

理学博士島内武彦君の「多原子分子の力場の研究」に対す

る授賞審査要旨

分子の内部構造、特に原子間の力の場の解明は化学及び生物学の分子論的体系の確立にきわめて重要な問題である。島内武彦君の研究は分子の固有振動ならびに外力による分子の変形のデータを高度の精度をもって求め、それより分子力場を定める方法を確立したが、これは国際的に最も妥当なものと評価されている。これに関して赤外スペクトル、遠赤外スペクトル、ラマンスペクトルの実験装置の改良を行い、多くの基本的分子について精密な測定を行ったことはいうまでもないが、それから求められる力場に基づいて、高分子を含めて多くの多原子分子について研究を行い、化学及びその応用分野で重要な問題の解明に成功した。

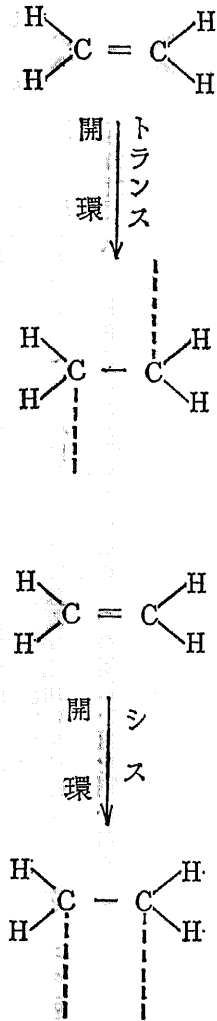
まず分子の固有振動と外力による変形の問題については、分子の振動、回転及び振動回転スペクトルの解析によって得られる固有振動数、コリオリ定数、遠心力歪定数として整理することができる。これらの振動数及び変形定数から分子力学によって、力場の定数を求める過程は慎重な配慮を要する。というのは実験から求められる定数の重要度と精度とは定数の種類によって大きく異なるためである。たとえばコリオリ定数は振動数よりも精度は低いが、重要度大きい場合がある。つまり単なる数値計算では混乱を起すわけで、その数値の信頼度に十分な配慮がなされていなかったことが、従来各国で求められていた力の定数の研究に矛盾があらわれた主な原因である。そのため多種類の分子について多くの研究が発表されているに拘らず、それが信頼し得るデータになり得なかった。

島内君はこの矛盾をとり除くため、これらの力場の定数を上記の振動数と変形の実測値に基づいて「算出し得る定数」と「算出し得ない定数」とにわけて取扱ひ、後者に対しては適当な仮定を行うと同時に、その仮定値が変化した場合、前者即ち「算出し得る定数」の値にどの程度の変化が現われるかを明らかにすることを考えた。（島内君の方法によれば、「算出し得る定数」と「算出し得ない定数」との区別は初期の段階では経験的に行うが、最終的には力の定数を求める最小自乗法の正規方程式の行列の固有値と固有ベクトルを求めてきめられる。小さい固有値に対応する固有ベクトルに最も関係の深い力の定数は「算出し得ない定数」であり、大きい固有値に関するものは「算出し得る定数」である）その結果これまで各国で見られた多くの矛盾の原因が除かれ、力の定数の値が明確にきめられるようになった。島内君はこの方法を多くの基本分子に適用して実験を行った。赤外線吸収、遠赤外線吸収、ラマン効果の測定装置の改良を行い、信頼度の高い測定値を求め、それから振動数、変形定数を定め、力場の定数を算出した。それらの結果は多数の論文として発表されている。これらの計算は電子計算機によって行われるが、島内君はその計算に必要なコンピュータ・プログラムの完備したものを作製した。このプログラムは現在世界で最もすぐれたものとして国際的に用いられている。

島内君の貢献の第二は、このようにして得られた力場の定数を用いて、高分子を含めて多原子分子につき、化学上重要な構造決定を行ったことである。その詳細は多数の論文（添付の論文目録参照）に発表されているが、そのうちから二・三の例をあげて説明してみよう。

その一つはエチレンの重合反応であるが、その際エチレン分子がトランス開環をするか、シス開環をするかを決定

したことがある。



島内君はこの問題の解決のため、半重水素化エチレンの重合物の構造の決定を行い、その赤外スペクトルの基準振動数の計算から、現実におこる反応はシス開環重合であることを結論し得た。

