会京都支部より勤労学生として表彰  
平成 3年 2月 1日 社団法人日本化学会より「化学のフロンティアVII」に選出  
平成 3年 9月22日 社団法人日本化学会より「第6回若い世代の特別講演会講演者」に選出  
平成16年10月27日 日本真空協会より「第29回真空技術賞」受賞  
平成17年12月 9日 Elsevier社より“The ScienceDirect TOP25 Hottest Articles”に選出  
(原著論文No.104)  
平成21年 7月 1日 財団法人高輝度光科学研究センターより“SPRING-8 Research Frontiers 2008”に選出  
平成21年11月23日 American Physical Society and American Institute of PhysicsよりNovember 2009 issue of Virtual Journal of Ultrafast Scienceに選出(原著論文No.137)  
平成22年 5月17日 American Oil Chemists' SocietyよりEdwin Frankel Award受賞(原著論文No.136)  
平成24年 9月16日 BioMedLibよりThe Top 20 Articles Published on the Same Topicに選出(原著論文No.161)  
平成24年11月 2日 フード・アクション・ニッポン アワード2012研究開発・新技術部門最優秀賞受賞(SOAC法の開発、カゴメ株式会社と共同で愛媛大学理学部が機関受賞)  
平成26年 5月 8日 社団法人日本化学会より『CSJ Journal Report 2014』(2012年1号~2014年最新号)における注目論文に選出(総説、解説、その他No.53)  
平成28年 2月 5日 日本コンピュータ化学会より秋季年会2015精選論文に選出(原著論文No.199)  
令和 元年12月18日 愛媛大学理学部より理学部研究奨励賞受賞  
令和 2年12月16日 愛媛大学理学部より理学部研究奨励賞受賞

所属学会 日本化学会

健康状態 良好

## 業績リスト

### 原著論文

\* Corresponding author.

1. N. Hirota,\* M. Baba, Y. Hirata, and **S. Nagaoka**, ODMR and EPR Studies of the Triplet States of Aliphatic and Aromatic Carbonyls, J. Phys. Chem. **83**, 3350-3354 (1979).  
<https://doi.org/10.1021/j100489a008>
2. **S. Nagaoka** and N. Hirota\* A Single Crystal EPR Study of the  $^3\pi\pi^*$  Benzaldehyde in Benzoic Acid Host, J. Chem. Phys. **74**, 1637-1644 (1981).  
<https://doi.org/10.1063/1.441304>
3. **S. Nagaoka**, T. Terao, F. Imashiro, A. Saika, N. Hirota,\* and S. Hayashi, A Study on the Proton Transfer in the Benzoic Acid Dimer by  $^{13}\text{C}$  High-Resolution Solid-State NMR and Proton  $T_1$  Measurements, Chem. Phys. Lett. **80**, 580-584 (1981).  
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(81\)85082-8](https://doi.org/10.1016/0009-2614(81)85082-8)
4. **S. Nagaoka**, N. Hirota,\* T. Matsushita, and K. Nishimoto, An Ab Initio Calculation on Proton Transfer in the Benzoic Acid Dimer, Chem. Phys. Lett. **92**, 498-502 (1982).  
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(82\)87048-6](https://doi.org/10.1016/0009-2614(82)87048-6)
5. **S. Nagaoka**, N. Hirota,\* M. Sumitani, and K. Yoshihara, Investigation of the Dynamic Processes of the Excited States of o-Hydroxybenzaldehyde and o-Hydroxyacetophenone

- by Emission and Picosecond Spectroscopy, *J. Am. Chem. Soc.* **105**, 4220–4226 (1983).  
<https://doi.org/10.1021/ja00351a016>
6. **S. Nagaoka**, T. Terao, F. Imashiro, A. Saika, N. Hirota,\* and S. Hayashi, An NMR Relaxation Study on the Proton Transfer in the Hydrogen Bonded Carboxylic Acid Dimers, *J. Chem. Phys.* **79**, 4694–4703 (1983). <https://doi.org/10.1063/1.445610>
  7. **S. Nagaoka** and N. Hirota,\* Phosphorescence Studies of  $^3\pi\pi^*$  Benzaldehyde, Acetophenone, and 1-Indanone in Benzoic Acid Host, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **56**, 3381–3389 (1983). <https://doi.org/10.1246/bcsj.56.3381>
  8. **S. Nagaoka**, T. Terao, F. Imashiro, N. Hirota,\* and S. Hayashi, Proton Transfer in Solid Benzoic Acid. Reply to the Comment by K. Furic, *Chem. Phys. Lett.* **108**, 524–525 (1984).  
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(84\)85194-5](https://doi.org/10.1016/0009-2614(84)85194-5)
  9. M. Noda, **S. Nagaoka**, and N. Hirota,\* Electron Paramagnetic Resonance and Optical Detection of Magnetic Resonance Studies of the Lowest Excited Triplet States of Purine, Benzimidazole, and Indazole in Benzoic Acid Host Crystals, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **57**, 2376–2382 (1984). <https://doi.org/10.1246/bcsj.57.2376>
  10. **S. Nagaoka**, N. Hirota,\* M. Sumitani, K. Yoshihara, E. Lipczynska-Kochany, and H. Iwamura, Investigation of the Dynamic Processes of the Excited States of o-Hydroxybenzaldehyde and Its Derivatives. 2. Effects of Structural Change and Solvent, *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 6913–6916 (1984). <https://doi.org/10.1021/ja00335a007>
  11. **S. Nagaoka**, T. Takemura, and H. Baba,\* Nucleophilic Photoreaction of Chlorobenzene in Methanol as Studied by Emission Spectroscopy, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **58**, 2082–2087 (1985). <https://doi.org/10.1246/bcsj.58.2082>
  12. **S. Nagaoka**, M. Fujita, T. Takemura, and H. Baba,\* Fluorescence from an Upper Excited State of o-Hydroxybenzaldehyde in the Vapor Phase, *Chem. Phys. Lett.* **123**, 489–492 (1986). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(86\)80048-3](https://doi.org/10.1016/0009-2614(86)80048-3)
  13. **S. Nagaoka**,\* E. T. Harrigan, M. Noda, N. Hirota,\* and J. Higuchi, A Study of the Zero Field Splittings of the Lowest Excited Triplet States of Substituted Benzenes and Related Molecules by Optical Detection of Magnetic Resonance, Electron Paramagnetic Resonance, and Molecular Orbital Calculations, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **59**, 355–361 (1986).  
<https://doi.org/10.1246/bcsj.59.355>
  14. **S. Nagaoka**, T. Takemura, H. Baba,\* N. Koga, and K. Morokuma, Ab Initio Study on the Low-Lying Triplet States of Chlorobenzene, *J. Phys. Chem.* **90**, 759–763 (1986).  
<https://doi.org/10.1021/j100277a012>
  15. T. Takemura,\* M. Fujita, and **S. Nagaoka**, Electronic Structures and Energy Relaxation in Low-Lying Triplet States of Chlorobenzene in Rigid Matrices, *Chem. Phys. Lett.* **130**, 39–42 (1986). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(86\)80421-3](https://doi.org/10.1016/0009-2614(86)80421-3)
  16. S. Suzuki, **S. Nagaoka**, I. Koyano,\* K. Tanaka, and T. Kato, The TEPsICO-II Apparatus at UVSOR and Threshold Electron Spectra of Some Molecules over the Wavelength Range 35–120 nm, *Z. Phys. D* **4**, 111–119 (1986). <https://doi.org/10.1007/BF01432503>
  17. **S. Nagaoka**,\* S. Suzuki, and I. Koyano, Production of  $Pb^+$  Ions Following 5d Core Photoionization of Tetramethyl Lead as Revealed by a Coincidence Experiment, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1524–1527 (1987). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.1524>
  18. **S. Nagaoka**,\* Simple Relation between Arrhenius Activation Parameters for Non-Radiative Processes from Proton-Transferred Forms of Intramolecularly Hydrogen-Bonded Molecules, *J. Photochem. Photobiol. A* **40**, 185–188 (1987).  
[https://doi.org/10.1016/0047-2670\(87\)87054-5](https://doi.org/10.1016/0047-2670(87)87054-5)
  19. **S. Nagaoka**,\* U. Nagashima, N. Ohta, M. Fujita, and T. Takemura, Electronic-State Dependence of Intramolecular Proton Transfer of o-Hydroxybenzaldehyde. *J. Phys. Chem.* **92**, 166–171 (1988). <https://doi.org/10.1021/j100312a036>
  20. **S. Nagaoka**,\* S. Suzuki, and I. Koyano, Investigation of Fragmentation Processes Following Core Photoionization of Organometallic Molecules in the Vapor Phase, *Nucl. Instrum.*

- Methods A **266** , 699–703 (1988). [https://doi.org/10.1016/0168-9002\(88\)90468-8](https://doi.org/10.1016/0168-9002(88)90468-8)
21. K. Ueda,\* E. Shigemasa, Y. Sato, **S. Nagaoka** , I. Koyano, A. Yagishita, T. Nagata, and T. Hayaishi, Ionic Fragmentation Following the 3d Core Excitation of Sn(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub> by Soft X-rays, Chem. Phys. Lett. **154** , 357–362 (1989). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(89\)85369-2](https://doi.org/10.1016/0009-2614(89)85369-2)
22. **S. Nagaoka** ,\* I. Koyano, K. Ueda, E. Shigemasa, Y. Sato, A. Yagishita, T. Nagata, and T. Hayaishi, Site-Specific Fragmentation Following Inner-Core Level Excitation of Pb(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub> in the Vapor Phase, Chem. Phys. Lett. **154** , 363–368 (1989). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(89\)85370-9](https://doi.org/10.1016/0009-2614(89)85370-9)
23. H. Shiromaru, H. Suzuki, H. Sato, **S. Nagaoka** , and K. Kimura,\* Synchrotron Radiation Study on Small Binary Molecular Clusters. Ar–Water and CO<sub>2</sub>–Water Systems, J. Phys. Chem. **93** , 1832–1835 (1989). <https://doi.org/10.1021/j100342a028>
24. **S. Nagaoka** ,\* S. Suzuki, U. Nagashima, T. Imamura, and I. Koyano, Investigation of Fragmentation Processes Following 3d Core Photoexcitation of Trimethylgallium in the Vapor Phase, Rev. Sci. Instrum. **60** , 2201–2204 (1989). <https://doi.org/10.1063/1.1140821>
25. **S. Nagaoka** \* and U. Nagashima, Intramolecular Proton Transfer in Various Electronic States of o-Hydroxybenzaldehyde, in, Spectroscopy and Dynamics of Elementary Proton Transfer in Polyatomic Systems, Chem. Phys. (Special Issue) **136** , 153–163 (1989). [https://doi.org/10.1016/0301-0104\(89\)80043-6](https://doi.org/10.1016/0301-0104(89)80043-6) invited paper.
26. K. Ueda,\* E. Shigemasa, Y. Sato, **S. Nagaoka** , I. Koyano, A. Yagishita, and T. Hayaishi, Ionic Fragmentation Following Core-Level Photoionization of Sn(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub> by Soft X-Rays, Phys. Scr. **41** , 78–82 (1990). <https://doi.org/10.1088/0031-8949/41/1/020>
27. **S. Nagaoka** \* and U. Nagashima, Effects of Nodal Plane of Wave Function upon Photochemical Reactions of Organic Molecules, J. Phys. Chem. **94** , 1425–1431 (1990). <https://doi.org/10.1021/j100367a042>
28. K. Ueda,\* E. Shigemasa, Y. Sato, **S. Nagaoka** , I. Koyano, A. Yagishita, and T. Hayaishi, Ionic Fragmentation Following the Photoionization of Sn(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub> in the 60–260 eV Region, Chem. Phys. Lett. **166** , 391–396 (1990). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(90\)85049-1](https://doi.org/10.1016/0009-2614(90)85049-1)
29. **S. Nagaoka** ,\* S. Suzuki, U. Nagashima, T. Imamura, and I. Koyano, Ionic Fragmentation Processes in Organometallic Molecules of Group II–V Elements Following (n–1)d Core Photoionization, J. Phys. Chem. **94** , 2283–2290 (1990). <https://doi.org/10.1021/j100369a017>
30. M. Ukai,\* K. Kameta, K. Shinsaka, Y. Hatano, T. Hirayama, **S. Nagaoka** , and K. Kimura, Photoionization of (O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>, (O<sub>2</sub>)<sub>3</sub>, and Ar·O<sub>2</sub> in the 50–100 nm Region: State Selective Ionization of O<sub>2</sub> in a Framework of van der Waals Molecules, Chem. Phys. Lett. **167** , 334–340 (1990). [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(90\)87178-T](https://doi.org/10.1016/0009-2614(90)87178-T)
31. **S. Nagaoka** ,\* I. Koyano, and T. Masuoka, Dissociative Double Ionization Following Valence and Al:2p Core Level Photoexcitation of Al(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>, Phys. Scr. **41** , 472–474 (1990). <https://doi.org/10.1088/0031-8949/41/4/020>
32. **S. Nagaoka** \* and U. Nagashima, Ab Initio Study on the Low-Lying Triplet States of Pyridine, J. Phys. Chem. **94** , 4467–4469 (1990). <https://doi.org/10.1021/j100374a022>
33. K. Ueda,\* Y. Sato, **S. Nagaoka** , I. Koyano, A. Yagishita, and T. Hayaishi, Ionic Fragmentation Following the 3p and 3s Core Excitation of Ga(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> by Soft X-Rays, Chem. Phys. Lett. **170** , 389–395 (1990). [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(90\)87039-T](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(90)87039-T)
34. **S. Nagaoka** ,\* Y. Okauchi, S. Urano, U. Nagashima, and K. Mukai, Kinetic and ab Initio Study of the Prooxidant Effect of Vitamin E. Hydrogen Abstraction from Fatty Acid Esters and Egg Yolk Lecithin, J. Am. Chem. Soc. **112** , 8921–8924 (1990). <https://doi.org/10.1021/ja00180a042>
35. U. Nagashima,\* **S. Nagaoka** ,\* and S. Katsumata, Investigation of Dynamic Processes in Low-Lying Ionic States of o-Hydroxybenzaldehyde, J. Phys. Chem. **95** , 3532–3538 (1991). <https://doi.org/10.1021/j100162a020>
36. **S. Nagaoka** \* and U. Nagashima, Effects of Node of Wave Function upon Photochemical Reactions of Organic Molecules. 2, J. Phys. Chem. **95** , 4006–4008 (1991)

37. **S. Nagaoka** ,\* I. Koyano, T. Imamura, and T. Masuoka, Dissociative Photoionization of  $\text{Al}_2(\text{CH}_3)_6$  and  $\text{Al}_2(\text{CH}_3)_3\text{Cl}_3$  in the Range 40–100 eV, *Appl. Organomet. Chem.* 5, 269–276 (1991). <https://doi.org/10.1002/aoc.590050410> invited paper.
38. 倉中綾、澤田公平、長嶋雲兵、長岡伸一\*、向井和男、ビタミンEの抗酸化反応の機構、*ビタミン*、65, 453–458 (1991). [https://doi.org/10.20632/vso.65.9\\_453](https://doi.org/10.20632/vso.65.9_453)
39. E. Hoshimoto, S. Yamauchi, N. Hirota,\* and **S. Nagaoka** ,\* Investigation of Proton-Transferred Enol Tautomers in the Lowest Excited Triplet States of Methyl Salicylate and Related Molecules, *J. Phys. Chem.* 95, 10229–10235 (1991).  
<https://doi.org/10.1021/j100178a003> 招待講演7)の内容.
40. **S. Nagaoka** ,\* A. Kuranaka, H. Tsuboi, U. Nagashima, and K. Mukai,\* Mechanism of Antioxidant Reaction of Vitamin E. Charge Transfer and Tunneling Effect in Proton-Transfer Reaction, *J. Phys. Chem.* 96, 2754–2761 (1992).  
<https://doi.org/10.1021/j100185a065>
41. M. Mimuro,\* U. Nagashima, **S. Nagaoka** , Y. Nishimura, S. Takaichi, T. Katoh, and I. Yamazaki, Quantitative Analysis of the Solvent Effect on the Relaxation Processes of Carotenoids Showing Dual Emissive Characteristics, *Chem. Phys. Lett.* 191, 219–224 (1992).  
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(92\)85291-H](https://doi.org/10.1016/0009-2614(92)85291-H)
42. **S. Nagaoka** ,\* A. Itoh, K. Mukai, E. Hoshimoto, and N. Hirota, Investigation of the Lowest Excited Triplet States of 2-(2'-Hydroxyphenyl)benzothiazole and 2-(2'-Hydroxyphenyl)benzoxazole by Time-Resolved Electron Paramagnetic Resonance and Molecular Orbital Calculations, *Chem. Phys. Lett.* 192, 532–537 (1992).  
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(92\)85511-8](https://doi.org/10.1016/0009-2614(92)85511-8)
43. **S. Nagaoka** ,\* K. Sawada, Y. Fukumoto, U. Nagashima, S. Katsumata, and K. Mukai,\* Mechanism of Prooxidant Reaction of Vitamin E. Kinetic, Spectroscopic, and ab Initio Study of Proton-Transfer Reaction, *J. Phys. Chem.* 96, 6663–6668 (1992).  
<https://doi.org/10.1021/j100195a027>
44. K. Mukai,\* Y. Uemoto, M. Fukuhara, **S. Nagaoka** , and K. Ishizu, ENDOR Study of the Cation Radicals of Vitamin E Derivatives. Relation between Antioxidant Activity and Molecular Structure, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 65, 2016–2020 (1992).  
<https://doi.org/10.1246/bcsj.65.2016>
45. **S. Nagaoka** ,\* K. Mukai,\* T. Itoh, and S. Katsumata, Mechanism of Antioxidant Reaction of Vitamin E. 2. Photoelectron Spectroscopy and ab Initio Calculation, *J. Phys. Chem.* 96, 8184–8187 (1992). <https://doi.org/10.1021/j100199a068>
46. S. Akiyama, S. Yamauchi, N. Hirota,\* and **S. Nagaoka** ,\* Lowest Triplet State of 4-Cyanopyridine Studied by Time-Resolved EPR, Phosphorescence, and ab Initio Calculation, *J. Phys. Chem.* 97, 40–45 (1993). <https://doi.org/10.1021/j100103a010>
47. **S. Nagaoka** ,\* J. Ohshita, M. Ishikawa, T. Masuoka, and I. Koyano, Ionic Fragmentation Processes Following Si:2p Core Level Photoexcitation and Photoionization of 1,1,1-Trimethyltrichlorodisilane, *J. Phys. Chem.* 97, 1488–1495 (1993).  
<https://doi.org/10.1021/j100110a005>
48. M. Mimuro,\* U. Nagashima, **S. Nagaoka** , S. Takaichi, I. Yamazaki, Y. Nishimura, and T. Katoh, Direct Measurement of the Low-Lying Singlet Excited ( $2^1A_g$ ) State of a Linear Carotenoid, Neurosporene, in Solution, *Chem. Phys. Lett.* 204, 101–105 (1993).  
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(93\)85611-Q](https://doi.org/10.1016/0009-2614(93)85611-Q)
49. K. Mukai,\* H. Morimoto, S. Kikuchi, and **S. Nagaoka** , Kinetic Study of Free-Radical-Scavenging Action of Biological Hydroquinones (Reduced Forms of Ubiquinone, Vitamin K and Tocopherol Quinone) in Solution, *Biochim. Biophys. Acta* 1157, 313–317 (1993). [https://doi.org/10.1016/0304-4165\(93\)90115-O](https://doi.org/10.1016/0304-4165(93)90115-O)
50. K. Mukai,\* H. Morimoto, Y. Okauchi, and **S. Nagaoka** , Kinetic Study of Reactions between Tocopheroxyl Radicals and Fatty Acids, *Lipids* 28, 753–756 (1993).

