

ISSN 0385-0560

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

分子科学研究所

分子研_レターズ

昭和57年 3 月

NO.10'82



宿泊施設として、従来からの「山手ロッジ」（E地区）に加えて、研究所に近いC地区に「三島ロッジ」が完成した。個室30室、家族室6戸からなり、昭和56年6月1日以来、多くの共同研究者、外国人研究者に利用されている。

目 次

視 点

研究者と飢餓感	分子研 長 倉 三 郎	1
---------------	-------------------	---

レ タ ー ズ

福井謙一先生のノーベル化学賞と文化勲賞の御受賞をお慶びして

阪大基礎工	笛 野 高 之	2
福井謙一先生のノーベル賞・文化勲章受賞を祝って …	分子研 諸 熊 奎 治	3
今も変らぬ森野先生・名古屋時代の思い出 ……………	北大理 木 村 雅 男	5
文化功労者となられた森野米三先生 ……………	東大理 朽 津 耕 三	7
藤山常毅君へ ……………	お茶の水大理 細 矢 治 夫	9
A Place in the Sun ……………	マニトバ大 Bryan R. Henry	12
Four Months in Bunshi Ken ……………	ロヨラ大 David S. Crumrine	14

研究室紹介

分子基礎理論第一部門 I	分子研 諸 熊 奎 治	16
分子基礎理論第一部門 II	分子研 塚 田 捷	19
化学資料室	分子研 高 谷 秀 正	22

岡崎コンフェレンス報告

第13回岡崎コンフェレンス

短寿命分子とイオン- 星間過程におけるその役割 ... 分子研 齋 藤 修 二	28	
Two Reflectors Made in 1930	慶大理工 霜 田 光 一	31

第14回岡崎コンフェレンス

The Primary Processes in Photochemical Reaction

	大阪大基礎工	又	賀	昇		
	分子研	吉	原	經太郎		36
コヒーレント分子分光		東北大・理	伊	藤	光 男	 40

研究会報告

UVSORストレージング観測システムの設計	分子研 木 村 克 美	42
化学反応への衝突論的アプローチ	北大理 大 野 公 男	43
光エネルギーの不均一系化学変換の高率化をめざして	東大工 藤 嶋 昭	44
有機化合物にみられる弱い分子内及び分子間相互作用 横浜国大工 廣 田 穰		47

センターニュース

電子計算機センター	49
機器センター	51
昭和56年度共同研究採択一覧	53
分子研コロキウム	63
所内ニュース	66
編集後記	67

視 点

研究者と飢餓感

分子研 長 倉 三 郎

3月3日の中日新聞に掲載された“2・26の雪”という谷川健一氏の小文に心をひかれた。民俗学者である同氏によれば、人類史の流れを左右する最も重要な要素は飢餓であるという。そういえば、わが国の軍国主義に道を開き敗戦に導いた2・26事件も、昭和の初めに東北地方を襲った大飢饉による農民の困窮と関係があるといわれている。こうした例をあげた後で、谷川氏は次のように述べている。

「東北の大地にそだった思想はすべて飢餓を主題とした。安藤昌益、高野長英、石川啄木、宮沢賢治の思想みなしかりである。彼らは眼前の飢餓をバネにして、人間の普遍平等の世界を追い求めた。とすれば、飢餓は彼らの思想を生み出した母である。(中略) 邪慥で苛酷な飢餓が、母として人間の思想を鍛えたことも忘れてはならない。」

考えてみると、われわれの世代の研究者は食糧不足に悩まされた敗戦直後の悲惨な状態をはじめとして、研究の面でも、さまざまな飢餓状態を体験してきた。試験管、ビーカー、氷さえも容易に手に入らなかった研究物資や研究装置の飢餓状態、国際会議の出席はもちろん、海外の学術雑誌の入手も困難であった学術情報の飢餓状態、それに研究費について慢性的な欠乏状態に苦しんでいたことはいうまでもない。

こうした現在では想像もできないような終戦直後の飢餓状態の中で、福井教授のフロンティア電子理論をはじめいくつかの創造的な研究が行なわれていたことに注目する必要があるだろう。今ふりかえてみると、当時は、戦時中の制約から解放されて新しい時代を迎える激動期であり、未知の世界への期待と探求心が旺盛な時代であった。いわば“知的飢餓感の横溢した時代”であったといってもよいであろう。きわめて劣悪な研究条件のもとで優れた研究が生れた要因の一つはこうした時代的背景ではなかったかと思う。