第二の例として天然ゴム（シス・ポリイソプレン）とグッタペルカ（トランス・ポリイソプレン）の物性をあげてみよう。よく知られているように前者はゴム弾性を示すが、後者は常温で普通の固体である。島内君はこれらの分子鎖につき、モデル化合物をも含めて、赤外スペクトルの測定と基準振動の計算を行い、天然ゴムでは多数のコンフォメーションが殆ど同程度に安定になるので内部回転が充分自由になり、ゴム弾性を示すが、グッタペルカではとくに一つのコンフォメーションが安定になり、部分的結晶化をおこしてゴム弾性を示さないことを解明した。

更に第三の例としてポリペプチドのコンフォメーションをあげてみよう。島内君は種々のポリペプチドとモデル化合物の内部回転状態を遠赤外吸収の測定と基準振動の計算とに基づいて研究を行い、ポリペプチドにおける種々のコンフォメーションの変化を明らかにした。そのうえLアミノ酸からなるポリペプチド鎖の右巻きヘリックスに巻

きこまれて異なった構造(即ちLの左巻き構造)をとったDアミノ酸残基のような微妙な構造変化まで決定している。

以上にあげた例を含む島内君の業績は約二百篇の論文として発表されているが、英国のファラデー・ソサイエティーその他より総合講演の招待をうけ、また総合報告としてまとめて発表されている。その結果はひろく国際的に引用されこの分野で最も信頼されるものとなっている。

島内君はまた赤外及びラマン・スペクトルの化学的応用に必要な基本的データの作成を行っている。島内君が中心になって作られた赤外スペクトルのIRDCカードは現在一万二千枚に達している。また同じく島内君が中心になって作った「分子振動数の表」(文献31、32、33)は米国ナショナル・ビューロー・オブ・スタンダードから国際的利用の目的で発行されているが、更に増補して総合版として近く刊行されることになっている。これらは現在世界で最も正確な振動スペクトルの標準データとして用いられているだけでなく、エントロピーその他の熱力学関数の算出にも、各国でひろく利用されている。

以上島内君の業績は分子力場の研究として、それ自身きわめて重要な意義をもつばかりでなく、その成果に基づいて化学上重要な問題を多数解明し、化学及び分子生物学の発展に一つの新しい道を開いたもので、学問上重要な貢献をしたものと認める。

一、主要な論文目録

(a) 基準振動と分子力場に関するもの

1. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules as treated by Urey-Bradley field. *J. Chem. Phys.*, **17**, 245 (1949).
2. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules as calculated by Urey-Bradley field. II. Vibrations of polythene, ethane and their deuterium compounds. *J. Chem. Phys.*, **17**, 734 (1949).
3. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules as calculated by Urey-Bradley field. III. A table of force constants. *J. Chem. Phys.*, **17**, 848 (1949).
4. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules. I. Normal coordinate treatment of methane derivatives. *Bull. Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo)*, **21**, 825 (1942).
5. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules. II. Vibrations of CCl_4 , CCl_3Br , CCl_2Br_2 , CClBr_3 and CBr_4 molecules. *Bull. Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo)*, **21**, 834 (1942).
6. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules. III. Vibrations of CH_4 , CH_3D , CH_2D_2 , CHD_3 and CD_4 molecules. *Bull. Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo)*, **22**, 958 (1943).
7. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules. IV. Vibrations of CCl_4 , CCl_3H , CCl_2H_2 , CClH_3 and CH_4 molecules. *Bull. Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo)*, **22**, 964 (1943).
8. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules. V. Force field of some tetrahedral molecules. *Bull. Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo)*, **23**, 314 (1944).
9. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyatomic molecules. VI. Treatments of skeletal vibrations. *Bull. Inst. Phys. Chem. Research (Tokyo)*, **23**, 371 (1944).
10. T. Shimanouchi, I. Tsuchiya and Y. Mikawa: Raman spectra and normal coordinate treatment of methylchlorosilanes. *J. Chem. Phys.*, **18**, 1306 (1950).
11. T. Shimanouchi: On the intramolecular potential. *Nippon Kagaku Zasshi*, **74**, 266 (1953).