<https://doi.org/10.1007/BF02535999>

51. K. Mukai,\* T. Tamaki, S. Kawasaki, and **S. Nagaoka** , Anomalous Magnetic Property of Crystalline m-Phenylenebis(galvinoxyl) Biradical. An Evidence for the Strong Ferromagnetic Intermolecular Interaction in Biradical Crystal, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **233** , 1–8 (1993).  
<https://doi.org/10.1080/10587259308054942>
52. M. Mimuro,\* Y. Nishimura, S. Takaichi, Y. Yamano, M. Ito, **S. Nagaoka** , I. Yamazaki, T. Katoh, and U. Nagashima, The Effect of Molecular Structure on the Relaxation Processes of Carotenoids Containing a Carbonyl Group, *Chem. Phys. Lett.* **213** , 576–580 (1993).  
[https://doi.org/10.1016/0009-2614\(93\)89163-C](https://doi.org/10.1016/0009-2614(93)89163-C)
53. **S. Nagaoka** ,\* A. Itoh, K. Mukai, and U. Nagashima, Investigation of Triplet States of 2-(2'-Hydroxyphenyl)benzothiazole and 2-(2'-Hydroxyphenyl)benzoxazole by Transient Absorption Spectroscopy and ab Initio Calculations, *J. Phys. Chem.* **97** , 11385–11392 (1993). <https://doi.org/10.1021/j100146a008>
54. K. Mukai,\* S. Ohbayashi, **S. Nagaoka** , T. Ozawa, and N. Azuma, X-Ray Crystallographic Studies of Vitamin E Derivatives. Relationship between Antioxidant Activity and Molecular Structure, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **66** , 3808–3810 (1993).  
<https://doi.org/10.1246/bcsj.66.3808>
55. S. Itoh, **S. Nagaoka** , K. Mukai,\* S. Ikesu, and Y. Kaneko, Kinetic Study of Quenching Reactions of Singlet Oxygen and Scavenging Reactions of Free Radicals by  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -, and  $\delta$ -Tocopheramines in Ethanol Solution and Micellar Dispersion, *Lipids* **29** , 799–802 (1994). <https://doi.org/10.1007/BF02536703>
56. **S. Nagaoka** ,\* J. Ohshita, M. Ishikawa, K. Takano, U. Nagashima, T. Takeuchi, and I. Koyano, Site-Specific Fragmentation Following Si:2p Core-Level Photoexcitation of  $F_3SiCH_2Si(CH_3)_3$  in the Vapor Phase, *J. Chem. Phys.* **102** , 6078–6087 (1995).  
<https://doi.org/10.1063/1.469342>
57. Y. Kohno, Y. Egawa, S. Itoh, **S. Nagaoka** , M. Takahashi, and K. Mukai,\* Kinetic Study of Quenching Reaction of Singlet Oxygen and Scavenging Reaction of Free Radical by Squalene in n-Butanol, *Biochim. Biophys. Acta* **1256** , 52–56 (1995).  
[https://doi.org/10.1016/0005-2760\(95\)00005-W](https://doi.org/10.1016/0005-2760(95)00005-W)
58. **S. Nagaoka** ,\* T. Fujibuchi, U. Nagashima, S. Kato, K. Takano, and I. Koyano, Si:2p Core-Level Photoexcitation and Photoionization of Organosilicon Molecules, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **79** , 499–502 (1996).  
[https://doi.org/10.1016/0368-2048\(96\)02904-0](https://doi.org/10.1016/0368-2048(96)02904-0)
59. **S. Nagaoka** \* and U. Nagashima, Effects of Node of Wave Function upon Excited-State Intramolecular Proton Transfer of Hydroxyanthraquinones and Aminoanthraquinones, *Chem. Phys.* **206** , 353–362 (1996). [https://doi.org/10.1016/0301-0104\(96\)00026-2](https://doi.org/10.1016/0301-0104(96)00026-2)
60. **S. Nagaoka** \* and K. Ishihara, Investigation of Photoinduced Electron Transfer of the Model Vitamin E-Duroquinone System by Means of Femtosecond Spectroscopy, *J. Am. Chem. Soc.* **118** , 7361–7366 (1996). <https://doi.org/10.1021/ja952958d>
61. K. Mase,\* M. Nagasono, S. Tanaka, T. Urisu, and **S. Nagaoka** , Study of Ion Desorption Induced by Core-Level Excitations of Condensed  $Si(CH_3)_4$  by Using Photoelectron-Photoion Coincidence Spectroscopy (PEPICO) Combined with Synchrotron Radiation, *Surf. Sci.* **377–379** , 376–379 (1997).  
[https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(96\)01421-5](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(96)01421-5)
62. **S. Nagaoka** ,\* Y. Shinde, K. Mukai, and U. Nagashima, Electronic-State Dependence of Intramolecular Proton Transfer of o-Hydroxybenzaldehyde. 2. Substituent Effect, *J. Phys. Chem. A* **101** , 3061–3065 (1997). <https://doi.org/10.1021/jp962948e>
63. K. Mukai,\* W. Oka, K. Watanabe, Y. Egawa, **S. Nagaoka** , and J. Terao, Kinetic Study of Free-Radical-Scavenging Action of Flavonoids in Homogeneous and Aqueous Triton X-100 Micellar Solutions, *J. Phys. Chem. A* **101** , 3746–3753 (1997).  
<https://doi.org/10.1021/jp9706745>

64. **S. Nagaoka** ,\* S. Yamamoto, and K. Mukai, Intra-molecular Proton Transfer in the Triplet State of 1-(Acylamino)anthraquinones, *J. Photochem. Photobiol. A* **105** , 29–33 (1997). [https://doi.org/10.1016/S1010-6030\(96\)04576-5](https://doi.org/10.1016/S1010-6030(96)04576-5)
65. **S. Nagaoka** ,\* K. Mase, M. Nagasono, S. Tanaka, T. Urisu, and J. Ohshita, Site-Specific Fragmentation Following Si:2p Core-Level Photoionization of  $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$  Condensed on a Au Surface, *J. Chem. Phys.* **107** , 10751–10755 (1997). <https://doi.org/10.1063/1.474190>
66. **S. Nagaoka** ,\* T. Fujibuchi, J. Ohshita, M. Ishikawa, and I. Koyano, Fragmentation of  $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$  vapour Following Si:2p Core-Level Photoexcitation. A Search for a Site-Specific Process in Complex Molecules, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **171** , 95–103 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0168-1176\(97\)00144-4](https://doi.org/10.1016/S0168-1176(97)00144-4)
67. K. Mukai,\* M. Nuwa, K. Suzuki, **S. Nagaoka** , N. Achiwa, and J. B. Jamali, Magnetic Properties of 3-(4-R-Phenyl)-1,5-diphenyl-6-oxo- and -thioxoverdazyl Radical Crystals (R=OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>, CN, and NO<sub>2</sub>), *J. Phys. Chem. B* **102** , 782–787 (1998). <https://doi.org/10.1021/jp973241a>
68. **S. Nagaoka** ,\* Y. Nishioku, and K. Mukai, Tunneling Effect in the Regeneration Reaction of Vitamin E by Ubiquinol, *Chem. Phys. Lett.* **287** , 70–74 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(98\)00160-2](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(98)00160-2)
69. **S. Nagaoka** ,\* K. Mukai, and U. Nagashima, Ab Initio Study on Magnetic Properties of 1,1',5,5'-Tetramethyl-6,6'-Dithioxo-3,3'-Biverdazyl Homo-Biradical and 3-(2',6'-di-t-Butyl-4'-Phenoxy)-1,5-Dimethyl-6-Thioxoverdazyl Hetero-Biradical, *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* **455** , 199–203 (1998). [https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(98\)00118-3](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(98)00118-3)
70. 澤田公平\*、小野寺祥、榎本裕之、長岡伸一、向井和男、スピンプローブ法を用いたポリ塩化ビニル内部における低分子添加剤の動的挙動、*日本化学会誌*、169–176 (1999). <https://doi.org/10.1246/nikkashi.1999.169>
71. **S. Nagaoka** ,\* J. Kusunoki, T. Fujibuchi, S. Hatakenaka, K. Mukai, and U. Nagashima, Nodal-Plane Model of the Excited-State Intramolecular Proton Transfer of 2-(o-hydroxyaryl)benzazoles, *J. Photochem. Photobiol. A* **122** , 151–160 (1999). [https://doi.org/10.1016/S1010-6030\(99\)00025-8](https://doi.org/10.1016/S1010-6030(99)00025-8)
72. 澤田公平\*、小野寺祥、榎本裕之、長岡伸一、向井和男、スピンラベル法を用いたポリ塩化ビニル樹脂中におけるステアリン酸添加剤の動的挙動、*高分子論文集*、56 , 298–306 (1999). <https://doi.org/10.1295/koron.56.298>
73. 友田英幸\*、北嶋弘一、仲井正徳、山本修太郎、長岡伸一、ラッピングテープによるチタン合金研磨用加工液の開発(第2報)－研磨特性に及ぼす硫黄の影響－、*精密工学会誌*、65 , 851–856 (1999). <https://doi.org/10.2493/jjspe.65.851>
74. **S. Nagaoka** ,\* K. Mase, M. Nagasono, S. Tanaka, T. Urisu, J. Ohshita, and U. Nagashima, Site-Specific Phenomena in Si:2p Core-Level Photoionization of  $X_3Si(CH_2)_nSi(CH_3)_3$  (X=F or Cl, n=0–2) Condensed on a Si(111) Surface, *Chem. Phys.* **249** , 15–27 (1999). [https://doi.org/10.1016/S0301-0104\(99\)00264-5](https://doi.org/10.1016/S0301-0104(99)00264-5)
75. K. Ohara,\* **S. Nagaoka** , and K. Mukai, A CIDEP Study on the Photosensitized Reaction of Maleimide with Xanthone: Addition Effect of Hydrochloric Acid, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **73** , 37–42 (2000). <https://doi.org/10.1246/bcsj.73.37>
76. **S. Nagaoka** ,\* M. Inoue, C. Nishioka, Y. Nishioku, S. Tsunoda, C. Ohguchi, K. Ohara, K. Mukai, and U. Nagashima, Tunneling Effect in Antioxidant, Prooxidant, and Regeneration Reactions of Vitamin E, *J. Phys. Chem. B* **104** , 856–862 (2000). <https://doi.org/10.1021/jp9932113>
77. H. Uno,\* K. Kasahara, N. Nibu, **S. Nagaoka** , and N. Ono, Thermal and Photochemical Isomerization of Tetraaryl Tetrakis(trifluoromethyl)[4]radialenes, *J. Org. Chem.* **65** , 1615–1622 (2000). <https://doi.org/10.1021/jo990699v>
78. K. Mase,\* S. Tanaka, **S. Nagaoka** , and T. Urisu, Ion Desorption Induced by Core-Electron Transitions Studied with Electron-Ion Coincidence Spectroscopy, *Surf. Sci.* **451** , 143–152

- Transitions with Electron-Ion Coincidence Spectroscopy, Surf. Sci. **451**, 145–152 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(00\)00020-0](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(00)00020-0)
79. S. Tanaka,\* K. Mase, M. Nagasono, **S. Nagaoka**, and M. Kamada, Electron-Ion Coincidence Study for the TiO<sub>2</sub>(110) Surface, Surf. Sci. **451**, 182–187 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(00\)00025-X](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(00)00025-X)
80. S. Tanaka,\* K. Mase, M. Nagasono, **S. Nagaoka**, M. Kamada, E. Ikenaga, T. Sekitani, and K. Tanaka, Electron-Ion Coincidence Spectroscopy as a New Tool for Surface Analysis –an Application to the Ice Surface, Jpn. J. Appl. Phys. **39**, 4489–4492 (2000). <https://doi.org/10.1143/JJAP.39.4489>
81. K. Okada, K. Ueda\* T. Tokushima, Y. Senba, H. Yoshida, Y. Shimizu, M. Simon, H. Chiba, H. Okumura, Y. Tamenori, H. Ohashi, N. Saito, **S. Nagaoka**, I. H. Suzuki, E. Ishiguro, I. Koyano, T. Ibuki, and A. Hiraya, High-Resolution Angle-Resolved Ion-Yield Measurements of H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O in the Region of O 1s to Rydberg Transitions, Chem. Phys. Lett. **326**, 314–320 (2000). [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(00\)00802-2](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(00)00802-2)
82. **S. Nagaoka**,\* T. Ibuki, N. Saito, Y. Shimizu, Y. Senba, K. Kamimori, Y. Tamenori, H. Ohashi, and I. H. Suzuki, Resonant Auger Spectrum Following Kr:2p→5s Photoexcitation, J. Phys. B **33**, L605–L610 (2000). <https://doi.org/10.1088/0953-4075/33/17/102>
83. N. Saito,\* K. Ueda, M. Simon, K. Okada, Y. Shimizu, H. Chiba, Y. Senba, H. Okumura, H. Ohashi, Y. Tamenori, **S. Nagaoka**, A. Hiraya, H. Yoshida, E. Ishiguro, T. Ibuki, I. H. Suzuki, and I. Koyano, Molecular Deformation in the O 1s<sup>-1</sup>2π<sub>u</sub> Excited States of CO<sub>2</sub> Probed by the Triple-Differential Measurement of Fragment Ions, Phys. Rev. A **62**, 042503 (5 pages) (2000). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.62.042503>
84. **S. Nagaoka**,\* S. Tanaka, and K. Mase, Site-Specific Fragmentation Following C:1s Core-Level Photoionization of 1,1,1-Trifluoroethane Condensed on a Au Surface and of a 2,2,2-Trifluoroethanol Monolayer Chemisorbed on a Si(100) Surface, J. Phys. Chem. B **105**, 1554–1561 (2001). <https://doi.org/10.1021/jp002994l>
85. Y. Nishioku, K. Ohara,\* K. Mukai, and **S. Nagaoka**, Time-Resolved EPR Investigation of the Photo-induced Intramolecular Antioxidant Reaction of Vitamin K-Vitamin E Linked Molecule, J. Phys. Chem. B **105**, 5032–5038 (2001). <https://doi.org/10.1021/jp004375i>
86. H. Ohashi,\* E. Ishiguro, Y. Tamenori, H. Okumura, A. Hiraya, H. Yoshida, Y. Senba, K. Okada, N. Saito, I. H. Suzuki, K. Ueda, T. Ibuki, **S. Nagaoka**, I. Koyano, and T. Ishikawa, Monochromator for a Soft X-Ray Photochemistry Beamline BL27SU of SPring-8, Nucl. Instrum. Methods A **467–468**, 533–536 (2001). [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(01\)00405-3](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(01)00405-3)
87. K. Ueda,\* H. Yoshida, Y. Senba, K. Okada, Y. Shimizu, H. Chiba, H. Ohashi, Y. Tamenori, H. Okumura, N. Saito, **S. Nagaoka**, A. Hiraya, E. Ishiguro, T. Ibuki, I. H. Suzuki, and I. Koyano, Angle-Resolved Electron and Ion Spectroscopy Apparatus on the Soft X-Ray Photochemistry Beamline BL27SU at SPring-8, Nucl. Instrum. Methods A **467–468**, 1502–1504 (2001). [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(01\)00736-7](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(01)00736-7)
88. **S. Nagaoka**,\* T. Fujibuchi, J. Ohshita, U. Nagashima, and I. Koyano, Si:2p Site-Specific Excitation and Fragmentation of Bridged Trihalosilyl-Trimethylsilyl Molecules: Role of the Bridge and Final-State Effect, Chem. Phys. **276**, 243–256 (2002). [https://doi.org/10.1016/S0301-0104\(01\)00656-5](https://doi.org/10.1016/S0301-0104(01)00656-5)
89. I. H. Suzuki,\* K. Okada, K. Kamimori, J. Sasaki, H. Yoshida, A. Hiraya, Y. Shimizu, **S. Nagaoka**, Y. Tamenori, H. Ohashi, and T. Ibuki, Auger Electron Spectra of Kr2p Holes Using Monochromatic Soft X-Rays, Surf. Rev. Lett. **9**, 63–67 (2002). <https://doi.org/10.1142/S0218625X02001963>
90. T. Ibuki,\* K. Okada, K. Kamimori, J. Sasaki, H. Yoshida, A. Hiraya, I. H. Suzuki, N. Saito, **S. Nagaoka**, Y. Shimizu, H. Ohashi, and Y. Tamenori, Resonant Auger Spectra of Kr near the L<sub>3</sub> Threshold, Surf. Rev. Lett. **9**, 85–88 (2002). <https://doi.org/10.1142/S0218625X02001987>
91. Y. Tamenori,\* K. Okada, **S. Nagaoka**, T. Ibuki, S. Tanimoto, Y. Shimizu, A. Fujii, Y. Haga, H.