わが国の科学技術や経済力は、今や目覚ましい発展を遂げ、研究条件も著しく向上した。もちろん研究費、研究者定員、研究体制等について研究者の側からみて改善すべき点はまだ多く残されており、そのための努力が引き続き行なわれなければならないことはいうまでもない。同時に研究者にとって重要なことは、“知的飢餓感”を燃やし、それをバネとして、困難な未知の世界の探求に緊張と集中力をもって挑戦することにあると考える。

レターズ

福井謙一先生のノーベル化学賞と 文化勲賞の御受賞をお慶びして

大阪大基礎工 笛 野 高 之

福井謙一先生が、1981年のノーベル化学賞の栄冠をお受けになり、ひきつづき昭和56年度の文化勲章の荣誉に輝かれましたことに対し、ここに衷心からお慶び申し上げたく思います。前者は、日本人化学者として最初の受賞ですので 先生御自身にとって最高の名誉であるだけでなく、わが国の化学界全体にとっても歴史的な慶事であるといえます。後者は、学問をとおして文化の振興に寄与したいと念じるわが国のすべての科学者にとって、何よりの励ましであるように思われます。本当に嬉しく喜ばしいことです。

思い出してみると、私が先生のフロンティア電子理論の最初の論文 [J. Chem. Phys. (1952)] を読ませていただいたのは、私の卒業した昭和28年 (1953年)のことでした。恩師古川淳二先生をとおして、この記念すべき論文の別刷を頂戴したのです。理論の背景を正しく理解する由もない一学生でしたが、フロンティア電子という直感的イメージの簡明さと、その予測性の美ごとさに大変な感動をおぼえました。しかし一方では、自分の趣味で勉強していた Coulson や Dewar や Matsen らの (全) π 電子理論の体系美にも少なからず魅かれていたようです。ところが Dewar の著名な J. Am. Chem. Soc. 一連論文 (1952) における分子間非局在化エネルギーとの関連から、フロンティア軌道という概念の意義を鮮明に示された続報 [Bull. Chem. Soc. Jpn. (1954)] で、私の迷いは氷解しました。さらに Coulson-Longuet-Higgins の摂動理論 (1947) を統合した数学美溢れる論文 [J. Chem. Phys. (1957)] に接するに及び、先生の学風に対して限らない憧憬を感じるにいたりました。ちょうどその間に、米沢先生や永田先生の学位論文が相ついで提出され、このほうもそれこそ紙面に穴があくほどに精読させていただいたものです。

私が博士研究員としてアメリカに留学した1958年ころは、福井理論の重要性はまだ近年ほどには広く認識されてはいなかったようです。1961年に、Eyring 先生の厳命で、Ann. Rev. Phys. Chem. の一章を執筆させられる破目になったとき、福井先生にお願いして、その後の論文の別刷の束を恵与いただき、自分の勉強のためにも大いに活用させていただきました。そのときにいただいた温かい励ましのお言葉は、いまだに忘れることができません。

周知のように、1965年に著名な Woodward-Hoffmann 則の最初の数報が提出され、化学界が大いに賑わいました。私自身この反応則が福井理論 [Tetrahedron Lett. (1965); Bull. Chem.

Soc. Jpn. (1966)] の観点からしか見据えられないでいるのは、フロンティア電子理論の生い立ちに対する心理的身近さのためかも知れません。その後のフロンティア電子理論の発展については、ここで私が申し述べるまでもないことです。

思うに、学生時代以来私が先生の学風と人格から受けた感化は多大であるように思います。御研究の進展を懐しく回想するにつけ、私にはいつも、先生の開拓者的な業績の積み上げが私の敬愛して止まないベートーヴェンの作曲活動と重なって見えてなりません。このような身勝手な連想は、先生にとってははなはだ御迷惑なことかも知れませんが、フロンティア電子理論が確立されつつあった当時から、幸運にも地理的に最も近い所に居あわせた部外の後輩の敬意に免じて、お許しいただけるものと思います。私のいいたいのは、二者の楽(学)風が共通して革新(innovation)にあるということです。第1交響曲は最初からベートーヴェン特有のモチーフをもち、その後の一貫した独自の楽風を予言するかのごとくです。先生の摂動理論の論文は、第2、第3交響曲のごとくです。理論の普遍性はさらに、強烈な個性の4、5、6、7、8番を経て、あの第9交響曲までに到るかのごとくです。その間に、珠玉のごときソナタや四重奏あり、力感豊かな協奏曲あり、壮麗なミサ曲あります。私自身いつも、自らが現在手がけているささやかな研究でも、それなりに自身の何番目かの交響曲として後の世に残るような値うちを備えているのかどうか——という自問にさいなまれますので、余計にそうに感じるのでしょう。