12. D.E. Mann, L. Fano, W. Cahill and T. Shimanouchi: The application of a high-speed digital computer to molecular vibration problems. *J. Chem. Phys.*, **22**, 764(1954).
13. T. Shimanouchi: On the calculation of the characteristic values and vectors for vibrational secular equations. *J. Chem. Phys.*, **23**, 2465(1955).
14. T. Shimanouchi: General formulas for kinetic energy matrix elements of in-plane vibration in planar molecules. *J. Chem. Phys.*, **25**, 660(1956).
15. Y. Kakiuchi and T. Shimanouchi: Out-of-plane force constants of benzene. *J. Chem. Phys.*, **25**, 1252(1956).
16. T. Shimanouchi, Y. Kakiuchi and I. Gamo: Out-of-plane CH vibrations of benzene derivatives. *J. Chem. Phys.*, **25**, 1245(1956).
17. T. Shimanouchi: Flexibility of chemical bond as revealed by the rocking frequencies in ethylene. *J. Chem. Phys.*, **26**, 594(1957).
18. D.E. Mann, T. Shimanouchi, J.H. Meal and L. Fano: Normal coordinate analysis of halogenated ethylenes. I. General methods. *J. Chem. Phys.*, **27**, 43(1957).
19. D.E. Mann, L. Fano, J.H. Meal and T. Shimanouchi: Normal coordinate analysis of halogenated ethylenes. II. Perhalogenated ethylenes. *J. Chem. Phys.*, **27**, 51(1957).
20. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Coriolis constants and force constants of methane, ethane and their deuterium homologues. *Nippon Kagaku Zasshi*, **80**, 128(1959).
21. T. Shimanouchi and I. Suzuki: Force constants of chloro- and bromomethanes. *J. Mol. Spectroscopy*, **6**, 277(1961).
22. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Rotation-vibration spectra and rotational, Coriolis coupling, centrifugal

- distortion and potential constants of methyl cyanide. *Spectrochim. Acta*, **18**, 513(1962).
23. T. Shimanouchi and I. Suzuki: Infrared spectra and force constants of CH_2Cl_2 , CHDCl_2 , and CD_2Cl_2 . *J. Mol. Spectroscopy*, **8**, 222(1962).
 24. T. Shimanouchi: Force constants of small molecules. *Pure and Applied Chem.*, **7**, 131(1963).
 25. T. Onishi and T. Shimanouchi: Normal vibrations of dimers of aluminum trichloride, trimethyl aluminum and dimethyl aluminum chloride. *Spectrochim. Acta*, **20**, 325(1964).
 26. T. Fujiyama and T. Shimanouchi: Vibration spectra and force constants of malononitrile, malononitrile- d_1 and malononitrile- d_2 . *Spectrochim. Acta*, **20**, 829(1964).
 27. T. Shimanouchi and I. Suzuki: Method of adjusting force constants and its application to H_2O , H_2CO , CH_2Cl_2 , and their deuterated molecules. *J. Chem. Phys.*, **42**, 296(1965), **43**, 1854(1965).
 28. T. Shimanouchi, I. Nakagawa, J. Hiraishi and M. Ishii: Force constants of CF_4 , SiF_4 , BF_3 , CH_4 , SiH_4 , NH_3 , PH_3 . *J. Mol. Spectroscopy*, **19**, 78(1966).
 29. T. Ueda and T. Shimanouchi: Band envelopes of asymmetrical top molecules. *J. Mol. Spectroscopy*, **28**, 350(1968).
 30. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Rotation-vibration spectra and rotational, Coriolis coupling and potential constants of ethane, ethane- d_6 and ethane-1, 1, 1- d_3 . *J. Mol. Spectroscopy*, **39**, 255(1971).
 31. T. Shimanouchi: Tables of molecular vibrational frequencies. Part. 1. National Standard Reference Data, Series-NBS 6(1967).
 32. T. Shimanouchi: Tables of molecular vibrational frequencies. Part 2. National Standard Reference Data, Series-NBS 11(1967).
 33. T. Shimanouchi: Tables of molecular vibrational frequencies. Part 3. National Standard Reference Data,

Series-NBS 17(1968).