Yoshida, H. Ohashi, and I. H. Suzuki, A Study on Multi-Charged Xe Ions Formed through 3d Hole States Using a Coincidence Technique, *J. Phys. B.* **35**, 2799–2809 (2002).  
<https://doi.org/10.1088/0953-4075/35/12/314>

92. S. Nagaoka,\* K. Mase, A. Nakamura, M. Nagao, J. Yoshinobu, and S. Tanaka, Site-Specific Fragmentation Caused by Core-Level Photoionization: Effect of Chemisorption, *J. Chem. Phys.* **117**, 3961–3971 (2002). <https://doi.org/10.1063/1.1494421>
93. S. Tanaka,\* K. Mase, S. Nagaoka, M. Nagasono, and M. Kamada, Ion Desorption Induced by Core-Level Excitation of H<sub>2</sub>O/Si(100): Evidence of Desorption due to the Multielectron Excitation/Decay, *J. Chem. Phys.* **117**, 4479–4488 (2002).  
<https://doi.org/10.1063/1.1496482>
94. S. Nagaoka,\* A. Nakamura, and U. Nagashima, Nodal-Plane Model for Excited-State Intramolecular Proton Transfer of o-Hydroxybenzaldehyde: Substituent Effect, *J. Photochem. Photobiol. A* **154**, 23–32 (2002).  
[https://doi.org/10.1016/S1010-6030\(02\)00305-2](https://doi.org/10.1016/S1010-6030(02)00305-2) invited paper.
95. M. Nagao, S. Nagaoka, S. Tanaka, K. Mukai, Y. Yamashita, and J. Yoshinobu,\* Adsorbed States of 1,1,1-Trifluoro-2-Propanol on Si(100), *Surf. Sci.* **529**, 288–294 (2003).  
[https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(03\)00360-1](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(03)00360-1)
96. 漁剛志、吉田啓晃、下條竜夫、小林英一、間瀬一彦\*、長岡伸一、田中健一郎、高感度同軸対称鏡型電子エネルギー分析器の製作と評価、コインシデンス分光への応用、*真空*、**46**, 377–384 (2003). <https://doi.org/10.3131/jvsj.46.377> 第29回真空技術賞受賞.
97. K. Ohara,\* R. Watanabe, Y. Mizuta, S. Nagaoka, and K. Mukai, Time-Resolved Electron Paramagnetic Resonance Investigation of Photoinitiated Antioxidant Reaction of Vitamin C (Ascorbic Acid) with Xanthone in Aqueous Sodium Lauryl Sulfate, Hexadecyltrimethylammonium Chloride, and Triton X-100 Micelle Solutions, *J. Phys. Chem B* **107**, 11527–11533 (2003). <https://doi.org/10.1021/jp0353486>
98. Y. Tamenori,\* K. Okada, S. Tanimoto, T. Ibuki, S. Nagaoka, A. Fujii, Y. Haga, and I. H. Suzuki, Branching Ratios of Multiply Charged Ions Formed through Photoionization of Kr 3d, 3p and 3s Sub-Shells Using a Coincidence Technique, *J. Phys. B* **37**, 117–129 (2004).  
<https://doi.org/10.1088/0953-4075/37/1/007>
99. I. H. Suzuki,\* A. Fujii, S. Nagaoka, M. Kosugi, K. Okada, T. Ibuki, S. Samori, Y. Tamenori, and H. Ohashi, Asymmetric Peaks of Photoelectrons and Auger Electrons Formed through Post-Collision Interaction Following Kr 2p<sub>3/2</sub> Hole Creation, *J. Phys. B* **37**, 1433–1441 (2004). <https://doi.org/10.1088/0953-4075/37/7/005>
100. T. Ibuki,\* Y. Shimada, S. Nagaoka, A. Fujii, M. Hino, T. Kakiuchi, K. Okada, K. Tabayashi, T. Matsudo, Y. Yamana, I. H. Suzuki, and Y. Tamenori, Total Photoabsorption Cross-Sections of CF<sub>3</sub>SF<sub>5</sub> in the C, F, and S K-Shell Regions, *Chem. Phys. Lett.* **392**, 303–308 (2004).  
<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.04.118>
101. S. Tanaka,\* K. Mase, and S. Nagaoka, Photostimulated Ion Desorption from the TiO<sub>2</sub>(110) and ZnO(1010) Surfaces, *Surf. Sci.* **572**, 43–58 (2004).  
<https://doi.org/10.1016/j.susc.2004.08.020>
102. K. Okada,\* M. Kosugi, A. Fujii, S. Nagaoka, T. Ibuki, S. Samori, Y. Tamenori, H. Ohashi, I. H. Suzuki, and K. Ohno, Variation in Resonant Auger Yields into the <sup>1</sup>G<sub>4</sub>nl States of Kr across the L<sub>3</sub> Threshold, *J. Phys. B* **38**, 421–431 (2005).  
<https://doi.org/10.1088/0953-4075/38/4/009>
103. K. Ohara,\* W. Mizukami, A. Tokunaga, S. Nagaoka, H. Uno, and K. Mukai, Kinetic Study of the Mechanism of Free-Radical Scavenging Action in Curcumin: Effects of Solvent and pH, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **78**, 615–621 (2005). <https://doi.org/10.1246/bcsj.78.615>
104. K. Mukai,\* S. Mitani, K. Ohara, and S. Nagaoka, Structure-Activity Relationship of the Tocopherol-Regeneration Reaction by Catechins, *Free Radical Biol. Med.* **38**, 1243–1256 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2005.01.011> The ScienceDirect TOP25 Hottest Articlesに選出.

105. K. Okada,\* Y. Yamana, T. Ibuki, A. Fujii, S. Nagaoka , K. Tabayashi, Y. Shimada, Y. Morishita, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, and K. Ohno, Vibrational Effect on the Fragmentation Dynamics of the C K-Shell Excited  $CF_2CH_2$ , J. Electron Spectrosc. Related Phenom. **144-147** , 187-189 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2005.01.259>
106. T. Ibuki,\* Y. Shimada, R. Hashimoto, S. Nagaoka , M. Hino, K. Okada, I. H. Suzuki, Y. Morishita, and Y. Tamenori, Photofragmentation of C, F and S K-Shell Excited  $CF_3SF_5$  Studied by PEPICO and PIPICO Spectroscopy, Chem. Phys. **314** , 119-126 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2005.02.008>
107. S. Nagaoka ,\* Y. Tamenori, M. Hino, T. Kakiuchi, J. Ohshita, K. Okada, T. Ibuki, and I. H. Suzuki, Site-Specific Fragmentation Caused by Si:1s Core-Level Photoionization of  $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$  Vapor, Chem. Phys. Lett. **412** , 459-463 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.07.044>
108. K. Mukai, S. Noborio, and S. Nagaoka ,\* Why Is the Order Reversed? Peroxyl-Scavenging Activity and Fats-and-Oils Protecting Activity of Vitamin E, Int. J. Chem. Kinet. **37** , 605-610 (2005). <https://doi.org/10.1002/kin.20114>
109. S. Nagaoka \* and K. Mase, Ion Desorption Caused by N1s Core-Level Photoexcitation of  $N_2O$  on Si(100) Surface, Surf. Sci. **593** , 276-282 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.susc.2005.06.072>
110. S. Nagaoka ,\* A. Tamura, A. Fujii, J. Ohshita, K. Okada, T. Ibuki, I. H. Suzuki, H. Ohashi, and Y. Tamenori, Site-Specific Fragmentation Caused by Core-Level Photoexcitation: Comparison between Si:1s and 2p Photoexcitations in  $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$  Vapor, Int. J. Mass Spectrom. **247** , 101-105 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.ijms.2005.10.003>
111. S. Nagaoka ,\* U. Nagashima, and J. Ohshita, Chemical Shifts in ESCA and NMR: the Case of Bridged Trichlorosilyl-Trimethylsilyl Molecules, Bull. Chem. Soc. Jpn. **79** , 537-548 (2006). <https://doi.org/10.1246/bcsj.79.537>
112. T. Ibuki,\* Y. Tamenori, K. Okada, M. Takemoto, S. Nagaoka , Y. Morishita, and I. H. Suzuki, On the Ionization Energy of  $CF_3SF_5$  in the Valence Region Measured by Angle-Resolved Photoelectron Spectroscopy, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **152** , 96-99 (2006). <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2006.03.009>
113. K. Ohara,\* Y. Ichimura, K. Tsukamoto, M. Ogata, S. Nagaoka , and K. Mukai, Kinetic Study on the Free Radical-Scavenging and Vitamin E-Regenerating Actions of Caffeic Acid and Its Related Compounds, Bull. Chem. Soc. Jpn. **79** , 1501-1508 (2006). <https://doi.org/10.1246/bcsj.79.1501>
114. K. Tabayashi,\* K. Yamamoto, O. Takahashi, Y. Tamenori, J. R. Harries, T. Gejo, M. Iseda, T. Tamura, K. Honma, I. H. Suzuki, S. Nagaoka , and T. Ibuki, Inner-Shell Excitation Spectroscopy and Fragmentation of Small Hydrogen-Bonded Clusters of Formic Acid after Core Excitations at the Oxygen K Edge, J. Chem. Phys. **125** , 194307 (10 pages) (2006). <https://doi.org/10.1063/1.2387949>
115. H. Fukuzawa, G. Prümper, S. Nagaoka , T. Ibuki, Y. Tamenori, J. Harries, X.-J. Liu, and K. Ueda,\* Site-Specific Fragmentation Following F 1s Photoionization of Free  $CF_3SF_5$  Molecules Studied by Electron-Ion Coincidence Spectroscopy, Chem. Phys. Lett. **431** , 253-256 (2006). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2006.09.099>
116. K. Mukai,\* A. Tokunaga, S. Itoh, Y. Kanasaki, K. Ohara, S. Nagaoka , and K. Abe, Structure-Activity Relationship of the Free-Radical-Scavenging Reaction by Vitamin E ( $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -,  $\delta$ -Tocopherols) and Ubiquinol-10: pH Dependence of the Reaction Rates, J. Phys. Chem. B **111** , 652-662 (2007). <https://doi.org/10.1021/jp0650580>
117. S. Nagaoka ,\* G. Prümper, H. Fukuzawa, M. Hino, M. Takemoto, Y. Tamenori, J. Harries, I. H. Suzuki, O. Takahashi, K. Okada, K. Tabayashi, X.-J. Liu, T. Lischke, and K. Ueda, Electron-Ion-Ion Triple-Coincidence Spectroscopic Study of Site-Specific Fragmentation Caused by Si:2p Core-Level Photoionization of  $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$  Vapor, Phys. Rev. A **75** , 020502(R) (4 pages) (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.75.020502>
118. T. Ibuki,\* S. Itoh, Y. Tamenori, K. Okada, S. Nagaoka , Y. Morishita, and I. H. Suzuki, Doppler

118. T. Itoh,\* S. Itoh, T. Tamenori, K. Okada, S. Nagaoka , T. Morishita, and I. H. Suzuki, Doppler Effect in Resonant Excitation of CF<sub>3</sub>SF<sub>5</sub> Probed by Auger Electron Spectroscopy, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **154** , 53–59 (2007).  
<https://doi.org/10.1016/j.elspec.2006.10.010>
119. S. Nagaoka ,\* T. Kakiuchi, K. Ohara, and K. Mukai,\* Kinetics of the Reaction by which Natural Vitamin E Is Regenerated by Vitamin C, *Chem. Phys. Lipids* **146** , 26–32 (2007).  
<https://doi.org/10.1016/j.chemphyslip.2006.12.001>
120. K. Mukai,\* T. Isozaki, and S. Nagaoka ,\* Kinetics of Vitamin E Regeneration by Water-Soluble Antioxidants in Micellar Dispersions, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **80** , 1331–1334 (2007). <https://doi.org/10.1246/bcsj.80.1331>
121. S. Nagaoka ,\* A. Fujii, M. Hino, M. Takemoto, M. Yasuda, M. Mishima, K. Ohara, A. Masumoto, H. Uno, and U. Nagashima, UV Protection and Singlet Oxygen Quenching Activity of Aloesaponarin I, *J. Phys. Chem. B* **111** , 13116–13123 (2007).  
<https://doi.org/10.1021/jp075224j> ; Correction, *ibid.* **116** , 2338–2338 (2012).  
<https://doi.org/10.1021/jp300771q>
122. G. Prümper,\* X. J. Liu, H. Fukuzawa, K. Ueda, J. Harries, Y. Tamenori, and S. Nagaoka , High-Resolution Electron – Momentum Resolved Ion Coincidence Spectroscopy, *J. Phys. Conf. Ser.* **88** , 012008 (8 pages) (2007).  
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/88/1/012008>
123. S. Itoh, S. Nagaoka , and K. Mukai,\* Kinetic Study of the Tocopherol Regeneration Reaction by Biological Hydroquinones in Micellar Solution, *J. Phys. Chem. A* **112** , 448–456 (2008). <https://doi.org/10.1021/jp075894p>
124. K. Ohara,\* T. Origuchi, K. Kawanishi, and S. Nagaoka , Behavior of Singlet Oxygen in Vitamin E Emulsion, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **81** , 345–347 (2008).  
<https://doi.org/10.1246/bcsj.81.345>
125. S. Mitani, A. Ouchi, E. Watanabe, Y. Kanesaki, S. Nagaoka , and K. Mukai,\* Stopped-Flow Kinetic Study of the Aroxyl Radical-Scavenging Action of Catechins and Vitamin C in Ethanol and Micellar Solutions, *J. Agric. Food Chem.* **56** , 4406–4417 (2008).  
<https://doi.org/10.1021/jf703770m>
126. S. Nagaoka ,\* M. Takemoto, G. Prümper, H. Fukuzawa, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, and K. Ueda, Site-Specific Fragmentation Caused by Core-Level Photoionization in F<sub>3</sub>SiCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Si(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> Vapor: Comparison between Si:1s and 2p Photoionizations by Means of Photoelectron-Photoion-Photoion Triple-Coincidence Spectroscopy, *J. Chem. Phys.* **129** , 204309 (7 pages) (2008). <https://doi.org/10.1063/1.3010885>
127. K. Ohara,\* Y. Hashimoto, C. Hamada, and S. Nagaoka , Time-Resolved EPR Investigation on the Photoreactions of Vitamin K with Antioxidant Vitamins in Micelle Systems, *J. Photochem. Photobiol. A* **200** , 239–245 (2008).  
<https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2008.07.011>
128. K. Mukai\* A. Tokunaga, S. Itoh, Y. Kanesaki, A. Ouchi, K. Ohara, S. Nagaoka , and K. Abe, Comparison between the Free-Radical-Scavenging Activities with Vitamin E and Ubiquinol in Biological Systems Based on their Reaction Rates: A Research Account, *BioFactors* **32** , 49–58 (2008). <https://doi.org/10.1002/biof.5520320107>
129. A. Ouchi,\* M. Nakano, S. Nagaoka , and K. Mukai,\* Kinetic Study of the Antioxidant Activity of Pyrroloquinolinequinol (PQQH<sub>2</sub>, a Reduced Form of Pyrroloquinolinequinone) in Micellar Solution, *J. Agric. Food Chem.* **57** , 450–456 (2009). <https://doi.org/10.1021/jf802197d>
130. T. Kakiuchi,\* K. Mukai, K. Ohara, and S. Nagaoka , Tunneling Effect in Antioxidant Reaction of Flavonoid, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **82** , 216–218 (2009).  
<https://doi.org/10.1246/bcsj.82.216>
131. S. Nagaoka ,\* H. Teramae, and U. Nagashima, Computational Study of Excited-State Intramolecular-Proton-Transfer of o-Hydroxybenzaldehyde and Its Derivatives, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **82** , 570–573 (2009). <https://doi.org/10.1246/bcsj.82.570>
132. I. H. Suzuki,\* A. Nitta, A. Shimizu, Y. Tamenori, H. Fukuzawa, K. Ueda, and S. Nagaoka ,