いうまでもなく、ベートーヴェンの独自性とても、バッハやモーツァルトの存在とは無縁であったわけではありません。また、ベートーヴェンの楽風への感化が形を変えて後世の多くの作曲家に受け継がれていったことも事実です。この壮大なロマンにあやかるごとくに、創意ある若いシューベルトやブラームスが、日本から、ことに分子科学の土壌から後に続いてくれることと信じます。ロマンを夢みて研鑽を積むことこそ、先生の榮譽を真にお慶びする途かと思えます。

福井謙一先生のノーベル賞・文化 勲賞受賞を祝って

諸 熊 奎 治

福井謙一先生が1981年ノーベル化学賞を受賞された。あわせて、昭和56年度文化勲章を受けられ、また文化功労者に選ばれた。分子科学を学ぶものの一人として、また先生に教えを受けたものの一人として、これにまさる喜びはない。1981年には、福井先生はアメリカのナショナル科学アカデミーの外国人会員にも選ばれておられる。

1952年に化学反応性に関する先生として最初の論文で、早くもフロンティア電子という基本概

念を導入された慧眼には、ただ感服の他ない。新聞などのインタビューでは、“ちょっとした思いつき”だと言っておられるようだが、量子論へのひたむきな努力、有機化学への深い造詣と物事の本質へのするどい直観があったことは疑いない。この論文が発表されてから今日まで30年の道は、ある時は無視され、ある時は反論されて、決して平坦ではなかった。反論に対しては、先生は徹底的に反論された。はじめの論文で、“仮定”として提出されたフロンティア軌道が、この反論の過程で理論化され体系化されていった。この一貫性と息の長さが、アイディアの独創性と合さって、今回の受賞に結びついた。

50年代後半から60年代前半のフロンティア理論の発展期に、私は先生の研究室にお世話になった。研究者としての先生の思い出は“きびしかった”というにつきよう。毎朝のように、新しいアイディアを研究室に持って来られ、検討を指示される。(これが、いわゆる寝床メモであることは、このたび報道されるまで知らなかった。)大学院学生にはむづかしい問題が多かったが、米沢助教授はじめ研究室の諸先輩にまじって議論を重ねた。人真似の考え方には大変きびしく、仲々おほめいただくようなアイディアは出なかった。

1962年ごろ、今村詮氏(現滋賀医大)が多中心の分子間相互作用を計算している際、 $C_1^2 + C_2^2$ と係数の2乗の和になりそうところが $(C_1 + C_2)^2$ と係数の和になることが見つかり、その意味について興奮しつつ連日議論が白熱したなど、思い出も深い。これが、Diels-Alder反応における分子軌道の符号と反応性の関係を論じた64年の論文に発展した。

65年、WoodwardとHoffmannが分子軌道の対称性と反応選択性について一連の論文を発表した時、私はコロンビア大学に居てHoffmann教授のコロキウムに出席したが、質問に対し、“この理論は、福井の理論とは独立だ”と強調していた。その後、Longuet-Higginsや福井先生らのアメリカ化学会誌上での論争があり、また論文をじっくり読んで比較検討した有機化学者の間から、“Woodward-Hoffmannの前にFukuiがあった”という評価の声が次第に強くなって来た。そして、軌道対称則によって有機化学の教科書がすっかり書き直された70代のはじめごろから、Fukui, Woodward, Hoffmannで賞をもらうべきだという声がアメリカのあちこちで聞こえるようになった。ひそかにその日を期待しつつの10年はずい分待遠しいものではあった。