34. T. Shimanouchi: Computer programs for normal coordinate treatment of polyatomic molecules. (Department of Chemistry, University of Tokyo, 1968).
35. T. Shimanouchi: Molecular force field "Physical Chemistry, vol. IV" edited by Eyring, Henderson and Jost. (Academic Press, 1970).
 ④ 分子力場回帰法 複合分子の振動問題 19-99 ④
36. T. Shimanouchi: Infrared spectra and molecular structure of some halogenoethanes. *J. Chem. Soc. Japan*, **62**, 1264(1941).
37. T. Shimanouchi and M. Kawano: Measurement of infrared dichroism for the crystal of lauric acid in the CsBr region. *Bull. Chem. Soc. Japan*, **32**, 894(1959).
38. T. Shimanouchi and M. Tasumi: Normal coordinate treatment and assignment of infrared absorption bands of polyvinyl chloride. *Bull. Chem. Soc. Japan*, **34**, 359(1961).
39. T. Shimanouchi and M. Tasumi: Dichroism of 603 cm^{-1} band of polyvinyl chloride. *J. Chem. Phys.*, **34**, 687(1961).
40. M. Tasumi and T. Shimanouchi: Polarized infrared studies on polyvinyl chloride films—Effects of drawing. *Spectrochim. Acta*, **17**, 731(1961).
41. T. Shimanouchi and M. Tasumi: Infrared spectra and molecular structure of meso and di-2, 4-dichloropentanes as model compounds of polyvinyl chloride. *Spectrochim. Acta*, **17**, 755(1961).
42. T. Shimanouchi, M. Asahina and S. Enomoto: Elastic moduli of oriented polymers. I. The simple helix, polyethylene, polytetrafluoroethylene, and a general formula. *J. Polymer Science*, **59**, 93(1962).
43. M. Tasumi, T. Shimanouchi and T. Miyazawa: Normal vibrations and force constants of polymethylene

- chain. *J. Mol. Spectroscopy*, **9**, 261(1962).
44. M. Tasumi, T. Shimanouchi and T. Miyazawa: A refined treatment of normal vibrations of polymethylene chain. *J. Mol. Spectroscopy*, **11**, 422(1963).
 45. T. Fujiyama and T. Shimanouchi: Electrostatic interaction between two dipoles of substituents in the syndiotactic and the isotactic vinyl polymers. *J. Chem. Phys.*, **39**, 1138(1963).
 46. M. Tasumi, T. Shimanouchi, H. Tanaka and S. Ikeda: Stereo-regulated poly-dideuteroethylene II. Infrared spectra and normal vibration analysis. *J. Polymer Sci.*, **12**, 1607(1964).
 47. T. Fujiyama, K. Tokumaru and T. Shimanouchi: Vibration spectra and force constants of succinonitrile. *Spectrochim. Acta*, **20**, 415(1964).
 48. M. Tasumi, T. Shimanouchi, A. Watanabe and R. Goto: Infrared spectra of normal higher alcohols. *Spectrochim. Acta*, **20**, 629(1964).
 49. H. Takahashi, T. Shimanouchi, K. Fukushima and T. Miyazawa: Infrared spectrum and normal vibrations of cyclohexane. *J. Mol. Spectroscopy*, **13**, 43(1964).
 50. T. Shimanouchi: Normal vibrations of polyethylene and some vinyl polymers. *J. Polymer Science*, **C7**, 85(1964).
 51. M. Tasumi and T. Shimanouchi: Crystal vibrations and intermolecular forces of polymethylene crystals. *J. Chem. Phys.*, **43**, 1245(1965).
 52. T. Shimanouchi: Molecular structure of stereoisomers of 2,4,6-Trichloroheptane as model compounds of polyvinyl chloride. *Makromolekulare Chem.*, **86**, 43(1965).
 53. S. Sato, R. Chujo, E. Nagai, Y. Abe, M. Tasumi and T. Shimanouchi: Report on Progress in Polymer Physics, **8**, 311(1965).