- Photoelectron Spectra of  $F_3SiC_2H_4Si(CH_3)_3$  Molecule Using Monochromatized Synchrotron Radiation, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **173**, 18–23 (2009).  
<https://doi.org/10.1016/j.elspec.2009.03.013>
133. K. Ohara,\* Y. Ichimura, and **S. Nagaoka**, Kinetic Study of Singlet–Oxygen Quenching by Caffeic Acid and Related Phenols, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **82**, 689–691 (2009).  
<https://doi.org/10.1246/bcsj.82.689>
134. A. Ouchi,\* **S. Nagaoka**, K. Abe, and K. Mukai,\* Kinetic Study of the Aroxyl Radical–Scavenging Reaction of  $\alpha$ -Tocopherol in Methanol Solution: Notable Effect of the Alkali and Alkaline Earth Metal Salts on the Reaction Rates, *J. Phys. Chem. B* **113**, 13322–13331 (2009). <https://doi.org/10.1021/jp906425r>
135. U. Nagashima\* and **S. Nagaoka**, Dependence of Chemical Shift Difference on Core–Level, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **82**, 1248–1249 (2009). <https://doi.org/10.1246/bcsj.82.1248>
136. A. Ouchi,\* M. Ishikawa, K. Konishi, **S. Nagaoka**, and K. Mukai,\* Kinetic Study of the Prooxidant Effect of  $\alpha$ -Tocopherol. Hydrogen Abstraction from Lipids by  $\alpha$ -Tocopheroxyl Radical, *Lipids* **44**, 935–943 (2009). <https://doi.org/10.1007/s11745-009-3339-x>  
American Oil Chemists' SocietyよりEdwin Frankel Award受賞.
137. I. H. Suzuki,\* A. Nitta, H. Fukuzawa, K. Ueda, O. Takahashi, Y. Tamenori, and **S. Nagaoka**, Site–Specific Behavior in De–Excitation Spectra of  $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$  in the Si 1s Excitation Region, *J. Chem. Phys.* **131**, 164309 (8 pages) (2009).  
<https://doi.org/10.1063/1.3257639> American Physical Society and American Institute of PhysicsよりNovember 2009 issue of *Virtual Journal of Ultrafast Science*に選出.
138. **S. Nagaoka**,\* A. Nitta, Y. Tamenori, H. Fukuzawa, K. Ueda, O. Takahashi, T. Kakiuchi, Y. Kitajima, K. Mase, and I. H. Suzuki, Auger–Electron Spectra of  $F_3SiCH_2CH_2Si(CH_3)_3$  Obtained by Using Monochromatized Synchrotron Radiation, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **175**, 14–20 (2009). <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2009.06.006>
139. K. Ohara,\* K. Kikuchi, T. Origuchi, and **S. Nagaoka**, Singlet Oxygen Quenching by Trolox C in Aqueous Micelle Solutions, *J. Photochem. Photobiol. B* **97**, 132–137 (2009).  
<https://doi.org/10.1016/j.jphotobiol.2009.08.010>
140. A. Ouchi,\* **S. Nagaoka**, and U. Nagashima, Solvent–Polarity Dependence of Antioxidant Kinetics of Vitamin E, *J. Comput. Chem. Jpn.* **8**, 173–178 (2009).  
<https://doi.org/10.2477/jccj.H2123>
141. K. Ohara,\* A. Shimizu, Y. Wada, and **S. Nagaoka**, Photochemical Formation and Decay of Tocopheroxyl Radical in Vitamin E Emulsion: A Laser–Photolysis Study, *J. Photochem. Photobiol. A* **210**, 173–180 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2010.01.001>
142. K. Ohara,\* T. Origuchi, and **S. Nagaoka**, Singlet Oxygen Lifetime in Vitamin E Emulsion Depends on the Oil–Droplet Size, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **83**, 246–253 (2010).  
<https://doi.org/10.1246/bcsj.20090277>
143. T. Kakiuchi,\* S. Hashimoto, N. Fujita, M. Tanaka, K. Mase, and **S. Nagaoka**, Topmost–Surface–Sensitive Si–2p Photoelectron Spectra of Clean Si(100)– $2 \times 1$  Measured with Photoelectron Auger Coincidence Spectroscopy, *Surf. Sci.* **604**, L27–L30 (2010).  
<https://doi.org/10.1016/j.susc.2010.02.005>
144. A. Ouchi,\* **S. Nagaoka**, and K. Mukai, Tunneling Effect in Regeneration Reaction of Vitamin E by Ubiquinol, *J. Phys. Chem. B* **114**, 6601–6607 (2010).  
<https://doi.org/10.1021/jp910856m>
145. T. Kakiuchi,\* S. Hashimoto, N. Fujita, M. Tanaka, K. Mase, and **S. Nagaoka**, Surface–Site–Selective Study of Valence Electronic Structures of Clean Si(100)– $2 \times 1$  Using Si–L<sub>23</sub> VV Auger Electron–Si–2p Photoelectron Coincidence Spectroscopy, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 064714 (4 pages) (2010). <https://doi.org/10.1143/JPSJ.79.064714>
146. O. Takahashi,\* I. H. Suzuki, Y. Kono, A. Ikeda, T. Ouchi, K. Ueda, I. Higuchi, Y. Tamenori, and **S. Nagaoka**, X–ray Absorption Spectra of SiF<sub>4</sub> and Si(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub> in the Si *K*–Shell Excitation Region, *J. Phys.: Conf. Ser.* **235**, 012018 (8 pages) (2010).  
<https://doi.org/10.1088/1742-6596/235/1/012018>

- <https://doi.org/10.1088/1742-6596/235/1/012018>
147. K. Ohara,\* R. Mitsumori, M. Takebe, D. Kuzuhara, H. Yamada, and **S. Nagaoka** , Vitamin K Analogue as a New Fluorescence Probe for Quantitative Antioxidant Assay, *J. Photochem. Photobiol. A* **215** , 52–58 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2010.07.020>
148. A. Ouchi, K. Aizawa, Y. Iwasaki, T. Inakuma, J. Terao, **S. Nagaoka** , and K. Mukai,\* Kinetic Study of the Quenching Reaction of Singlet Oxygen by Carotenoids and Food Extracts in Solution. Development of a Singlet Oxygen Absorption Capacity (SOAC) Assay Method, *J. Agric. Food. Chem.* **58** , 9967–9978 (2010) . <https://doi.org/10.1021/jf101947a>
149. 長岡伸一\*、寺前裕之、長嶋雲兵、Microsoft Excelを用いた分子軌道の描画の実習、*J. Comput. Chem. Jpn.* **9** , 177–182 (2010). <https://doi.org/10.2477/jccj.H2139>
150. I. H. Suzuki\* Y. Kono, A. Ikeda, T. Ouchi, K. Ueda, O. Takahashi, I. Higuchi, Y. Tamenori, and **S. Nagaoka** , Projection of Excited Orbitals into Kinetic Energies of Emitted Electrons in Resonant Si *KLL* Auger Decays of SiF<sub>4</sub>, *Phys. Rev. A* **82** , 045401 (4 pages) (2010) . <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.82.045401>
151. 長岡伸一\*、寺前裕之、長嶋雲兵、Microsoft Excelを用いた分子軌道の描画の実習(2)－イオン性、分極関数、貫入－、*J. Comput. Chem. Jpn.* **9** , 241–248 (2010). <https://doi.org/10.2477/jccj.H2211>
152. H. Sato,\* K. Tamura, K. Ohara, **S. Nagaoka** , and A. Yamagishi, Hybridization of Clay Minerals with the Floating Film of a Cationic Ir(III) Complex at an Air–Water Interface, *New J. Chem.* **35** , 394–399 (2011). <https://doi.org/10.1039/C0NJ00534G>
153. K. Ohara,\* A. Ikeda, and **S. Nagaoka** , A Photolysis Study on Superoxide Quenching in Water/Oil Interface of Aerosol OT Reversed Micelle, *J. Photochem. Photobiol. A* **218** , 93–100 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2010.12.008>
154. I. H. Suzuki,\* Y. Kono, A. Ikeda, T. Ouchi, K. Ueda, O. Takahashi, I. Higuchi, Y. Tamenori, and **S. Nagaoka** , Projection of Si 1s Photoexcited Orbitals into Resonant Auger Electron Spectra in *KLL* Decays of Si(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub> and SiF<sub>4</sub>, *J. Chem. Phys.* **134** , 084312 (7 pages) (2011). <https://doi.org/10.1063/1.3556942>
155. T. Kakiuchi,\* M. Tahara, S. Hashimoto, N. Fujita, M. Tanaka, K. Mase, and **S. Nagaoka** , Surface–Site–Selective Study of Valence Electronic States of a Clean Si(111)–7 × 7 Surface Using Si L<sub>23</sub> VV Auger Electron and Si 2p Photoelectron Coincidence Measurements, *Phys. Rev. B* **83** , 035320 (7 pages) (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.035320>
156. K. Fukuzawa,\* A. Ouchi, A. Shibata, **S. Nagaoka** , and K. Mukai, Kinetic Study of Aroxyl Radical–Scavenging Action of Vitamin E in Membranes of Egg Yolk Phosphatidylcholine Vesicles, *Chem. Phys. Lipids* **164** , 205–210 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.chemphyslip.2011.01.001>
157. K. Tabayashi,\* Y. Tsutsumi, M. Chohda, O. Takahashi, Y. Tamenori, I. Higuchi, I. H. Suzuki, **S. Nagaoka** , T. Gejo, and K. Honma, Site– and Geometry–Specific CH<sup>•••</sup>O Interaction in Small Acetaldehyde Clusters Studied with Core–Electron Excitation Spectroscopy in the Carbon *K*–edge Region, *J. Phys. Conf. Ser.* **288** , 012022 (11 pages) (2011). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/288/1/012022>
158. K. Aizawa, Y. Iwasaki, A. Ouchi, T. Inakuma, **S. Nagaoka** , J. Terao, and K. Mukai,\* Development of Singlet Oxygen Absorption Capacity (SOAC) Assay Method II. Measurements of the SOAC Values for Carotenoids and Food Extracts, *J. Agric. Food Chem.* **59** , 3717–3729 (2011). <https://doi.org/10.1021/jf104955a>
159. K. Okada,\* A. Suemitsu, T. Terashima, Y. Iwasaki, Y. Tamenori, I. H. Suzuki, **S. Nagaoka** , and K. Tabayashi, Photofragmentation of the K–Shell Excited Perfluorocyclobutane: Anisotropies in the Fragments and Breakdown Pathways, *J. Mass Spectrom.* **46** , 635–639 (2011). <https://doi.org/10.1002/jms.1932>
160. T. Kakiuchi,\* N. Fujita, K. Mase, M. Tanaka, and **S. Nagaoka** , Local Valence Electronic States of SiO<sub>2</sub> Ultrathin Films Grown on Si(100) Studied Using Auger Photoelectron Coincidence Spectroscopy (APECS): Observation of Upward Shift of Valence–Band

- Maximum as a Function of SiO<sub>2</sub> Thickness, *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084703 (6 pages) (2011). <https://doi.org/10.1143/JPSJ.80.084703>
161. S. Nagaoka,\* H. Fukuzawa, G. Prümper, M. Takemoto, O. Takahashi, K. Yamaguchi, T. Kakiuchi, K. Tabayashi, I. H. Suzuki, J. R. Harries, Y. Tamenori, and K. Ueda, A Study to Control Chemical Reactions Using Si:2p Core Ionization: Site-Specific Fragmentation, *J. Phys. Chem. A* **115**, 8822–8831 (2011). <https://doi.org/10.1021/jp203664r>
162. Y. Kohno, M. Fujii, C. Matsuoka, H. Hashimoto, A. Ouchi, S. Nagaoka, and K. Mukai,\* Notable Effects of the Metal Salts on the Formation and Decay Reactions of  $\alpha$ -Tocopheroxyl Radical in Acetonitrile Solution. The Complex Formation between  $\alpha$ -Tocopheroxyl and Metal Cations, *J. Phys. Chem. B* **115**, 9880–9888 (2011). <https://doi.org/10.1021/jp205126a>
163. A. Sagan, 長嶋雲兵\*, 寺前裕之、長岡伸一、LiHの分子軌道エネルギー準位図、*J. Comput. Chem. Jpn.* **10**, 75–77 (2011). <https://doi.org/10.2477/jccj.H2305>
164. S. Nagaoka,\* K. Ohara, M. Takei, M. Nakamura, M. Mishima, and U. Nagashima, UV Protection and Singlet-Oxygen Quenching Activity of Intramolecularly Hydrogen-Bonded Hydroxyanthraquinone Derivatives Found in Aloe, *J. Photochem. Photobiol. A* **225**, 106–112 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2011.10.006>; Corrigendum, *ibid.* **240**, 75–75 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2012.06.007>
165. O. Takahashi,\* K. Yamasaki, S. Nagaoka, and K. Ueda, Molecular Double Core-Hole Electron Spectroscopy of Large Molecules for Probing Molecular Size: A Series of Bridged Trihalosilyl-Trimethylsilyl Molecules, *Chem. Phys. Lett.* **518**, 44–48 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2011.11.006>
166. A. Sagan, 長嶋雲兵\*, 青山智夫、長岡伸一、何故水分子の構造は曲がっていて水酸化アルカリ金属分子は直線なのか?、*J. Comput. Chem. Jpn.* **10**, 105–108 (2011). <https://doi.org/10.2477/jccj.H2310>
167. A. Sagan, 長岡伸一、寺前裕之、長嶋雲兵\*, HeH<sup>+</sup>の分子軌道エネルギー準位図、*J. Comput. Chem. Jpn.* **10**, 147–149 (2011). <https://doi.org/10.2477/jccj.2011-0008>
168. K. Mukai,\* M. Oi, A. Ouchi, and S. Nagaoka, Kinetic Study of the  $\alpha$ -Tocopherol-Regeneration Reaction of Ubiquinol-10 in Methanol and Acetonitrile Solutions: Notable Effect of the Alkali and Alkaline Earth Metal Salts on the Reaction Rates, *J. Phys. Chem. B* **116**, 2615–2621 (2012). <https://doi.org/10.1021/jp2118086>
169. K. Mukai,\* Y. Kohno, A. Ouchi, and S. Nagaoka, Notable Effects of Metal Salts on UV-Vis Absorption Spectra of  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -, and  $\delta$ -Tocopheroxyl Radicals in Acetonitrile Solution. The Complex Formation between Tocopheroxyls and Metal Cations, *J. Phys. Chem. B* **116**, 8930–8941 (2012). <https://doi.org/10.1021/jp305039z>
170. A. Sagan, 長岡伸一、寺前裕之、長嶋雲兵\*, 窒素分子N<sub>2</sub>の最高被占有軌道HOMOは $\sigma$ 型か $\pi$ 型か?, *J. Comput. Chem. Jpn.* **11**, 89–92 (2012). <https://doi.org/10.2477/jccj.2011-0022>
171. K. Mukai,\* A. Ouchi, S. Takahashi, K. Aizawa, T. Inakuma, J. Terao, and S. Nagaoka, Development of Singlet Oxygen Absorption Capacity (SOAC) Assay Method. 3. Measurements of the SOAC Values for Phenolic Antioxidants, *J. Agric. Food Chem.* **60**, 7905–7916 (2012). <https://doi.org/10.1021/jf302021r>
172. K. Okada,\* T. Terashima, A. Suemitsu, I. H. Suzuki, S. Nagaoka, K. Tabayashi, and Y. Tamenori, Photofragmentation of the K-Shell Excited Perfluorocyclobutane Probed by a Multiple-Ion Coincidence Technique, *J. Phys. Conf. Ser.* **388**, 022030 (1 page) (2012). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/388/2/022030>
173. K. Ohara,\* K. Doi, Y. Niizaki, and S. Nagaoka, A Time-Resolved Luminescence Study on Singlet Oxygen Quenching by Hydroxycinnamic Acids under Acidic, Neutral and Basic Conditions, *J. Photochem. Photobiol. A* **249**, 1–8 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2012.08.021>
174. K. Morimoto, T. Nakae, K. Ohara, K. Tamura, S. Nagaoka, and H. Sato,\* Dual Emitting

