

氏 名 やま べ しん いち  
山 邊 信 一

所 属 ・ 職 名 附属教育実践総合センター・教授

研究室電話番号 0742-27-9208  
(ダイヤルイン・FAX 兼用)

電子メールアドレス yamabes@nara-edu.ac.jp

最終学歴及び学位 京都大学大学院工学研究科博士課程単位取得退学 (1974)  
工学博士 (京都大学 1974)

所 属 学 会 等 日本化学会, 日本科学教育学会

専 門 分 野 有機量子化学・計算化学



#### 研究と教育について

研究のテーマは、有機化学反応の機構を Frontier Orbital 理論 及び計算化学の手法を用いて解明する事です。この解析を通じて、反応の予測・設計の今後の新しい方法論の確立を目指しています。

教育のモットーとして、知識の伝授より、既に持っている知識の再編、系統化を図るようにしています。学生諸君が“そういう事だったのか”と感じてくれるよう、学問での事柄の関連性を理解し、視野というか考える座標軸が増えてくれるよう努めています。

#### 主な研究業績

- "A Jahn-Teller Geometric Distortion Effect on the Woodward-Hoffmann Rule in Thermal Decompositions of Diazetines", S. Yamabe, T. Minato, J. Phys. Chem. A, 105, p7281-7286 (2001).
- "Asymmetry in Symmetric Cycloadditions", Shinichi Yamabe, Yukari Nishihara and Tsutomu Minato, J. Phys. Chem. A, , 106, p4980-4987 (2002).
- "A computational study on interactions between acetic acid and water molecules", Shinichi Yamabe and Noriko, Tsutida, J. Comput. Chem. , 24, p939-947 (2003).
- "A computational study of the role of hydrogen bonds in SN1 and E1 reactions", Shinichi Yamabe, Noriko Tsuchida, J. Comput. Chem. , 598, 598-608 (2004).
- "Reaction Paths of the Water Assisted Neutral Hydrolysis of Ethyl Acetate", Shinichi Yamabe, Noriko Tsuchida and Yousuke Hayashida, J. Phys. Chem. A. , 109, 7216-7224 (2005).

#### 主な授業担当科目

化学概論 II, 物質情報のための数学 I, 物理化学, 化学演習, 情報社会と法・倫理 (2人分担)

学 会 活 動 日本化学会近畿支部主催「計算化学講習会」講師

社 会 的 活 動

講 演 の テ ー マ 「有機化学反応における水素結合の役割」