54. T. Shimanouchi, M. Tasumi and Y. Abe: Stable conformations on syndiotactic and isotactic vinyl polymers and their two-unit and three-unit model molecules. *Pure and Applied Chemistry*, **12**, 287 (1966)
55. M. Tasumi, T. Shimanouchi, H. Kenjo and S. Ikeda: Molecular vibrations of irregular chains. I. Analysis of infrared spectra and structures of polymethylene chains consisting of CH_2 , CHD, and CD_2 groups. *J. Polymer Science*, A-1, **4**, 1011(1966).
56. M. Tasumi, T. Shimaouchi and S. Ikeda: Molecular vibrations of irregular chains. II. Configurations of polydeuteroethylene. *J. Polymer Science*, A-1, **4**, 1023(1966).
57. Y. Abe, M. Tasumi, T. Shimanouchi, S. Satoh and R. Chujo: NMR spectra of model compounds of poly(vinyl chloride). *J. Polymer Science*, A-1, **4**, 1413(1966).
58. T. Ueda and T. Shimanouchi: Ring puckering motion of 2,5-dihydrofuran. *J. Chem. Phys.*, **47**, 4042 (1967).
59. R.F. Schaufele and T. Shimanouchi: Longitudinal acoustical vibrations of finite polymethylene chains. *J. Chem. Phys.*, **47**, 3605(1967).
60. T. Ueda and T. Shimanouchi: Near-infrared band progressions of ring molecules and ring puckering motion. *J. Chem. Phys.*, **47**, 5018(1967).
61. A. Tomonaga and T. Shimanouchi: Rotational isomers of n-pentane. *Bull. Chem. Soc. Japan*, **41**, 1446 (1968).
62. T. Shimanouchi, Y. Abe and K. Kuchitsu: Electron diffraction study of rotational isomerism of 2-methylbutene. *J. Mol. Structure*, **2**, 82(1968).
63. T. Shimanouchi, Y. Abe and M. Mikami: Skeletal deformation vibrations and rotational isomerism of some ketones and olefins. *Spectrochim. Acta*, **24A**, 1037(1968).

64. T. Shimanouchi and Y. Abe: Skeletal deformation vibrations and rotational isomerism of methylbutenes and methylpentenes as model compounds of 1,4-polyisoprene. *J. Poly. Sci.*, **A6**, 1419(1968).
65. T. Ueda and T. Shimanouchi: Dihedral angle and ring-puckering potential of cyclobutane. *J. Chem. Phys.*, **49**, 470(1968).
66. M. Abe, K. Kuchitsu and T. Shimanouchi: Electron diffraction study of rotational isomerism of methyl ethyl ketone. *J. Mol. Structure*, **4**, 245(1969).
67. T. Shimanouchi: Stable conformations of polymer chains and model compound molecules. *Discussions Faraday Soc.*, **49**, 60(1970).
68. M. Tasumi and T. Shimanouchi: Normal coordinate analysis of poly(vinyl chloride) and deuterated analogs. *Polymer Journal*, **2**, 62(1971).
69. M. Tasumi, T. Shimanouchi and R.F. Schaufele: Laser-Raman scattering by the $C_{24}H_{48}$ ring molecule. *Polymer J.*, **2**, 740(1971).
70. T. Shimanouchi and M. Tasumi: Skeletal vibrations of chain molecules. *Indian J. Pure Appl. Phys.* (in press).
71. T. Shimanouchi: Conformations of polymer chains as revealed by infrared spectroscopy. *NMR-Basic Principles and Progress*, vol. 4 (Springer-Verlag, Berlin 1971)p.287.
72. T. Shimanouchi, Y. Abe and Y. Alaki: Stable conformations of 1,4-polybutadiene chains and their model compound molecules. *Polymer J.*, **2**, 199(1971).
 ㊦ 共線赤外吸収 屈曲振動 準線振動 共線赤外吸収
73. T. Shimanouchi, M. Tsuboi and T. Miyazawa: Optically active lattice vibrations as treated by the GF-matrix method. *J. Chem. Phys.*, **35**, 1597(1961).

74. T. Shimanouchi and I. Nakagawa: Infrared spectroscopic study on the coordination bond. I. Infrared spectra of cobalt hexammine, pentammine and transtetrammine complexes. *Spectrochim. Acta*, **18**, 89(1962).
75. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Infrared spectroscopic study on the coordination bond. II. Infrared spectra of octahedral metal cyanide complexes. *Spectrochim. Acta*, **18**, 101(1962).
76. M. Tsuboi, M. Terada and T. Shimanouchi: Optically active lattice vibrations of α -uranium trioxide. *J. Chem. Phys.*, **36**, 1301(1962).
77. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Infrared absorption spectra of aquo complexes and the nature of coordination bonds. *Spectrochim. Acta*, **20**, 429(1964).
78. J. Hiraishi, I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Infrared spectra of some hexahalogeno complexes. *Spectrochim. Acta*, **20**, 819(1964).
79. I. Nakagawa, T. Shimanouchi and K. Yamasaki: Infrared spectra and structure of the hexanitrocobalt complex salts. *Inorg. Chem.*, **3**, 772(1964).
80. T. Shimanouchi and I. Nakagawa: Infrared spectra and force constants of ammine complexes. *Inorg. Chem.*, **3**, 1805(1964).
81. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Far infrared spectra and metal-ligand force constants of metal ammine complexes. *Spectrochim. Acta*, **22**, 759(1966).
82. J. Hiraishi and T. Shimanouchi: Lattice vibrations and the force field of K_2PtCl_6 , K_2PdCl_6 and K_2PtCl_6 . *Spectrochim. Acta*, **22**, 1483(1966).
83. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Far infrared spectra and lattice vibrations of hexanitrocobalt (III) complex salts and ammine complex salts. *Spectrochim. Acta*, **22**, 1707 (1966).