- Langmuir–Blodgett Films of Cationic Iridium Complexes and Montmorillonite Clay for Oxygen Sensing, *New J. Chem.* **36**, 2467–2471 (2012), inside front–cover article and NJC hot article. <https://doi.org/10.1039/C2NJ40351J>
175. H. Teramae,\* **S. Nagaoka**, and U. Nagashima, A Molecular Orbital Study of the Dipole Moment of HF, LiH, and HeH<sup>+</sup>, *Chem. Lett.* **41**, 1642–1643 (2012).  
<https://doi.org/10.1246/cl.2012.1642>
176. H. Teramae,\* **S. Nagaoka**, and U. Nagashima, Computational Study of Excited–State Intramolecular–Proton–Transfer of o–Hydroxybenzaldehyde, o–Formyl–Substituted Phenols, and 5–Substituted Salicylaldehydes, *Int. J. Chem. Modeling* **4**, 269–287 (2012).  
[http://www.novapublishers.org/catalog/product\\_info.php?products\\_id=31781](http://www.novapublishers.org/catalog/product_info.php?products_id=31781)
177. K. Mase, E. Kobayashi, A. Nambu, T. Kakiuchi, O. Takahashi, K. Tabayashi, J. Ohshita, S. Hashimoto, M. Tanaka, and **S. Nagaoka**,\* Site–Specific Ion Desorption from Condensed F<sub>3</sub>SiCD<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Si(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> Induced by Si–2p Core–Level Ionizations Studied with Photoelectron Photoion Coincidence (PEPICO) Spectroscopy, Auger Photoelectron Coincidence Spectroscopy (APECS) and Auger Electron Photoion Coincidence (AEPICO) Spectroscopy, *Surf. Sci.* **607**, 174–180 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.susc.2012.09.003>
178. I. H. Suzuki,\* Y. Kono, A. Ikeda, M. Oi, T. Ouchi, K. Ueda, Y. Tamenori, O. Takahashi, and **S. Nagaoka**, Cascade Auger Decays Following Si KL<sub>23</sub>L<sub>23</sub> Auger Transitions in SiF<sub>4</sub>, *J. Chem. Phys.* **138**, 024302 (7 pages) (2013). <https://doi.org/10.1063/1.4773344>
179. A. Seike, K. Yamagami, Y. Kakitani, M. Kuwajima, H. Uoyama, **S. Nagaoka**, T. Nakae, S. Mori, T. Okujima, and H. Uno,\* Synthesis, Structure and Properties of Ethyl Naphth[2,3–f]isoindole–1–Carboxylate, *RSC Adv.* **3**, 3006–3016 (2013).  
<https://doi.org/10.1039/C2RA22870J>
180. I. H. Suzuki,\* Y. Kono, K. Sakai, M. Kimura, K. Ueda, Y. Tamenori, O. Takahashi, and **S. Nagaoka**, A Variety of Characteristic Behaviour of Resonant KL<sub>23</sub>L<sub>23</sub> Auger Decays Following Si K–Shell Photoexcitation of SiCl<sub>4</sub>, *J. Phys. B* **46**, 075101 (9 pages) (2013).  
<https://doi.org/10.1088/0953-4075/46/7/075101>
181. M. Kimura, H. Fukuzawa, K. Sakai, S. Mondal, E. Kukk, Y. Kono, **S. Nagaoka**, Y. Tamenori, N. Saito, and K. Ueda,\* Efficient Site–Specific Low–Energy Electron Production via Interatomic Coulombic Decay Following Resonant Auger Decay in Argon Dimers, *Phys. Rev. A* **87**, 043414 (4 pages) (2013). <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.87.043414>
182. **S. Nagaoka**, H. Uno, and D. Huppert,\* Ultrafast Excited–State Intramolecular Proton Transfer of Aloesaponarin I, *J. Phys. Chem. B* **117**, 4347–4353 (2013).  
<https://doi.org/10.1021/jp306870y>
183. K. Mukai,\* A. Ouchi, S. Nakaya, and **S. Nagaoka**, Aroxyl–Radical–Scavenging Rate Increases Remarkably under the Coexistence of  $\alpha$ –Tocopherol and Ubiquinol–10 (or Vitamin C): Finding of Synergistic Effect on the Reaction Rate, *J. Phys. Chem. B* **117**, 8378–8391 (2013). <https://doi.org/10.1021/jp403239q>
184. A. Sagan、中山尚史、長嶋雲兵\*、寺前裕之、長岡伸一、計算されたH<sub>2</sub><sup>–</sup>の基底状態<sup>2</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup>の構造—基底関数依存性—、*J. Comput. Chem. Jpn.* **12**, 190–195 (2013).  
<https://doi.org/10.2477/jccj.2013-0006>
185. **S. Nagaoka**,\* K. Nagai, Y. Fujii, A. Ouchi, and K. Mukai, Development of a New Free Radical Absorption Capacity Assay Method for Antioxidants; Aroxyl Radical Absorption Capacity (ARAC), *J. Agric. Food Chem.* **61**, 10054–10062 (2013).  
<https://doi.org/10.1021/jf402811m>
186. I. H. Suzuki,\* H. Endo, K. Nagai, O. Takahashi, Y. Tamenori, and **S. Nagaoka**, Site–Dependent Si KL<sub>23</sub>L<sub>23</sub> Resonant Auger Electron Spectra Following Inner–Shell Excitation of Cl<sub>3</sub>SiSi(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>, *J. Chem. Phys.* **139**, 174314 (7 pages) (2013).  
<https://doi.org/10.1063/1.4827860>
187. A. Ouchi, K. Ikemoto, M. Nakano, **S. Nagaoka**, and K. Mukai,\* Kinetic Study of Aroxyl Radical–Scavenging and  $\alpha$ –Tocopheroxyl–Regeneration Rates of Pyrroloquinolinequinol (PQQH<sub>2</sub>, a Reduced Form of Pyrroloquinolinequinone) in Dimethyl Sulfoxide Solutions

- (PQQH<sub>2</sub>, a Reduced Form of Pyrroloquinoline) in Dimethyl Sulfoxide Solution: Finding of Synergistic Effect on the Reaction Rate due to the Coexistence of  $\alpha$ -Tocopherol and PQQH<sub>2</sub>, J. Agric. Food Chem. **61**, 11048–11060 (2013).  
<https://doi.org/10.1021/jf4040496>
188. A. Sagan、田島澄恵、中山尚史、長嶋雲兵\*、寺前裕之、長岡伸一、1s電子が作る半結合と単結合—H<sub>2</sub><sup>+</sup>, H<sub>2</sub>, HeH<sup>+</sup>, He<sub>2</sub><sup>+</sup>, He<sub>2</sub><sup>2+</sup>の化学結合—、J. Comput. Chem. Jpn. **12**, 230–234 (2013). <https://doi.org/10.2477/jccj.2013-0024>
189. H. Sato,\* K. Tamura, K. Ohara, and **S. Nagaoka**, Multi-Emitting Properties of Hybrid Langmuir–Blodgett Films of Amphiphilic Iridium Complexes and the Exfoliated Nanosheets of Saponite Clay, New J. Chem. **38**, 132–139 (2014).  
<https://doi.org/10.1039/C3NJ00879G>
190. **S. Nagaoka** ,\* H. Endo, K. Nagai, O. Takahashi, Y. Tamenori, and I. H. Suzuki, Photoelectron and Auger–Electron Spectra of Cl<sub>3</sub>SiSi(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> Obtained by Using Monochromatized Synchrotron Radiation, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **195**, 18–25 (2014).  
<https://doi.org/10.1016/j.elspec.2014.04.009>
191. A. Ouchi, **S. Nagaoka** , T. Suzuki, K. Izumisawa, T. Koike, and K. Mukai,\* Finding of Synergistic and Cancel Effects on the Aroxyl Radical–Scavenging Rate and Suppression of Prooxidant Effect for Coexistence of  $\alpha$ -Tocopherol and  $\beta$ -,  $\gamma$ -, and  $\delta$ -Tocopherols (or  $\delta$ -Tocotrienols), J. Agric. Food Chem. **62**, 8101–8113 (2014).  
<https://doi.org/10.1021/jf502049k>
192. A. Sagan、田島澄恵、中山尚史、長嶋雲兵\*、寺前裕之、長岡伸一、H<sub>3</sub><sup>+</sup>、H<sub>3</sub>、H<sub>3</sub><sup>-</sup>の結合様式と構造、J. Comput. Chem. Jpn. **13**, 250–256 (2014).  
<https://doi.org/10.2477/jccj.2014-0008>
193. K. Mukai,\* E. Ishikawa, A. Ouchi, **S. Nagaoka** , T. Suzuki, K. Izumisawa, and T. Koike, Kinetic Study of the Quenching Reaction of Singlet Oxygen by  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -,  $\delta$ -Tocotrienols and Palm Oil and Soybean Extracts in Solution, Biosci. Biotech. Biochem. **78**, 2089–2110 (2014). <https://doi.org/10.1080/09168451.2014.943653>
194. K. Fukuzawa,\* A. Ouchi, **S. Nagaoka** , A. Shibata, and K. Mukai, A Kinetic Study of the Radical–Scavenging Action of Tocotrienols in the Membranes of Egg Yolk Phosphatidylcholine Vesicles, J. Nutr. Sci. Vitaminol. **60**, 443–446 (2014).  
<https://doi.org/10.3177/jnsv.60.443>
195. **S. Nagaoka** ,\* H. Endo, K. Ohara, and U. Nagashima, Correlation between Excited–State Intramolecular Proton–Transfer and Singlet–Oxygen Quenching Activities in 1-(Acylamino)anthraquinones, J. Phys. Chem. B **119**, 2525–2532 (2015).  
<https://doi.org/10.1021/jp508355k>
196. T. Kakiuchi,\* M. Tahara, K. Mase, and **S. Nagaoka** , Local Valence Electronic States and Valence–Band Maximum of Ultrathin Silicon Nitride Films on Si(111) Studied by Using Auger Photoelectron Coincidence Spectroscopy (APECS): Thickness and Interface Structure Dependence, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 044711 (8 pages) (2015).  
<https://doi.org/10.7566/JPSJ.84.044711>
197. K. Mukai,\* A. Nakamura, **S. Nagaoka** , A. Ouchi, and N. Azuma, Notable Effects of the Metal Salts on the Quenching Reaction of Singlet Oxygen by  $\alpha$ -Tocopherol in Ethanol Solution, Bull. Chem. Soc. Jpn. **88**, 1503–1510 (2015). <https://doi.org/10.1246/bcsj.20150182>
198. K. Mukai,\* E. Ishikawa, T. Abe, A. Ouchi, **S. Nagaoka** , K. Murata, T. Miyazawa, and K. Nakagawa,\* Kinetic Study of the Quenching Reaction of Singlet Oxygen by Seven Rice Bran Extracts in Ethanol Solution. Development of a Singlet Oxygen Absorption Capacity (SOAC) Assay Method, Biosci. Biotech. Biochem. **79**, 2063–2072 (2015).  
<https://doi.org/10.1080/09168451.2015.1069701>
199. 新井健文、長岡伸一、長嶋雲兵、寺前裕之\*、TDDFT法によるOHBAの吸光・発光スペクトルの理論的研究、J. Comput. Chem. Jpn. **14**, 209–210 (2015).  
<https://doi.org/10.2477/jccj.2015-0061> , 日本コンピュータ化学会秋季年会2015精選論文。
200. K. Mukai,\* A. Ouchi, **S. Nagaoka** , M. Nakano, and K. Ikemoto, Pyrroloquinoline Quinone



- (PQQ) Is Reduced to Pyrroloquinoline Quinol (PQQH<sub>2</sub>) by Vitamin C, and PQQH<sub>2</sub> Produced Is Recycled to PQQ by Air Oxidation in Buffer Solution at pH 7.4, *Biosci. Biotech. Biochem.* **80**, 178–187 (2016). <https://doi.org/10.1080/09168451.2015.1072462>
201. S. Nagaoka,\* A. Nitta, A. Suemitsu, and K. Mukai, Tunneling Effect in Vitamin E Recycling by Green Tea, *RSC Adv.* **6**, 47325–47336 (2016). <https://doi.org/10.1039/C6RA05986D>
202. K. Mukai\*, K. Nagai, Y. Egawa, A. Ouchi, and S. Nagaoka, Kinetic Study of Aroxy–Radical–Scavenging and  $\alpha$ –Tocopherol–Regeneration Rates of Five Catecholamines in Solution: Synergistic Effect of  $\alpha$ –Tocopherol and Catecholamines, *J. Phys. Chem. B.* **120**, 7088–7097 (2016). <https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.6b04285>
203. I. H. Suzuki,\* Y. Bandoh, T. Mochizuki, H. Fukuzawa, T. Tachibana, S. Yamada, T. Takanashi, K. Ueda, Y. Tamenori, and S. Nagaoka, Molecular Cascade Auger Decays Following Si KL<sub>23</sub> L<sub>23</sub> Auger Transitions in SiCl<sub>4</sub>, *J. Phys. B* **49**, 165102 (9 pages) (2016). <https://doi.org/10.1088/0953-4075/49/16/165102>
204. S. Nagaoka,\* H. Teramae, and U. Nagashima, Practical Training on Adding Polarization and Diffuse Functions to Basis Set for Molecular Orbital Calculation, *Aust. J. Educ. Chem.* **75**, 8–15 (2016).
205. S. Nagaoka,\* T. Kakiuchi, J. Ohshita, O. Takahashi, and Y. Hikosaka, Site–Specific Electron–Relaxation Caused by Si:2p Core–Level Photoionization: Comparison between F<sub>3</sub>SiCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Si(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> and Cl<sub>3</sub>SiCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>Si(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> Vapors by Means of Photoelectron Auger Electron Coincidence Spectroscopy, *J. Phys. Chem. A* **120**, 9907–9915 (2016). <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.6b09399>
206. K. Mukai,\* A. Ouchi, N. Azuma, S. Takahashi, K. Aizawa, and S. Nagaoka, Development of a Singlet Oxygen Absorption Capacity (SOAC) Assay Method. Measurements of the SOAC Values for Carotenoids and  $\alpha$ –Tocopherol in Aqueous Triton X–100 Micellar Solution, *J. Agric. Food Chem.* **65**, 784–792 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.6b04329>
207. T. Kakiuchi,\* Y. Yoshizaki, H. Kubota, Y. Sato, S. Nagaoka, and K. Mase, Direct Observations of Correlation between Si–2p Components and Surface States on Si(110)–16 × 2 Single–Domain Surface Using Si–L<sub>23</sub>VV Auger–Electron and Si–2p Photoelectron Coincidence Measurements, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 054704 (6 pages) (2017). <https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.054704>
208. S. Nagaoka,\* H. Teramae, and U. Nagashima, Practical Training on Adding Polarization Function to Basis Set for Molecular Orbital Calculation of Ethylene, *J. Comput. Chem. Jpn. Int. Ed.* **3**, 2016–0068 (3 pages) (2017). <https://doi.org/10.2477/jccjie.2016-0068>
209. K. Mukai,\* M. Yoshimoto, M. Ishikura, and S. Nagaoka, Kinetic Study of the Aroxyl–Radical–Scavenging Activity of Five Fatty Acid Esters and Six Carotenoids in Toluene Solution: Structure–Activity Relationship for the Hydrogen Abstraction Reaction, *J. Phys. Chem. B* **121**, 7593–7601 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.7b04570>
210. S. Nagaoka,\* Y. Bandoh, U. Nagashima, and K. Ohara, Correlation among Singlet–Oxygen Quenching, Free–Radical Scavenging, and Excited–State Intramolecular–Proton–Transfer Activities in Hydroxyflavones, Anthocyanidins, and 1–Hydroxyanthraquinones, *J. Phys. Chem. A* **121**, 8069–8079 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b07869>
211. K. Mukai,\* Y. Bandoh, J. Ito, E. Kobayashi, K. Nakagawa, and S. Nagaoka, Kinetic Study of the Scavenging Reaction of the Aroxyl Radical by Eight Kinds of Vegetable Oils in Solution, *J. Am. Oil Chem. Soc.* **95**, 731–742 (2018). <https://doi.org/10.1002/aocs.12076>
212. K. Mukai,\* E. Ishikawa, A. Ouchi, S. Nagaoka, K. Abe, T. Suzuki, and K. Izumisawa, Measurements of Singlet–Oxygen Quenching Activity of Vitamin E Homologues and Palm Oil and Soybean Extracts in a Micellar Solution, *Lipids* **53**, 601–613 (2018). <https://doi.org/10.1002/lipd.12053>
213. S. Nagaoka,\* T. Kokubo, H. Teramae, and U. Nagashima, Practical Training in Simple Hückel Theory: Matrix Diagonalization for Highly Symmetric Molecules and Visualization of Molecular Orbitals, *J. Chem. Educ.* **95**, 1579–1586 (2018).

214. K. Mukai,\* A. Ohara, J. Ito, M. Hirata, E. Kobayashi, K. Nakagawa, and **S. Nagaoka** , Kinetic Study of the Quenching Reaction of Singlet Oxygen by Eight Vegetable Oils in Solution, *J. Oleo Sci.* **68** , 21–31 (2019). <https://doi.org/10.5650/jos.ess18179>
215. T. Kakiuchi,\* K. Ikeda, K. Mase, and **S. Nagaoka** , Local Valence Electronic States of Silicon (Sub)oxides on HfO<sub>2</sub>/Si-(sub)oxide/Si(110) and HfSi<sub>2</sub>/Si-(sub)oxide/Si(110) Islands, *Surf. Sci.* **681** , 9–17 (2019). <http://doi.org/10.1016/j.susc.2018.10.024>
216. **S. Nagaoka** ,\* N. Nakayama, H. Teramae, and U. Nagashima, Correlations of Computational Ionization Energy with Experimental Oxidation Potential and with Antioxidant Efficiencies in Catechins, *Chem. Phys.* **522** , 77–83 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2019.02.002>
217. K. Mukai,\* K. Nagai, A. Ouchi, T. Suzuki, K. Izumisawa, and **S. Nagaoka** , Finding of Remarkable Synergistic Effect on the Aroxyl–Radical–Scavenging Rates under the Coexistence of  $\alpha$ -Tocopherol and Catechins, *Int. J. Chem. Kinet.* **51** , 643–656 (2019). <https://doi.org/10.1002/kin.21284>
218. K. Mukai,\* M. Hirata, J. Ito, T. Shiomi, K. Nakagawa, and **S. Nagaoka** , Kinetic Study of Singlet–Oxygen Quenching and Aroxyl–Radical Scavenging Activities of Vitamin E Homologs and Fatty Acids Present in Vegetable Oils, *J. Oleo Sci.* **69** , 7–22 (2020). <https://doi.org/10.5650/jos.ess19217>
219. 小久保達信、長岡伸一、寺前裕之、長嶋雲兵\*、超高速クラスタ型並列計算機(京)を用いた汎用分子動力学プログラムLAMMPSの高速化、*J. Comput. Chem. Jpn.* **18** , 169–175 (2020). <https://doi.org/10.2477/jccj.2019-0008>
220. H. Sato,\* K. Takimoto, M. Kato, **S. Nagaoka** , K. Tamura, and A. Yamagishi, Real–Time Monitoring of Low Pressure Oxygen Molecules over Wide Temperature Range: Feasibility of Ultrathin Hybrid Films of Iridium(III) Complexes and Clay Nanosheets, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **93** , 194–199 (2020). <https://doi.org/10.1246/bcsj.20190277>
221. **S. Nagaoka** ,\* O. Takahashi, and Y. Hikosaka, Site–Specificity Reduction during Auger Decay Following Si:2p Photoionization in Cl<sub>3</sub>SiSi(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub> Vapor: An Interatomic–Coulombic–Decay–Like Process, *Chem. Phys.* **534** , 110756 (7 pages) (2020). <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2020.110756>
222. K. Mukai,\* Y. Maruoka, S. Kitagaki, and **S. Nagaoka** , Finding of Remarkable Synergistic Effect on the Aroxyl–Radical–Scavenging Rates ( $k_s$ ) under the Coexistence of Vitamin E Homologues (or Vegetable Oils) and Ubiquinol–10: Proposal of a New Mechanism to Explain an Increase of  $k_s$  Value, *J. Oleo Sci.* **69** , 1241–1255 (2020). <https://doi.org/10.5650/jos.ess20091>
223. Y. Shinde, S. Yamamoto, K. Mukai, and **S. Nagaoka** ,\* Investigation of Intramolecular Proton Transfer in Ionic States of  $\sigma$ -Hydroxybenzaldehyde Derivatives by using Electron Spin Resonance Spectroscopy and Computational Chemistry, *Chem. Lett.* **49** , 1399–1402 (2020). <https://doi.org/10.1246/cl.200549>
224. **S. Nagaoka** ,\* Y. Bandoh, S. Matsuhiroya, K. Inoue, U. Nagashima, and K. Ohara, Activity Correlation among Singlet–Oxygen Quenching, Free–Radical Scavenging and Excited–State Proton–Transfer in Hydroxyflavones: Substituent and Solvent Effects, *J. Photochem. Photobiol. A* **409** , 113122 (10 pages) (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2020.113122> ; Erratum, *ibid.* **410** , 113189 (1 page) (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2021.113189>