福井先生は、その後も反応座標の概念に基づいたポテンシャル面の区劃など新しい研究を発表され、今でもこの分野の世界のリーダーである。日本では停年という悪平等な制度があり、本年3月末で永年の研究を生み出して来られた研究室を去られることになっているのは誠に残念である。Mulliken教授が80才を越してなお、古巣シカゴ大学で研究活動を続けておられるのを見る時、日本にも能力と健康に応じて、停年以降も研究を続けていただける方法があってほしいと思う。現役中はお忙しくて仲々ゆっくりしていただけなかった分子研にも出来るだけ頻繁に来ていただき、御教示いただきたいと願っている。

ノーベル賞受賞後、福井先生は基礎研究の重要性を声を大きくして叫んでおられる。また、若い人達が研究に腕をふるう機会を与えるよう呼びかけておられる。さらに、科学者の社会における責任についても大いに言及されている。朝永、湯川両先生亡きあと、日本の科学者の代表として発言する機会が今後ますます増えて来るものと思われる。よき次の世代のために、この分野でも先生の御活躍を期待したい。

今も変わらぬ森野先生・名古屋時代の思い出

北大理 木村 雅 男

先生が文化功労者となられたことを本当に嬉しく思い、また、何か心にほっとしたものを感じている此頃である。戦前、戦中、戦後を通して構造化学、分子分光学的研究に生涯をかけて来られ、輝かしい足跡を残された先生から、私達はどれほど大きなものを学びとることができたか、端的に言う言葉がない。私のように、研究者としては全くひよこ時代から先生の教えを受けて来たものには、余りにも身近にあったがゆえに、かえって、先生の業績から、何を学んだかと自問自答しても、適切な答えが出て来ないのである。強いて言えば、先生の業績は数百に上る論文にあり、我々は何を学んだかと問われれば、それは、自然科学の意義を研究第1、私生活第2の研究者の道を自ら実践することにより、私達に教えて下さったということである。私が先生の教えを受けるようになった名古屋大学時代を思い起すと、いまま変らぬ先生の姿が目に見えてくる。

昭和18年は、先生が分子の基準振動の研究で桜井賞を受賞された年の翌年であり、戦争の最中であつた。10月に先生についてはいった名古屋大学理学部6号館には、まだ電気が来ていなかった。暗くなると、私達は、先生からもう帰ろうかと声を掛けられて一緒に帰った。なつかしい6号館時代の始まりである。この出発に当って、これまで手掛けて来られた分子内力場の問題、回転異性体の問題を熱的測定法、電子回折法などを用いて、新しく展開させようとの先生の意気込みがひしひしと感ぜられた。先生は、午前午後少くとも2回は「どうなった。」と私達に声を掛けられた。これは、こちらから報告する手間がはぶける代りに、その度毎に何か新しい報告材料を作っておかなければならないという、張り合いはあるが苦痛を伴う毎日であつた。

この時代は、構造化学あるいは分子分光学が、次の時代を迎えようとしているときであつた。それにもかかわらず、国内事情は最悪であつた。世界の情報はほとんど入らず、入っても、それについて行けない時代であつた。世界に挑戦しようとする先生にとっては、実にもどかしい時代であつたに違いない。しかし、手作りの分光器をもって、我国の分光化学を開拓された先生

には、物が無いことが研究できないことにはつながらないのであった。私達も、いつかそんな気になっていた。戦争が終りに近づくにつれて、名古屋の中心部、工場地帯から離れていた東山周辺も、爆弾や焼夷弾に見舞われるようになった。この時になっても、先生の研究第一の姿勢は変らなかった。今から見れば、装置とも言えないような装置を作るために、焼跡からブリキ板や金属片を捨て、集めたブリキ板をハンマーで延し、錆をとって容器を作ったり、金属片と紙片とで電気のソケットを作ったりするのも、自然に研究生活の一部となった。よく先生に言われた

「君達、今こそ我々は研究を続けなければいけないのだ」

と。戦後間もない頃である。ある一人が当時を振り返って、「破れ大鼓を辛うじて直しながら、これでもかこれでもかと叩き続けていた」と言った。大鼓を叩きつづけることができたのは、ともすれば私生活に心が行き、また、当時の国内事情の中で分子構造の研究をすること自体に、何か心に引っ掛かるものを感じていた私達の弱気を、叱咤し、払拭させた先生の信念であった。