84. I. Harada and T. Shimanouchi: Normal vibrations and intermolecular forces of crystalline benzene and naphthalene. *J. Chem. Phys.*, **44**, 2016(1966).
85. M. Mikami, I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Far infrared spectra and metal-ligand force constants of acetylacetonates of transition metals. *Spectrochim. Acta*, **23A**, 1037(1967).
86. I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Infrared spectra and structures of nitroamine cobalt(III) complexes. *Spectrochim. Acta*, **23A**, 2099(1967).
87. I. Harada and T. Shimanouchi: Far infrared spectra and intermolecular force of crystalline benzene at 138°K. *J. Chem. Phys.*, **46**, 2708(1967).
88. I. Nakagawa, A. Tsuchida and T. Shimanouchi: Infrared transmission spectrum and lattice vibration analysis of some perovskite fluorides. *J. Chem. Phys.*, **47**, 982(1967).
89. J. Hiraishi, I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Far infrared spectra and metal ligand force constants of amminecomplexes of Pt(IV), Pt(II) and Pd(II). *Spectrochim. Acta*, **24A**, 819(1968).
90. M. Ishii, T. Shimanouchi and M. Nakahira: Far infrared absorption spectra of layer silicates. *Inorganica Chimica Acta*, **1**, 387(1967).
91. I. Nakagawa, T. Shimanouchi and K. Yamasaki: Low temperature far-infrared spectra of hexanitro complex salts. *Inorg. Chem.*, **7**, 1332(1968).
92. M. Suzuki and T. Shimanouchi: Infrared and Raman spectra of succinic acid crystal. *J. Mol. Spectroscopy*, **28**, 350(1968).
93. M. Suzuki and T. Shimanouchi: Infrared spectra and conformations of succinonitrile in silver and copper complexes. *Bull. Chem. Soc. Japan*, **41**, 2353(1968).
94. M. Mikami, I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Infrared spectroscopic investigations of pyridine-2-carbo-

- xamide chelate of bivalent metals. II. Far infrared spectra and normal coordinate treatment. *Spectrochim. Acta*, **25A**, 365(1969).
95. M. Suzuki and T. Shimanouchi: Infrared and Raman spectra of adipic acid crystal. *J. Mol. Spectroscopy*, **29**, 415(1969).
96. Y. Omura, I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Vibrational frequencies and modes of bisethylenediamine-metal chelates. *Spectrochim. Acta*, **27A**, 2227(1971).
97. Y. Omura, I. Nakagawa and T. Shimanouchi: Far-infrared spectra of magnus-typesalts, $[\text{Pd}(\text{en})_2][\text{PtCl}_4]$, $[\text{Pd}(\text{en})_2][\text{PdCl}_4]$ and $[\text{Pt}(\text{en})_2][\text{PtCl}_4]$. *Spectrochim. Acta*, **27A**, 1153(1971).
98. T. Shimanouchi: Memory elements in biological substances. *Kagaku*, **30**, 39(1960).
99. I. Suzuki, M. Tsuboi and T. Shimanouchi: A solvent effect on the infrared absorption of N-methyl-acetamide in the region on the NH stretching frequency. *J. Chem. Phys.*, **32**, 1263(1960).
100. I. Suzuki, M. Tsuboi and T. Shimanouchi: An intramolecular interaction between the NH and phenyl groups in N-methyl phenyl acetamide. *Spectrochim. Acta*, **16**, 467(1960).
101. T. Shimanouchi, M. Tsuboi, Y. Kyogoku and I. Watanabe: On the 1680cm^{-1} band of ribonucleic acid in D_2O solutions. *Biochim. Biophys. Acta*, **45**, 195(1960).
102. Y. Kyogoku, M. Tsuboi, T. Shimanouchi and I. Watanabe: Nucleic acids in D_2O solution. I. An infrared criterion of the base pairing in nucleic acid structure. II. Parallelism of the hypochromicity at $260\text{ m}\mu$ and the hyperchromicity at 1685cm^{-1} of nucleic acids in deuterium oxide solution. *Nature*, **189**, 120(1961).
103. T. Shimanouchi, M. Tsuboi, T. Takenishi and N. Iwata: A strong band at 1200cm^{-1} characteristic of