## 著書

1. **S. Nagaoka** ,\* Atom Tunneling Reaction of Vitamin E in Antioxidant, Prooxidant and Regeneration Reactions, in “Atom Tunneling Phenomena in Physics, Chemistry and Biology,” ed. by T. Miyazaki, Springer–Verlag, Berlin, 2004, pp. 285–303.
2. 長岡伸一\*、原子・分子のX線分光 in X線・放射光の分光(日本分光学会編)、講談社サイエン

ティフィック、東京、2009年、6章 (pp. 109-137)。

3. 長岡伸一\*、愛媛大学「研究室からこんにちは！」7、アトラス出版、愛媛、2013年、pp. 316-332。

## 総説、解説、その他

1. T. Terao,\* T. Akagi, **S. Nagaoka** , F. Imashiro, A. Saika, and N. Hirota, NMR Study of Molecular Dynamics in Some Hydrogen-Bonded Crystals, in "XXIIInd Congress Ampere on Magnetic Resonance and Related Phenomena: Proceedings," ed. By K. A. Müller et al., The University, Zürich, 1984, pp. 353-354.
2. M. Ukai,\* K. Kameta, K. Shinsaka, Y. Hatano, T. Hirayama, **S. Nagaoka** , and K. Kimura, Autoionization of Superexcited ( $O_2$ )<sub>2</sub>, ( $O_2$ )<sub>3</sub>, and  $O_2 \cdot Ar$  Clusters Following VUV Photoexcitation, Atomic Collision Res. Jpn. **15**, 106-107 (1989).
3. 長岡伸一\*、最も簡単な化学反応—プロトン移動—、化学と工業、**44**, 182-187 (1991)、化学のフロンティアVIIに選出。
4. 長岡伸一、上本裕一、福原雅美、石津和彦、向井和男\*、ビタミンEの構造の ENDORとab initio分子軌道計算による研究、磁気共鳴と医学、**2**, 196-200 (1991)。
5. 長岡伸一\*、化学・生物学・物理学における光誘起プロトン移動ダイナミクス、学術月報、**44**, 620-620 (1991)、招待講演4)の報告。
6. 長岡伸一\*、環状星間分子シクロプロペニリデンの化学、化学(1991年の化学)、**46**, 650-650 (1991)。
7. M. Ukai,\* K. Kameta, K. Shinsaka, Y. Hatano, T. Hirayama, **S. Nagaoka** , and K. Kimura, State Selective Ionization of  $O_2$  in a Framework of van der Waals Molecules, in 'Particles and Fields Series 49, Synchrotron Radiation and Dynamic Phenomena', ed. by A. Beswick et al., American Institute of Physics, New York, 1992, pp. 179-189.
8. 長岡伸一\*、大学院教育におけるパーソナルコンピュータを用いた分子軌道法の実習、化学と教育、**40**, 600-603 (1992)。
9. 長岡伸一\*、構造化学研究室の紹介、活性酸素・フリーラジカル、**3**, 720-721 (1992)。
10. 長岡伸一\*、プロトンが移動しない”プロトン移動反応”、化学(1993年の化学)、**48**, 426-426 (1993)。
11. T. Masuoka\* and **S. Nagaoka** , Dissociation Dynamics of Multiply Charged Molecular Ions Following Valence and Core-Level Photoexcitation and Photoionization, Trends Chem. Phys. **3**, 13-31 (1994).  
<http://researchtrends.net/tia/abstract.asp?in=0&vn=3&tid=5&aid=5185&pub=1994&type=3>  
invited paper.
12. 長岡伸一\*、日米科学技術協力事業による派遣の報告、愛媛大学学報、**378**, 12-15 (1995)。
13. 長岡伸一\*、井上雅代、宮崎智光、向井和男、長嶋雲兵、ビタミンEの抗酸化反応のポテンシャル曲面の研究、in 'ビタミンE研究の進歩V'、ビタミンE研究会編、共立出版、東京、1995, pp. 56-62.
14. 森本仁士、菊池清治、長岡伸一、向井和男\*、生体関連ヒドロキノンの抗酸化活性、過酸化脂質研究、**18**, 155-157 (1995)。
15. 長岡伸一\*、プロトン移動の反応機構の研究、愛媛大学機器分析センター報告、**10**, 55-60 (1995)。
16. 岡渉、江川義史、長岡伸一、向井和男\*、寺尾純二、フラボノイドのビタミンE再生反応速度のpH依存性、in 'ビタミンE研究の進歩VI'、ビタミンE研究会編、共立出版、東京、1996, pp. 6-11.
17. 長岡伸一\*、ミネソタ大学Barbara研究室での半年間、光化学、**21**, 64-65 (1996)。
18. K. Mukai,\* W. Oka, Y. Egawa, **S. Nagaoka** , and J. Terao, A Kinetic Study of the Free-Radical-Scavenging Action of Flavonoids in Aqueous Triton X-100 Micellar Solution, in 'Proceedings of the International Symposium on Natural Antioxidants: Molecular Mechanisms and Health Effects', AOCS Press, Champaign, Illinois, 1996, pp. 557-568.
19. 長岡伸一\*、内殻励起によって起こる原子サイトに特有の解離、化学(1996年の化学)、**51**

19. 長岡伸一\*, 内殻励起によって起こる原子軌道間に特有の解離、化学(1996年の化学), 51, 598-599 (1996).
20. 長岡伸一\*, ビタミンEの抗酸化反応と酸化促進反応の機構(総合論文)、ビタミン、70, 413-422 (1996). [https://doi.org/10.20632/vso.70.9\\_413](https://doi.org/10.20632/vso.70.9_413) 招待論文.
21. S. Nagaoka \*, M. Inoue, C. Nishioka, and K. Mukai, Tunneling Effect in Antioxidant and Prooxidant Reactions of Vitamin E, in 'Proceedings of the 2nd Meeting on Tunneling Reaction and Low Temperature Chemistry, JAERI-Conf 96-015', Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai, 1996, pp. 42-51, invited paper.
22. 向井和男\*, 尾方まゆみ、松本英之、江川義史、長岡伸一、コーヒー酸誘導体のフリーラジカル消去活性とそのメカニズム、in 'ビタミンE研究の進歩 VII'、ビタミンE研究会編、共立出版、東京、1997, pp. 20-25.
23. 長岡伸一\*, 井上雅代、西岡千帆、西奥義憲、向井和男、ビタミンEの抗酸化反応機構、in 'KEK Proceedings 97-4'、池田進編、高エネルギー加速器研究機構、つくば、1997, pp. 20-29、招待論文。
24. K. Mukai,\* W. Oka, K. Watanabe, Y. Egawa, S. Nagaoka , and J. Terao, Kinetic Study of Free Radical-Scavenging Action of Flavonoids in Homogeneous and Aqueous Triton X-100 Micellar Solutions, in 'Food Factors for Cancer Prevention', ed. by H. Ohgashi et al., Springer-Verlag, Tokyo, 1997, pp. 627-631.
25. 間瀬一彦\*, 永園充、田中慎一郎、長岡伸一、電子-イオン・コインシデンス分光法を用いた表面分子の内殻電子励起に由来するイオン脱離の研究、放射光、10, 375-391 (1997). <http://www.jssrr.jp/journal/pdf/10-4/p375.pdf> 招待論文
26. S. Nagaoka \* and U. Nagashima, Nodal-Plane Model in Excited-State Intramolecular Proton Transfer, Trends Phys. Chem. 6, 55-87 (1997). <http://researchtrends.net/tia/abstract.asp?in=0&vn=6&tid=16&aid=4912&pub=1997&type=3> invited paper.
27. S. Nagaoka \*, K. Mase, and I. Koyano, Site-Specific Fragmentation Following Core-Level Photoexcitation of Organosilicon Molecules in the Vapor Phase and on the Solid Surface, Trends Chem. Phys. 6, 1-30 (1997). <http://researchtrends.net/tia/abstract.asp?in=0&vn=6&tid=5&aid=1455&pub=1997&type=3> invited paper.
28. 長岡伸一\*, 西奥義憲、小原敬士、向井和男、ビタミンEの再生反応におけるトンネル効果、日本結晶学会誌、40, 119-123 (1998). <https://doi.org/10.5940/jcrsj.40.119> ; 40, 133-133 (1998). <https://doi.org/10.5940/jcrsj.40.133> 招待論文.
29. S. Nagaoka \*, Site-Specific Fragmentation Following Core-Level Photoexcitation -Control of Chemical Reaction with Synchrotron Radiation-, Proceedings of the 2nd Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation, 347-359 (1998)、invited paper.
30. 長岡伸一\*, 長嶋雲兵、励起状態分子内プロトン移動における節面モデル、光化学、28, 39-44 (1998)、招待論文。
31. K. Mukai,\* Y. Kanasaki, Y. Egawa, and S. Nagaoka , Free Radical-Scavenging Action of Catechin and Related Compounds in Homogeneous and Micellar Solutions, in 'Phytochemicals and Phytopharmaceuticals', ed by F. Shahide and C.-T. Ho, AOCS Press, Champaign, Illinois, 2000, pp. 222-238.
32. 小原敬士\*, 恵谷優子、長岡伸一、向井和男、時間分解ESR法によるビタミンE類の一重項酸素消光速度の測定、in 'ビタミンE研究の進歩 IX'、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2001, pp. 1-6.
33. 西奥義憲、長岡伸一\*, 向井和男、ビタミンCによるビタミンE再生反応におけるトンネル効果の研究、in 'ビタミンE研究の進歩 IX'、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2001, pp. 43-47.
34. I. H. Suzuki,\* N. Saito, S. Nagaoka , T. Ibuki, Y. Shimizu, Y. Tamenori, H. Ohashi, Y. Senba, and K. Kamimori, Observation of Resonant Auger Electron Emission Following Photoexcitation of the Kr 2p Electron to the 5s Orbital, Atomic Collision Res. Jpn. 26, 69-70 (2000).

35. I. H. Suzuki,\* N. Saito, T. Ibuki, K. Okada, K. Kamimori, J. Sasaki, **S. Nagaoka**, Y. Shimizu, Y. Tamenori, and H. Ohashi, Variation in Kr<sub>2p</sub> Auger Electron Spectra near the L<sub>3</sub> threshold, *Atomic Collision Res. Jpn.* **27**, 53–54 (2001).
36. 小原敬士\*、西奥義憲、**長岡伸一**、向井和男、時間分解ESR法によるビタミンK-ビタミンE連結分子の光誘起分子内抗酸化反応の研究、in “ビタミンE研究の進歩X”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2002, pp. 72–77.
37. 三谷修二、小原敬士、**長岡伸一**、向井和男\*、茶カテキンとその関連化合物によるビタミンE再生反応の速度論的研究、in “ビタミンE研究の進歩X”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2002, pp. 101–107.
38. **長岡伸一** \*、内殻励起後のサイト選択的解離の研究、*真空*、**46**, 3–8 (2003).  
<https://doi.org/10.3131/jvsj.46.3> 招待論文.
39. K. Mase, M. Nagasono, S. Tanaka, T. Sekitani, and **S. Nagaoka** \*, Ion Desorption from Molecules Condensed at Low Temperature: A Study with Electron–Ion Coincidence Spectroscopy Combined with Synchrotron Radiation, *Fizika Nizkikh Temperatur* **29**, 321–341 (2003); *Low Temp. Phys.* **29**, 243–258 (2003). <https://doi.org/10.1063/1.1542445>
40. **長岡伸一** \*, ビタミンE及び関連分子の抗酸化反応、酸化促進反応、再生反応における水素量子アトムクス、in “KEK Proceedings 2004–9”、池田進編、高エネルギー加速器研究機構、つくば、2004, pp. 59–60、招待論文。
41. E. Kobayashi,\* K. Mase, A. Nambu, J. Seo, S. Tanaka, K. K. Okudaira, **S. Nagaoka** , and M. Tanaka, Recent Progress in Study of Ion Desorption Induced by Core Excitation Using Coincidence Spectroscopy, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, S1389–S1408 (2006).  
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/18/30/S03> invited paper.
42. **S. Nagaoka** \*, A Short History of Three Chemical Shifts, *J. Chem. Educ.* **84**, 801–802 (2007). <https://doi.org/10.1021/ed084p801>
43. 向井和男\*、徳永愛子、伊藤慎吾、大内綾、兼崎友、小原敬士、**長岡伸一**、阿部皓一、ビタミンE同族体のミセル中におけるラジカル消去反応速度と生物活性の相関、in “ビタミンE研究の進歩XIII”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2009, pp. 35–41.
44. **長岡伸一**\*、藤井亜紀子、日野めぐみ、竹本真唯、保田三沙貴、三島麻里子、小原敬士、榎本茜、宇野英満、長嶋雲兵、アロエサポナリンIの紫外線防御と一重項酸素消去機能、*ビタミン*、**83**, 288–289 (2009). <https://doi.org/10.20632/vso.83.5-6.288>
45. **長岡伸一** \*, 気相における内殻励起と電子分光(特別講座)、*分光研究*、**58**, 137–148 (2009).
46. **S. Nagaoka** \*, G. Prümper, and K. Ueda, A Molecular Knife – Control of Chemical Reactions using Core Ionization in “SPRING-8 Research Frontiers 2008,” Japan Synchrotron Radiation Research Institute, Sayo-cho, 2009, pp. 114–115.  
[http://www.spring8.or.jp/pdf/en/res\\_fro/08/Research\\_Frontiers\\_2008\\_%20web.pdf](http://www.spring8.or.jp/pdf/en/res_fro/08/Research_Frontiers_2008_%20web.pdf)
47. **長岡伸一** \*, 大内綾、垣内拓大、小原敬士、向井和男、ビタミンEの再生反応における量子論的効果(総合論文)、*ビタミン*、**83**, 521–527 (2009). <https://doi.org/10.20632/vso.83.9.521>
48. **長岡伸一** \*, 小原敬士、活性酸素の発生と消滅の研究—体の錆を知られば老化は遅らせる—、*月刊愛媛ジャーナル*、**22年9月号**, 84–87 (2010).
49. 大内綾\*、**長岡伸一**、向井和男\*、ユビキノールによるビタミンEラジカル再生反応におけるトンネル効果、in “ビタミンE研究の進歩XIV”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2010, pp. 1–6.
50. 大内綾\*、**長岡伸一**、阿部皓一、向井和男\*、ビタミンEのラジカル消去反応に及ぼすアルカリ及びアルカリ土類金属塩の効果、in “ビタミンE研究の進歩XIV”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2010, pp. 51–56.
51. 大内綾\*、石倉正治、小西健介、**長岡伸一**、向井和男\*、 $\alpha$ -Tocopherolの酸化促進効果の速度論的研究： $\alpha$ -Tocopheroxylラジカルによる脂質の水素引き抜き反応速度の測定、in “ビタミンE研究の進歩XIV”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2010, pp. 107–112.
52. 福澤健治\*、大内綾、柴田瑩、**長岡伸一**、向井和男、卵黄レシチンリポソーム膜におけるビタミンEのラジカル消去反応速度、*ビタミン*、**85**, 651–654 (2011).  
<https://doi.org/10.20632/vso.85.12.651>

53. S. Nagaoka ,\* H. Teramae, and U. Nagashima, A Revisit to Molecular Orbitals in  $H_2^+$ , LiH, HF, and Hybridization (Highlight Review), Chem. Lett. **41**, 9–14 (2012).  
<https://doi.org/10.1246/cl.2012.9>、『CSJ Journal Report 2014』(2012年1号～2014年最新号)における注目論文。
54. 佐藤久子\*、田村堅志、長岡伸一、発光性イリジウム錯体LB膜を用いたセンシングデバイス、月刊ケミカルエンジニアリング、**57**, 375–380 (2012).
55. 大内綾\*、大井正則、長岡伸一、向井和男、ユビキノールによるビタミンEの再生反応に及ぼす金属塩の効果とメカニズム(総合論文)、ビタミン、**86**, 293–302 (2012).  
[https://doi.org/10.20632/vso.86.5-6\\_293](https://doi.org/10.20632/vso.86.5-6_293)
56. 福澤健治\*、柴田瑩、大内綾、長岡伸一、向井和男、卵黄レシチンリポソーム膜におけるビタミンEのラジカル消去反応速度、in “ビタミンE研究の進歩XV”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2012, pp. 124–127.
57. 長岡伸一\*、河野優太郎、大内綾、向井和男、アセトニトリル中におけるビタミンEラジカルの紫外可視吸収スペクトルへの金属イオンの効果—ビタミンEラジカルと金属陽イオンの錯形成—、ビタミン、**87**, 152–153 (2013). [https://doi.org/10.20632/vso.87.3\\_152](https://doi.org/10.20632/vso.87.3_152)
58. S. Nagaoka ,\* H. Teramae, and U. Nagashima, Three-Dimensional Visualization of Wavefunctions for Rotating Molecule: Plot of Spherical Harmonics, J. Chem. Educ. **90**, 669–670 (2013). <https://doi.org/10.1021/ed300789w>
59. 垣内拓大\*、間瀬一彦、長岡伸一、オージェ電子—光電子コインシデンス分光によるシリコン単結晶表面および酸化シリコン超薄膜の局所電子状態の研究、ぶんせき、374–380 (2014).
60. 長岡伸一\*、小原敬士、アロエ含有物によるUVケアの研究—紫外線防御と一重項酸素消去作用、フレグランスジャーナル、**43** (6), 67–72 (2015).
61. 長岡伸一\*、小原敬士、알로에 함유에 의한 UV케어의 연구 - 자외선방어와 일중항산소의 소거작용、Fragrance J. Korea **2015-7**, 88–93 (2015)、公式ハンゲル訳。
62. 長岡伸一\*、高橋京香、中村明日香、小原敬士、向井和男、ビタミンEの一重項酸素消去速度に及ぼす金属塩の効果、in “ビタミンE研究の進歩XVII”、ビタミンE研究会編、ビタミンE研究会、東京、2016, pp. 53–56.
63. 長岡伸一\*、表紙とその言葉、化学と教育、**65**, front-cover and 371 (2017).
64. S. Nagaoka ,\* Y. Yamasaki, H. Teramae, U. Nagashima, and T. Kokubo, Addition to “Practical Training in Simple Hückel Theory: Matrix Diagonalization via Tridiagonalization, Cyclobutadiene, and Visualization of Molecular Orbitals,” J. Chem. Educ. **97**, 2373–2374 (2020). <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00857>

## 国内及び国外の学会などにおける招待講演リスト

○発表者

- S. Nagaoka and N. Hirota, Proton Transfer and Nonradiative Decay Processes of Salicylaldehyde, One-Day Discussion on Electron Transfer and Proton Transfer in the Excited State, October 27, 1982, Okazaki.
- S. Nagaoka , Investigation of Fragmentation Processes Following Core Photoionization of Organometallic Molecules in the Vapor Phase, The 28th Okazaki Conference on Solid State Chemistry with VUV Synchrotron Radiation, February 5–7, 1987, Okazaki.
- 長岡伸一、サリチルアルデヒドの高位電子励起状態からの蛍光、「孤立分子・分子間化合物の励起状態ダイナミクス」研究会、1987年4月18日、岡崎。
- 長岡伸一、トリメチルガリウムの内殻励起後の解離過程、第9回UVSOR研究会、1987年11月27–28日、岡崎。
- T. Masuoka, I. Koyano, and S. Nagaoka , Dissociative Double Photoionization of Some Polyatomic Molecules, International Symposium on VUV–SX Physics and Chemistry, July 24–26, 1989, Okazaki.
- T. Hirayama, S. Nagaoka , and K. Kimura, Photoionization Efficiency Curves of Water–Ethylene Clusters, International Symposium on VUV–SX Physics and Chemistry,

July 24–26, 1989, Okazaki.