戦後、構造化学、分子分光学は新しい時代を迎えた。気体電子回折にしても、1949—1950年にKarleの論文が発表された。遅れては追いつくことはもちろん、世界の第一線に立つことはできない。このときは、すでに、東大に移っておられたが、先生は居ても立ってもいられない気持ちであったと思う。同じように感じながらも踏み切れず、あきらめかけていた私の尻を叩いて「木村君、セクター付装置を作ろう」と言われたときには、しまったと思った。如何なる事情にあらうとも、研究者の生命は研究にあることを忘れかけていたからであり、私から先生に相談すべきことを先に言われてしまったからである。以後、二度とこう言うことを先生に言わせまいと心掛けて来たのであるが、今も、時々適切な叱責や助言をいただいている始末である。

先生の名古屋大学時代は、激しい研究意欲を中心に展開したとは言え、決して実り多いものではなかった。花開いたのは、東大に移られて数年後のことである。しかし、一貫して基礎化学の研究に徹し、未開拓の分野に挑戦し、私達若いものをリードし続けて下さったことが、現在の我国分子科学をもたらしたものといっても、過言ではないであろう。今でも、学会に顔を出されて、若い人達の新しい成果や抱負に満ちた発表を聞くと、嬉しそうに感想を洩らされるのである。

先生は、いま、登山や山歩きを楽しんでいられる。同窓会の席上で、若き日の登山行の跡を実証する話を楽しそうにされた。名古屋大学時代にこんなことがあった。京都で学会があった折、さる庭園を見に行こうと先生が言い出し、一緒にこっそり忍び込み、巡回人の目を盗みながら見て回った。この、こっそり見て回っているのが嬉しくてたまらないという感じであった。先生が植えられた柿の木なども、6号館とともに、今は名古屋大学にない。しかし、先生の残された業績は、次の時代に立派に受け継がれており、また、みなその覚悟でいると申し上げたい。

文化功労者となられた森野米三先生

東大理 朽 津 耕 三

森野先生が文化功労者になられたというニュースがテレビや新聞で報道されたのは、昨年10月20日のことであった。ちょうど福井先生のノーベル賞のニュースとも重なって、私どもにとってこの上もない嬉しい出来事となった。

森野先生がなしとげられた多方面の研究は、どの学問分野でどのように活かされているのだろうか。この問題は、何かの機会に真剣に調べてみたいと思っている。ともかく、その一端を示す資料として、アメリカの科学情報研究所の調査結果が先日¹⁾の新聞に出ていた。これは1965—78の14年間に発表された自然科学の論文が同じ期間に何回引用されたかを数えて、上位1000人を世界中から選んだものだという。森野先生(2772件)は、日本人19名、物理化学者24名(日本人ではただ1人)、1909年以前の生まれ26名(日本人ではただ1人)の中に加わっておられた。分野の内訳をみると、生命科学の研究者が圧倒的に多い。構造化学のような基礎分野の研究者がこのリストに加わるのは異例のようにさえみえる。先生の提出された新しい考え方や方法論と決定された正確な構造定数が、いかに重要で有用であったかを示すものであろう。私の調べた所では、先生が前記の期間に発表された原著論文は前半7年に75、後半7年に2であった。概算すると、1篇あたり5回/年の割で引用されればだいたい上記の数字となる。1964年以前の論文についても今日までの引用についての調査が行われたとしたら、やはり先生は疑いなく“上位入賞”されるであろう。

先生の業績などについては最近の別誌の記事²⁻⁴⁾に譲って、ここでは二三の個人的回想のみ記すことを許して頂きたい。先生の化学統計力学の講義に私が学部学生としてはじめて出席したところ(1949)、先生は名大から東大に移られた直後であった。そのころ先生が真剣に考えておられた問題の中に、原子間距離の熱振動によるゆらぎ(平均振幅)があった。ちょうどアメリカのKarle夫妻がセクター気体電子回折法を使い始めたときで、彼らはCO₂分子のO—O平均振幅を0.040 Åと実測した。この値は理論値とされていた0.029 Åと大幅に異なったので彼らは困り、実験の信頼度にも疑いが持たれた。ところが、この理論値の基礎とされたDebyeの計算式には誤りがあった。先生はすぐにこの誤りを指摘し、正しい計算値0.041 Åが彼らの実測値とよく一致することを示された⁵⁾。この短いレターは、気体電子回折法のその後の発展に測り知れない影響を与えたと思う。それから10年ばかりのうちに、これに続く先生の計算は原子間距離の振動平均の理論へと発展し、有名なshrinkage効果(1960)として実を結ぶことになった⁶⁾。