- the $-\text{CH}_2-\text{COOH}$ group. *Spectrochim. Acta*, **16**, 1328(1961).
104. Y. Kyogoku, M. Tsuboi, T. Shimanouchi and I. Watanabe: Infrared spectra of formamide-treated nucleic acids. *J. Mol. Biology*, **3**, 741(1961).
 105. N. Tamiya and T. Shimanouchi: Infrared absorption spectra of deuterated aspartic acids. *Spectrochim. Acta*, **18**, 859(1962).
 106. M. Tsuboi, Y. Kyogoku and T. Shimanouchi: Infrared absorption spectra of protonated and deprotonated nucleosides. *Biochim. Biophys. Acta*, **55**, 1(1962).
 107. Y. Kyogoku, T. Shimanouchi, M. Tsuboi and I. Watanabe: Proton transfer in nucleic acid. *Nature*, **195**, 459(1962).
 108. S. Suzuki, T. Shimanouchi and M. Tsuboi: Normal vibrations of glycine and deuterated glycine molecules. *Spectrochim. Acta*, **19**, 1195(1963).
 109. M. Tsuboi, K. Matsuo, T. Shimanouchi and Y. Kyogoku: On the 1120cm^{-1} band of ribonucleic acids. *Spectrochim. Acta*, **19**, 1617(1963).
 110. T. Shimanouchi and I. Harada: Far infrared spectra of cyanuric acid, uracil and diketopiperazine. *J. Chem. Phys.*, **41**, 2651(1964).
 111. T. Shimanouchi, M. Tsuboi and Y. Kyogoku: Infrared spectra of nucleic acids and related compounds. *Advances in Chemical Physics*, **7**, 435(1964).
 112. S. Suzuki, Y. Iwashita and T. Shimanouchi: Infrared spectra of isotopic polyglycines. *Biopolymers*, **4**, 337(1966).
 113. K. Itoh and T. Shimanouchi: Far infrared spectra of N-methylacetamide and related compounds and hydrogen-bond force constants. *Biopolymers*, **5**, 921(1967).

114. Y. Koyama and T. Shimanouchi: Infrared spectra and conformations of model compounds of proteins. I. Acetylglycine N-methylamide. *Biopolymers*, **6**, 1037(1968).
115. K. Itoh and T. Shimanouchi: Far-infrared spectra of acetamide. *Spectrochim. Acta*, **25A**, 290(1969).
116. S. Mizushima and T. Shimanouchi: Note on the conformation of chain molecules. *Commentarii Vol. II* -N.30, 1(1970).
117. K. Itoh and T. Shimanouchi: Vibrational modes of α -helix. *Biopolymers*, **9**, 383(1970).
118. Y. Koyama, T. Shimanouchi and Y. Itaka: The crystal and molecular structure of N-methyl-chloroacetamide. *Acta Crystallographica*, **B27**, 940(1971).
119. Y. Koyama, T. Shimanouchi, M. Sato and T. Tatsuno: Conformations of model compounds of proteins. II. Infrared spectra of N-acetyl-amino acid methylamides. *Biopolymers*, **10**, 1059(1971).
120. K. Itoh and T. Shimanouchi: Breathing vibrations of α -helix. *Biopolymers*, **10**, 1419(1971).
121. K. Itoh, I. Nakahara, T. Shimanouchi, M. Oya, K. Uno and Y. Iwakura: Far-infrared spectra of polyalanines with α -helical and β -form structures. *Biopolymers*, **6**, 1759(1968).
122. K. Itoh, T. Shimanouchi and M. Oya: Far-infrared spectra of poly(α -amino acids) with basic alkyl group side chains. *Biopolymers*, **7**, 649(1969).

以上のほか約八〇篇の報文がある。