7. E. Hoshimoto, S. Yamauchi, N. Hirota, and O. S. Nagaoka, Investigation of Proton-Transferred Enol Tautomers in the Lowest Excited Triplet States of Methylsalicylate and Related Molecules, Photoinduced Proton Transfer Dynamics in Chemistry, Biology, and Physics in Honor of Michael Kasha, January 6–9, 1991, Tallahassee.
8. O. 長岡伸一、励起状態におけるプロトン移動反応の研究、日本化学会第62秋季年会(第6回若い世代の特別講演会)、1991年9月22–25日、札幌。
9. O.K. Mukai, T. Tamaki, S. Kawasaki, and O. S. Nagaoka, Anomalous Magnetic Property of Crystalline *m*-Phenylenebis(galvinoxyl) Biradical, International Symposium on Chemistry and Physics of Molecular Based Magnetic Materials, October 25–30, 1992, Tokyo.
10. O.K. Mukai, W. Oka, Y. Egawa, O. S. Nagaoka, and J. Terao, Kinetic Study of Free-Radical-Scavenging Action of Flavonoids in Aqueous Triton X-100 Micellar Solution, International Symposium on Natural Antioxidants: Molecular Mechanisms and Health Effects, June 20–24, 1995, Beijing.
11. O. 長岡伸一、極紫外光を用いた内殻励起後の原子サイトに特有の解離プロセスの研究、分子科学研究所研究会「極紫外光プロセスの基礎」、1995年8月2–3日、岡崎。
12. O. S. Nagaoka, Effects of Node of Wave Function upon Excited-State-Intramolecular-Proton-Transfer of Hydrogen-Bonded Molecules, The 54th Okazaki Conference, Dynamic Studies of Hydrogen Atom Transfer Reactions, January 23–25, 1996, Okazaki.
13. O. 長岡伸一、内殻励起による解離プロセス、電気学会「放射光による材料加工技術調査専門委員会」・応用物理学会「光励起プロセス委員会」合同研究会、1996年1月26日、東京(内容は、電気学会技術報告第659号にまとめられた)。
14. O. 長岡伸一、ビタミンEのトンネル反応、第2回低温化学セミナー「トンネル反応と生物効果」、1996年8月22–23日、東海。
15. O. 長岡伸一、内殻サイトに特有な分子解離、分子科学研究所研究会「放射光とレーザーを併用した分子科学の展望」、1996年10月28–29日、岡崎。
16. O. 長岡伸一、ビタミンEの抗酸化反応機構、水素の科学:水素が作る構造と機能、1997年3月14–15日、つくば。
17. O.K. Mukai, Y. Kanesaki, Y. Egawa, and O. S. Nagaoka, Stopped-Flow Kinetic Study of the Free-Radical Scavenging Action of Epicatechin and Related Compounds in Homogeneous and Micellar Solutions, 5th Chemical Congress of North America, November 11–15, 1997, Mexico.
18. O. 長岡伸一、内殻励起後の原子サイトに選択的な反応—放射光による化学反応制御—、第2回広島放射光国際シンポジウム、1998年3月17–18日、東広島。
19. O. 長岡伸一、内殻励起後の原子サイトに選択的な反応—放射光による化学反応制御—、第3回光科学コロキウム、1998年11月25日、東広島。
20. O. S. Nagaoka, K. Mase, M. Nagasono, S. Tanaka, T. Urisu, J. Ohshita, and U. Nagashima, Site-Specific Fragmentation following Core-Level Photoexcitation on Surface, Nagoya COE Conference on Functionality and Characterization of Molecular Systems, January 7–8, 1999, Nagoya.
21. O. S. Nagaoka, M. Inoue, C. Nishioka, Y. Nishioku, K. Mukai, and U. Nagashima, Tunneling Effect in Antioxidant, Prooxidant, and Regeneration Reactions of Vitamin E, 3rd International Conference on Low Temperature Chemistry, July 26–30, 1999, Nagoya.
22. O. 長岡伸一、内殻励起を用いた表面脱離の研究;分子メスへの応用をめざして、日本物理学会秋の分科会、1999年9月24–27日、盛岡。
23. O. S. Nagaoka, Molecular Knife – Control of Chemical Reactions by Core Excitation, Interesting World of Physical Chemistry, November 12–13, 1999, Kyoto.
24. O. S. Nagaoka, Investigation of Photoinduced Electron Transfer of the Model Vitamin E-Quinone System, Photoconversion and Photosynthesis: Past, Present and Future Prospects, November 15–17, 1999, Okazaki.

25. ○長岡伸一、内殻励起を用いた表面脱離の研究;分子メスへの応用を目指して、分子科学研究所研究会「内殻電子励起状態とダイナミクスー現状と展望ー」、1999年1月6-7日、岡崎。
26. ○長岡伸一、内殻励起を用いた表面脱離の研究;分子メスへの応用を目指して、第28回表面科学研究会、2000年2月2-3日、つくば。
27. ○長岡伸一、EUVを用いた有機ケイ素分子の原子分子操作、EUVリソグラフィ(EUVL)マスク技術検討会、2001年9月14日、東京。
28. ○長岡伸一、2B1における表面上のサイト選択的解離研究の現状と展望、UVSORワークショップ「ビームライン高度化」、2001年11月26-27日、岡崎。
29. ○S. Nagaoka, Site-Specific Fragmentation Caused by Core-Level Photoexcitation on Surfaces, International Symposium on Manipulation of Atoms and Molecules by Electronic Excitations, March 4-5, 2002, Tokyo.
30. ○長岡伸一、励起状態における分子内プロトン移動反応の研究、第3回大つくば物理化学セミナー、2002年7月10-11日、真岡(台風6号のために交通が遮断され中止)。
31. ○S. Nagaoka, Site-Specific Fragmentation Caused by Core-Level Photoexcitation of 1,1,1-Trifluoro-2-Propanol-d<sub>1</sub> on Surfaces, International Workshop on Dynamics in Core-Excited Molecules (IWDCEM), August 27-29, 2002, Higashi-Hiroshima.
32. ○長岡伸一、放射光によるサイト選択的解離、日本物理学会秋季大会、2002年9月6-9日、春日井。
33. ○長岡伸一、放射光によるサイト選択的解離、五大学化学シンポジウム、2002年10月25日、徳島。
34. ○長岡伸一、アロエサポナリンの励起状態分子内プロトン移動における節面モデル、分子科学研究所研究会「生体関連分子の水素結合とダイナミクスの新展開」、2003年7月11-12日、岡崎。
35. ○長岡伸一、励起状態における分子内プロトン移動反応の研究、環境にやさしい色素。材料開発のための基礎的研究シンポジウム、2003年12月4-5日、横須賀。
36. ○長岡伸一、ビタミンEの抗酸化作用、愛媛県立宇和島東高等学校、2004年1月28日、宇和島。
37. ○長岡伸一、ビタミンE及び関連分子の抗酸化反応、酸化促進反応、再生反応における水素量子アトミクス、水素量子アトミクス研究会、2004年8月21-22日、つくば。
38. ○長岡伸一、三つの化学シフトーNMR、ESCA、メスバウアーー、日本分光学会中国四国支部愛媛地区講演会、2005年12月8日、松山。
39. ○S. Nagaoka, Molecular Knife - Control of Chemical Reactions by Core Excitation, Fourteenth International Conference on Composites/Nano Engineering (ICCE - 14), July 2-8, 2006, Boulder, Colorado.
40. ○長岡伸一、軟X線実験技術ーサイト選択的解離の例ー、第10回SPring-8シンポジウム、2006年11月1-2日、佐用。
41. ○長岡伸一、軟X線による気体原子・分子内殻励起実験技術の新展開:趣旨説明、第20回放射光学会年会・合同シンポジウム、2007年1月12-14日、広島。
42. ○長岡伸一、有機ケイ素分子の内殻励起によって誘起されるサイト選択的解離、電子格子相互作用による緩和動力学の多様性:局在性、量子コヒーレンス、低次元系、非平衡系、2007年2月11-12日、神戸。
43. ○S. Nagaoka, Site-Specific Fragmentation Caused by Core-Level Photoionization of Organosilicon Molecules, The 10th Hiroshima International Symposium on Synchrotron Radiation, March 8-9, 2007, Higashi-Hiroshima.
44. ○長岡伸一、有機ケイ素分子の内殻励起によって誘起されるサイト選択的解離、第11回SPring-8シンポジウム、軟X線実験技術研究会 原子・分子の内殻励起研究会 合同研究会ーBL27SUの現状と今後の展開ー、2007年10月28日、佐用。
45. ○長岡伸一、ユビキノールによるビタミンEの再生反応における量子論的效果、京都大学理学研究科理論化学セミナー、2009年10月15日、京都。
46. S. Takahashi, Y. Iwasaki, A. Ouchi, O.K. Aizawa, T. Inakuma, S. Nagaoka, J. Terao, and K. Mukai, Development of Singlet Oxygen Absorption Capacity (SOAC) Assay Method and the



Quenching Activity of Singlet Oxygen by Carotenoids and Vegetables, 16th International Symposium on Carotenoids, July 17-19, 2011, Kraków.

47. ○長岡伸一、ビタミンEの抗酸化反応における量子論的効果、2011年日本化学会西日本大会、2011年11月12-13日、徳島。
48. ○長岡伸一、ビタミンCや還元型CoQ10によるビタミンE再生反応におけるトンネル効果、日本放射線影響学会第54回大会、2011年11月17-19日、神戸。
49. ○相澤宏一、高橋慎吾、岩崎裕子、稲熊隆博、大内綾、長岡伸一、寺尾純二、向井和男、食品の一重項酸素消去活性評価法(SOAC法)の確立、第65回日本酸化ストレス学会学術集会、2012年6月7-8日、徳島。
50. ○S. Nagaoka, H. Endo, and K. Ohara, Correlation between Excited-State Intramolecular Proton-Transfer and Singlet-Oxygen Quenching Activity in Intramolecularly Hydrogen-Bonded Anthraquinone Derivatives, the 248th American Chemical Society National Meeting & Exposition, August 10-14, 2014, San Francisco.
51. ○長岡伸一、食品が一重項酸素を消滅させる能力を評価する方法の開発、平成26年度愛媛大学研究員交流サロン、2014年8月26日、松山。
52. ○S. Nagaoka and K. Ohara, Nodal-Plane Model in Photochemistry, the 27th International Conference on Photochemistry, June 28 - July 3, 2015, Jeju Island, Korea (Special Guaranteed Oral Speaker).
53. ○長岡伸一、化学反応を制御する一つの方法、日本真空学会研究例会、2017年9月26日、松山。
54. ○長岡伸一、食品が活性酸素・フリーラジカルを消滅させる能力を評価する方法の開発、城西大学セミナー、2018年7月21日、坂戸。
55. ○長岡伸一、ビタミンEの抗酸化作用、愛媛県立松山西中等教育学校、2019年7月23日、松山。

## 学会および社会的活動

1. 昭和59-60年度、分子科学研究会第9期委員。
2. 第34回ESR討論会、1995年10月31日-11月2日、松山;事務局代表。
3. 日本化学会愛媛地区化学講演会、1997年12月12日、松山;世話人。
4. 分子構造総合討論会、1998年9月16-19日、松山;事務局代表。
5. 分子科学研究所研究会(内殻電子励起状態とダイナミクスー現状と展望ー)、2000年1月6-7日、岡崎;世話人代表。
6. 第13回日本放射光学会・放射光科学合同シンポジウム、2000年1月7-9日、岡崎;実行委員。
7. 平成12-13年度、分子科学研究会第15期委員。
8. International Symposium on Manipulation of Atoms and Molecules by Electronic Excitations (ISMAMEE)、2002年3月4-5日、東京;組織委員。
9. 平成14-15年度、分子科学研究会第16期委員。
10. 平成15-16年度、日本化学会中国四国支部幹事。
11. 平成15-18年度、(財)高輝度光科学研究センターBL27SU軟X線光化学ビームライングループ、利用者懇談会軟X線実験技術研究会代表。
12. 平成15年8月7日、夢化学21・化学の学校・一日体験入学・化学の実験の楽しみ;愛媛大学理学部会場世話人。
13. 平成16年度、日本化学会中国四国支部化学教育協議会委員。
14. 平成16年度、中国四国・化学と工業懇話会運営委員。
15. 平成16年7月24日、全国高校化学グランプリ2004一次選考;松山会場世話人。
16. 平成16年7月30日-8月1日、おもしろわくわく化学の世界'04愛媛化学展;実行委員。
17. 平成16年8月5-6日、夢化学21・化学の学校・一日体験入学・化学実験の楽しみ;愛媛大学理学部・工学部世話人代表。
18. 平成16年度、Indian Institute of Technology, Kanpur博士論文審査委員。
19. Quantum Chemistry Literature Database査読委員、J. Mol. Struct. (THEOCHEM) 494-495, 1-878 (1999): 533-534, 1-916 (2000): 575-576, 1-916 (2001): 627-628, 1-916 (2003):

- 1978 (1999), 533-534, p. 940 (2000), 575-576, p. 910 (2001), 627-628, p. 940 (2003), 720-721, 1-665 (2005); J. Comp. Chem. Jpn. 4, 203-569 (2006).
20. 平成18-22年度、分子科学会広報委員。
  21. 第20回放射光学会年会・合同シンポジウム:企画-3;軟X線による気体原子・分子内殻励起実験技術の新展開、2007年1月12-14日、広島;世話人。
  22. 平成19-22年度、日本化学会速報誌(Chemistry Letters)編集委員。
  23. 平成21年度より、ビタミンE研究会幹事。
  24. 平成21年度、サイエンス・パートナーシップ・プロジェクト(SPP)講座型学習活動プラン(JST)、中山ほたる学講師、愛媛県立中山高等学校。
  25. 平成21年度、教員免許状更新講習「身の回りの現代化学」講師、愛媛大学。
  26. 2009年度日本化学会西日本大会、2009年11月7-8日、松山;実行委員。
  27. 平成21-22年、日本化学会代議員。
  28. 平成22年度、サイエンス・パートナーシップ・プロジェクト(SPP)講座型学習活動プラン(JST)、松山中央高校サイエンスセミナーⅡ-大学基礎科学実践講座-講師、愛媛県立松山中央高等学校。
  29. 平成22年度、スーパー・サイエンス・ハイスクール(SSH)事業(JST)、研究室体験、講師、愛媛県立松山南高等学校。
  30. 平成23年、日本化学会役員選考委員。
  31. 平成23年度、スーパー・サイエンス・ハイスクール(SSH)事業(JST)、ピロガロールなどを用いた一重項酸素の赤色発光のしくみ、実験補助、愛媛県立松山南高等学校。
  32. 平成23年度、教員免許状更新講習「身の回りの現代化学」講師、愛媛大学。
  33. 平成24年度、日本ビタミン学会評議員。
  34. 平成24年、第65回日本酸化ストレス学会学術集会、2012年6月7-8日、徳島;実行委員。
  35. 平成24年8月17-19日、おもしろわくわく化学の世界'12愛媛化学展;実行委員。
  36. 平成24年度、日本学生科学賞愛媛県審査最優秀賞中央審査入選1等、ピロガロールを用いた発光(愛媛県松山南高等学校理数科)に協力。2013年度版理科学習資料探求pp. 180-183。
  37. 平成25-28年度、日本化学会代表正委員
  38. 平成25-令和3年度、日本ビタミン学会代議員
  39. 平成26年度、教員免許状更新講習「身の回りの現代化学」講座責任者、愛媛大学。
  40. 平成26年11月29日、日本ビタミン学会市民公開講座「ビタミンやカロテノイドとアンチエイジングー健康で生き生きと暮らすー」、実行委員長、愛媛大学。
  41. 平成26年度、抗酸化活性データベースの作成と公表、  
[http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int\\_naga.pdf](http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int_naga.pdf)
  42. 平成28年度、日本化学会中国四国支部各賞推薦委員会委員
  43. 2018年度日本化学会中国四国支部大会、2018年11月17-18日、松山;実行委員(渉外広報主担当)。
  44. 平成31-令和2年度、日本化学会中国四国支部監査。
  45. 令和元年度、教員免許状更新講習「身の回りの現代化学」講座責任者、愛媛大学。
  46. 令和2年1月10-11日、第31回ビタミンE研究会、代表世話人、愛媛大学。