1959年ごろ、先生と Bartell 教授（当時 Iowa 州立大）との間に面白い論争がかわされた。CO₂ 分子の変角振動座標をどのようにとるべきかという問題である（図1）。先生は基準振動理論の常法に従って直交座標系をとられたので、原子の動きを表す座標は平衡結合軸から垂直方向にまっすぐであった。Bartell は、それではC—O結合が変角振動によって不当に伸びてしまうから、曲線座標系を使うべきだと主張した。今日の常識では、両者の差は3次の非調和項で考慮されている。この論争は先生が非調和ポテンシャル関数に真剣に取り組まれる端緒の一つとなったのではなかろうか。当時、森野研究室では広田さん、岡さんらを中心とするマイクロ波分光グループが、振動励起状態にある分子の回転スペクトルの測定を活発に始めていた。先生はそれらの結果を踏まえて、多原子分子の振動の非調和性についての先駆的な研究を完成された⁷⁾

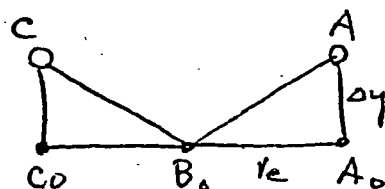


Fig. 1.

On the other hand, in the case of

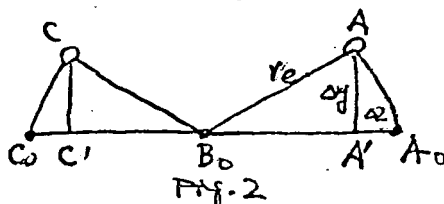


Fig. 2

But for a circular locus, we have

$$\overline{B_0A_0}^2 = \overline{B_0A'}^2 + \overline{A'A_0}^2,$$

thus $\Delta z = r_e - \sqrt{r_e^2}$

Therefore

図1 CO₂ 分子の変角振動座標の表しかた
(森野先生の自筆書簡の一部)。

ある岡崎コンフェレンスで、先生は“How to Catch a Big Fish”という面白い講演をされた⁸⁾。その中には先生の研究に対する執念と哲学が溢れている。たとえば“只管打坐”という禅の言葉が出てくる。かって先生は正法眼蔵随聞記を示されて、“僕の研究のやり方はここにある”という意味のことを言われたことがあった。先生の研究指導のあり方について、そのときまで私は“以心伝心”で何物かを感じとっていたつもりであったが、先生のその一言で、さらに何かをはっきりとつかめたように思われた⁹⁾

先生が分子研の創設とその後の育成に向けて注がれた情熱と費された努力はいかばかりだったであろう。それについて私には何も語る資格はない。ただ先生が分子研創設を祝して贈られた上田敏の訳詞“俊傑”¹⁰⁾にそれを窺い知るのみである。先生が今後もお元気で、私どもの先頭に立てられて分子科学の研究に専心され御活躍下さるよう切にお祈り申し上げます。

- 1) 朝日新聞, 1981年12月21日夕刊。
- 2) 広田栄治, 化学と工業, **35**, 59 (1982)。
- 3) 朽津耕三, 現代化学, No 129, 50 (1981)。
- 4) 朽津耕三, 東大理学部広報, **13**(3), 2 (1981)。
- 5) Y. Morino, J. Chem. Phys., **18**, 394 (1950)。

- 6) Y. Morino, "Fifty Years in Tokyo, Nagoya, and Tokyo", in "Fifty Years of Electron Diffraction", P. Goodman, ed., Reidel, Dordrecht (1981), p.136.
- 7) Y. Morino, Pure Appl. Chem., 18, 323 (1969).
- 8) 森野米三, 分子研レターズ, 5, 28 (1978).
- 9) K. Kuchitsu, After-dinner talk, 8th Austin Symposium, University of Texas, 1980.
- 10) 森野米三, 分子研レターズ, 1, 11 (1976).