## 研究補助金取得状況

1. 昭和59-60年度、科学研究費一般研究A、極微弱発光の検出による分子の電子緩和過程の研究、分担。
2. 昭和63年度、科学研究費奨励研究A、内殻準位からの光イオン化によって起こる解離過程の研究、代表、90万円。
3. 昭和63年度、科学研究費一般研究C、低温における分子放射性結合反応の研究、分担。
4. 平成元年度、愛媛大学臨時経費、記憶素子の機能を持つ分子の開発、代表、275万円。
5. 平成元-2年度、科学研究費一般研究C、真空紫外光を用いる光化学気相蒸着の研究、代表、270万円。
6. 平成2年度、文部省国際研究集会派遣研究者、31万8千円。
7. 平成3-4年度、科学研究費一般研究B、光化学反応の電子状態依存性の研究、代表、640万

- 円。
8. 平成4-5年度、科学研究費重点領域研究(分子磁性)、有機ラジカル分子のフェリ磁性、分担。
9. 平成5年度、財団法人実吉奨学会研究助成金、代表、50万円。
10. 平成6年度、日本学術振興会日米科学技術協力事業派遣研究者、219万1千円。
11. 平成7年度、国内開催会議参加経費等経費、第11回真空紫外放射物理学国際会議、13万1千円。
12. 平成8-10年度、科学研究費重点領域研究及び特定領域研究A(多自由度トンネル)、生体内のビタミンEの抗酸化反応におけるトンネル効果の研究、公募・代表、240万円、190万円、150万円。
13. 平成9-10年度、科学研究費基盤研究C、励起状態におけるプロトン移動反応の研究、代表、310万円。
14. 平成10-14年度、日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業(光科学)、内殻励起による化学反応制御—分子メス—、分担、470,438千円。
15. 平成11年度、分子科学研究所研究会、内殻電子励起状態とダイナミクス—現状と展望—、代表、75万円。
16. 平成11-12年度、科学研究費基盤研究B、天然抗酸化剤:その活性と抗酸化作用のメカニズム、分担。
17. 平成11-13年度、科学研究費特定領域研究B(電子励起を用いた原子分子操作)、放射光による原子分子操作、班長、1,920万円、1,750万円、1,660万円。
18. 平成11-14年度、科学研究費特定領域研究B、電子励起を用いた原子分子操作、分担。
19. 平成15-18年度、科学研究費補助金特定領域研究B、天然抗酸化剤による生体老化防御のスピンドイナミクス、分担。
20. 平成16年度、愛媛大学研究開発支援経費研究基盤整備、生物・分子機能性化学における近赤外発光の新展開、分担。
21. 平成16年度、夢化学21・化学の学校・一日体験入学・化学実験の楽しみ、代表、17万円。
22. 平成16-18年度、高エネルギー加速器研究機構共同開発研究、表面研究用電子—運動エネルギー—選別イオンコインシデンス分光装置の開発、分担
23. 平成17年度、受託研究((株)エーザイ)、ビタミンE同族体とその代謝物に対するユビキノンの相乗効果、代表、150万円。
24. 平成17-18年度、科学研究費基盤研究C、内殻励起を用いたサイト選択的解離の研究—分子ナイフへの応用を目指して—、代表、200万円、150万円。
25. 平成18年度、受託研究((株)エーザイ)、ビタミンE同族体とその代謝物に対する生体関連キノン(ユビキノ、ビタミンK、ブラストキノ)の相乗効果、代表、150万円。
26. 平成18-27年度、奨学寄付金(三菱瓦斯株式会社)、ピロロキノリンキノ(PQQ)の抗酸化作用に関する研究、代表、50万円、50万円、50万円、50万円、50万円、100万円、120万円、120万円、120万円、30万円。
27. 平成19年度、受託研究((株)エーザイ)、ビタミンE同族体とその代謝物の抗酸化活性に及ぼす生体金属イオンの効果、代表、120万円。
28. 平成19-20年度、科学研究費基盤研究C、励起状態におけるプロトン移動の反応機構—近赤外から軟X線領域まで—、代表、221万円(内間接経費51万円)、208万円(内間接経費48万円)。
29. 平成19年12月—平成21年11月、共同研究(ヤマハ発動機株式会社)、アスタキサンチンの活性酸素消去のメカニズム、代表、60万円、100万円。
30. 平成19年12月—平成20年11月、奨学寄付金(ヤマハ発動機株式会社)、アスタキサンチンの活性酸素消去のメカニズム、代表、60万円。
31. 平成20年3,10月、奨学寄付金(Anti Oxidant Unit研究会)、一重項酸素発生の前駆物質の合成研究、代表、65万円、65万円。
32. 平成20-24年度、奨学寄付金(カゴメ株式会社)、エンドペルオキシドを用いたカロテノイド及び商品の一重項酸素消去能に関する研究、代表、100万円、100万円、100万円、100万円、100万円。
33. 平成20年8月、第21回松尾学術研究助成、気体および固体の内殻電子励起ダイナミクスの研究が可能な電子銃を用いた小型実験装置—コンパクト分光装置の開発—、共同研究者

- 250万円。
34. 平成21年3月、奨学寄付金((財)食品分析開発センター)、一重項酸素検査法の研究、代表、70万円。
  35. 平成21年度、サイエンス・パートナーシップ・プロジェクト(SPP)講座型学習活動プランA(JST)、中山ほたる学、10万円。
  36. 平成21-23年度、愛媛大学研究開発支援経費特別推進研究、振動円二色性分光法を用いたキラル集合体における不斉発現機構の解明、分担、180万円、98万円、141万円。
  37. 平成21年11月、2009年度コスメロジー研究振興財団助成金、アロエ含有物によるUVケアの研究 -紫外線防御と一重項酸素消去作用-、代表、100万円。
  38. 平成22年3月、共同研究(ヤマハ発動機株式会社)、種々のカロテノイドの活性酸素消去のメカニズムの解明、代表、80万円。
  39. 平成22年10月、2010年度住友財団基礎科学研究助成、高誘電体ゲート絶縁膜の表面界面局所価電子状態の研究、共同研究者、220万円。
  40. 平成23年7月、平成23年度愛媛大学産学連携促進事業経費(産業シーズ育成)、食品が一重項酸素を消滅させる能力を評価する方法の開発、代表、100万円。
  41. 平成23年10月、研究成果最適展開支援プログラムA-STEPフィージビリティスタディ【FS】ステージシーズ顕在化タイプ、食品への応用を目指した新規抗酸化活性分析方法の確立、研究参加者、519万2千円。
  42. 平成23-25年度、科学研究費基盤研究B、発光性イリジウム錯体LB膜を用いた多機能性センシングデバイスの開発、分担、30万円、20万円、20万円。
  43. 平成24年1月、共同研究(エーザイ株式会社)、 $\alpha$ -トコフェロールにトコトリエノール、6種類のポリフェノールミックスを配合した検体の抗酸化力について、代表、80万円。
  44. 平成24-26年度、科学研究費挑戦的萌芽研究、食品が活性酸素・フリーラジカルを消滅させる能力を評価する方法の開発、代表、143万円(内間接経費33万円)、117万円(内間接経費27万円)、143万円(内間接経費33万円)。
  45. 平成24-25年度、愛媛大学研究活性化事業女性研究者支援・共同研究、パーフルオロゲルにおける不斉構造の解明、分担、200万円。
  46. 平成25-27年度、奨学寄付金(カゴメ株式会社)、SOAC法を用いた抗酸化活性測定に関する研究、代表、100万円、50万円、50万円。
  47. 平成26年度、愛媛大学学会・シンポジウム・セミナー等支援経費、日本ビタミン学会市民公開講座、代表、50万円。
  48. 平成26-28年度、科学研究費基盤研究B、イリジウム錯体積層膜を用いた多重発光性センシングデバイスの開発、分担、10万円、10万円、10万円。
  49. 平成26年度、すかいら〜くフードサイエンス研究所学術研究助成、食品が活性酸素・フリーラジカルを消滅させる能力を評価する方法の開発、代表、231万円。
  50. 平成26年度、愛媛大学臨時経費(学長裁量経費)、文献データベースツール管理運営経費、分担、477万円。
  51. 平成26年11月、共同研究(エーザイ株式会社)、 $\alpha$ -トコフェロールと $\beta$ -、 $\gamma$ -、 $\delta$ -トコフェロール(或いは、 $\alpha$ -、 $\beta$ -、 $\gamma$ -、 $\delta$ -トコトリエノール)の共存による抗酸化力の相乗効果の研究、代表、100万円。
  52. 平成27-29年度、科学研究費基盤研究C、食品の抗酸化能力を評価する方法の開発、代表、156万円(内間接経費36万円)、143万円(内間接経費33万円)、195万円(内間接経費45万円)。
  53. 平成28年度、共同研究(カゴメ株式会社)、リコピン類縁体の抗酸化活性測定、分担、30万円(内間接経費2万7千円)。
  54. 平成28-29年度、愛媛大学社会連携推進機構研究協力会スタートアップ事業(マルトモ株式会社)、鰹節含有成分の一重項酸素消去活性の研究、代表、20万円、20万円。
  55. 平成29年度、日本食品化学研究振興財団助成金、食品における酸化防止剤の能力を評価する方法の開発、代表、60万円。
  56. 平成30-令和2年度、科学研究費基盤研究C、食品の抗酸化能力を評価する方法の実用化に向けた研究、代表、143万円(内間接経費33万円)、130万円(内間接経費30万円)、169万円(内間接経費39万円)。

57. 平成31-令和2年度、日本食品化学研究振興財団助成金、食品における酸化防止剤の能力を評価する方法の実用化に向けた発展研究、代表、60万円、70万円。
58. 令和元年度、日本食品化学研究振興財団2019年度(後期)シンポジウム開催等助成金、第31回ビタミンE研究会、代表、25万円。
59. 令和2年、松山観光コンベンション協会コンベンション開催助成事業、第31回ビタミンE研究会、代表、10万円。

## 研究業績概要

### 1. 光化学反応の電子状態依存性の研究

分子にさまざまなエネルギーの光を照射して電子を励起すると、分子は励起状態の性質に応じて、いろいろな光化学反応を起こす。こうした反応が励起された電子状態にどのように依存するかを調べ、励起状態の波動関数の性質と光化学反応の関係を研究した。

#### 1a. 分子内水素結合を含む分子の分子内プロトン移動反応の電子状態依存性

プロトン移動は最も単純な化学反応であり、化学や生物学の領域で重要な役割を果たす。サリチルアルデヒドは分子内水素結合を含む芳香族分子の中で最も単純な構造をしており、分子内プロトン移動の詳細な研究に適している。サリチルアルデヒドは、第一励起  $\pi\pi^*$  状態でプロトン移動し、エノル互変異性体を生じる。ab initio分子軌道計算によって、この異性体の構造を求めた。またピコ秒発光分光法によって溶液中のプロトン移動速度とその後の無輻射遷移速度を求めた。無輻射遷移はカルボニル炭素の面外振動と関係し、たとえ異なったタイプの分子のプロトン移動であっても、その後の無輻射遷移のメカニズムは同じであることを見いだした。またサリチルアルデヒドの第二励起  $\pi\pi^*$  状態ではプロトン移動は起こりにくい。こうしたプロトン移動の電子状態依存性は、波動関数の節のつき方による状態の安定化を考慮すると容易に説明できる。このような安定化の考えを用いると、種々の分子のプロトン移動の性質を説明することができることを示した。さらに、発光分光法、過渡吸収分光法、電子常磁性共鳴、光電子分光法、理論計算などによって、種々の分子の種々の電子状態におけるプロトン移動を多面的に研究した。

#### 1b. ハロゲン化ベンゼンの求核置換光化学反応の三重項状態依存性

ベンゼンにハロゲンを置換すると、りん光スペクトルが大きく変化する。これは、ハロゲン化ベンゼンが2つの低位三重項状態( $^3\pi\pi^*$ と $^3\pi\sigma^*$ )を持つからである。ハロゲン化ベンゼンの光化学反応は、この2つの低位三重項状態を経由して起こる。こうした反応のうちラジカル反応は $^3\pi\pi^*$ と $^3\pi\sigma^*$ 両方の状態から起こるが、求核置換反応は $^3\pi\sigma^*$ 状態からのみ起こることが発光分光法を用いてわかった。また、ab initio分子軌道計算を用いて、クロロベンゼンが2つの低位三重項状態( $^3\pi\pi^*$ と $^3\pi\sigma^*$ )を持つことを確認した。さらに2つの低位三重項状態の電子分布の違いのために求核置換光化学反応が $^3\pi\sigma^*$ 状態から選択的に起こることを示した。

#### 1c. 有機金属分子の内殻準位からの光イオン化後の特異的な解離反応

価電子のイオン化後の反応については従来から種々の研究があるが、内殻電子の場合については、ほとんど知られていない。分子全体に非局在化している価電子と異なり、内殻電子は元々属していた原子付近に局在化しているため、内殻電子のイオン化後の解離過程は価電子の場合と大きく異なっていることが期待される。そこで、シンクロトン放射分光法を用いて、内殻電子の光イオン化後の特異的な解離反応を研究した。

同じ種類の原子の同じ種類の内殻準位でも、その原子の周囲の結合などの環境によって内殻電子の励起エネルギーは変化する。そこで、照射光のエネルギーを厳密に選ぶことによって、新規に合成した複数の同種原子を含む分子の中の特定の原子の内殻電子のみを選択的に励起し、分子の結合のうち特定のものだけが選択的に切れるような解離反応を起こすことができることを見いだした。

### 2. 基底状態におけるカルボン酸二量体の水素結合に沿ったプロトン移動

固体高分解能核磁気共鳴、プロトンのスピン格子緩和時間の測定、フーリエ変換赤外吸収、ab initio分子軌道計算などの種々の実験上及び理論上の手法を用いて基底状態における安息香酸二量体の水素結合に沿ったプロトン移動を多面的に研究した。核磁気共鳴の測定によ

り、高温領域ではポテンシャルの上を飛び越す古典的ジャンプによってプロトン移動が起こることがわかり、その活性化エネルギーと速度定数を求めることができた。低温領域ではトンネル効果が重要になることが明らかになり、新しく考案したスピン格子緩和理論に基づいて実験結果を解釈した。安息香酸に対して求められた低い活性化エネルギーは安息香酸特有のものではなく、水素結合した立体効果のないカルボン酸二量体に対しては一般的であることがフーリエ変換赤外吸収と核磁気共鳴の測定よりわかった。従来ab initio分子軌道計算から求められているカルボン酸二量体のプロトン移動の活性化エネルギーは本研究の実験値よりずっと大きい。しかし、遷移状態でエネルギーが極小値になるように構造を決めると、従来の計算値よりもずっと実験値に近い計算結果が得られた。

### 3. 励起三重項状態の電子構造と動的挙動

有機化学、生物物理学などの種々の分野において励起三重項状態は重要な役割を果たすことが知られている。りん光スペクトル、光検出磁気共鳴、電子常磁性共鳴、分子軌道計算を用いて、ベンズアルデヒドやピリジンなどの最低励起三重項状態の電子構造と動的挙動を研究した。

### 4. ビタミンEなどの抗酸化反応の研究

生体の呼吸によって副次的に生じる活性酸素分子のため、生体膜中に過酸化物が生成し、各種の疾患や老化の原因となっている。ビタミンEは、活性酸素分子と反応し、これを不活性化することによって、生体膜の過酸化を抑制する。ストップフロー分光法と分子軌道計算を用いて、こうした抗酸化反応の機構と反応ポテンシャル図を明らかにし、電子移動とトンネル効果が果たす役割を解明した。さらに、逆反応である酸化促進反応やビタミンE再生反応、一重項酸素消去反応についても研究を行った。収集したフリーラジカル消去活性の指標(ARAC値)、一重項消去活性の指標(SOAC値)、ビタミンE再生活性の指標(ATREC値)のデータベースをこのpdfファイルに添付する。

### 5. SPring-8における軟X線ビームラインBL27SUの製作

(財)高輝度光科学研究センターSPring-8の軟X線光化学サブグループの一員として、軟X線分光器や光化学実験装置の設計を進め、超高分解電子分光装置を装備した世界に前例のない高強度高分解能軟X線ビームラインBL27SUの製作を行うことによって、新規高度技術の創出と向上、高度機器の改善への貢献を行った。本ビームラインを用いて従来高エネルギー分解能で高輝度を得られなかったKr:2pやSi:1sイオン化敷居値領域の分光光学と光化学を発展させることが可能になった。

### 6. 量子化学における新しい教育手法の開発

学部2-3回生と博士前期・後期課程においてエクセルを用いた原子・分子軌道の描画の演習を行い、メディアを活用した実体験型実習を実施し、授業外学習と双方向型課題の強化による知識運用力を向上させた。箱の中の自由粒子の波動関数の描画とナフタレンの分子軌道への応用から始まり、水素分子陰イオンにおける分散関数の効果に至り、GAUSSAINやGAUSSVIEWの演習も行う15回分の授業のテーマを構築した。