藤 山 常 毅 君 へ

お茶の水大理 細 矢 治 夫

藤山君, 君も憶えていると思います。20年前, 稚内から礼文島へ向かう小さな船の甲板の上でした。荒れ狂う波に木の葉のようにもまれて, 同行した友人達は次から次へと船に酔って船室へ逃げて行き, 僕達2人だけが甲板に残りました。札幌の討論会の終わった後でした。しかし何を話したか僕は憶えていません。恐らく2人は何もしゃべらずに, ただ真黒い海面と灰色の空を眺めていたのでしょう。学年が2つ違っても2人の間に奇妙な連帯感が生まれたのはこの時だったと思います。

14年前, 君と, 僕の家族は, ウィスコンシン州のマジソンを北上してミシガン湖を2日かけて車で一周しました。その時, 君はミネアポリスで暴走を繰り返し, 免許停止処分を食っていたので, 僕の助手席に座ってナビゲーターをつとめてくれました。アメリカの秋の紅葉の素晴らしさを僕達は満喫しました。大きなおいしい鮭を食べました。その時のことを, 君は繰り返し繰り返しなつかしがっていました。オハイオ州のコロンバスで, 夜ビールを飲みながら草競馬を楽しんだことも, 君は憶えていると思います。君は, ミシガンで僕が兎と格闘しているところにも訪ねて来てくれました。ボストンの飛行場でばったり出会ったこともありました。その時は島内先生も一緒でした。大きななすのしぎ焼きを食べたことを覚えています。あの頃は楽しかった。君はアメリカの生活にすっかり同化しているように見えました。

10年前, 君は都立大に移りかけていました。その頃学習院にいた村田君と3人, 液体という, はじめて共通の目標をもっていることがわかりました。毎週のように3人で, 食べたり飲んだりして話し合いました。それから今日まで, 君は液体グループの先頭に立って突っ走りました。全力を出し切って突っ走り, そして倒れたのです。

思えばその頃, 「藤山さんを結婚させる会」というのがお茶大の学生と卒業生の中にできていました。彼女達は, 君に力を貸そうとしたのかも知れませんが。しかし結果は逆でした。君は, 彼

女等の人生相談のよき相手役をつとめることになったのです。君が誰からも好かれたとは思いません。しかし、常に弱き者の味方でした。

その頃、君と僕は分子科学研究所の設立のための小委員会の委員に選ばれました。若手の意見を代表する役目をもたされた僕達は、大先生の間にはさまれてつらかった。しかし君と2人だったから、続いたのだと思います。たがいに慰めあい励ましあったものでした。だから、君の分子研での着々たる成果は、その頃のことを思い、僕には感無量のものがあります。しかし運命の神は気まぐれです。君の病いは着実に進行していました。誰もそれを止めることができませんでした。

今月の初めに僕はミネアポリスに行きました。君に頼まれたCrawfordに会う機会を探していました。ところが偶然に、大学のユニオンのエスカレーターで僕は彼とすれ違いました。僕達は君のことを話題に楽しい一時間を過ごしました。Crawfordは、君の写真と論文リストを見て自分の子供のここのように喜こんでくれました。けれども僕は言えませんでした。君の身体がかなり悪いということを。君に言われた通り、元気にやりますよとしか言えませんでした。

ミネアポリスで僕は君に意地悪なおみやげを買ってしまいました。とても意地悪なおみやげです。ミネアポリスの有名なレストランのメニューを集めて印刷した本です。君は言っていました。「自分はもともと食べ物に欲がなかったから、厳しい食事制限もそれほどこたえないよ。」と。しかしそれにしてもこれは意地の悪いおみやげでした。だけれど、それも見ずに君は逝ってしまいました。

僕の帰国を追うようにCrawfordから手紙が来ました。非常に楽しかったと書いてありました。その時僕は直感しました。君も彼からの手紙を受けとっていることを。しかし、君は逝ってしまいました。一日遅かったのです。分子研の君の机の上にCrawfordからの手紙が載っていました。封は切られていませんでした。僕はCrawfordに何と手紙を書いたらよいのでしょうか。しかし、僕は確信しています。君は、Crawfordから手紙が来ることも、そこに何が書かれているかも、全部わかっていたはずです。

僕は君が死んでしまったことを悲しまないようにします。あたふたと騒いでいる僕達を見て、君は笑っていると思います。これからは、君に笑われないように頑張ってやっていくつもりです。どうか僕等を見守って、安らかに眠って下さい。

後記。これは11月21日に岡崎の竜海院で行われた藤山常毅君の葬儀の際に、私の読んだ弔詞をもとにして書いたものです。文中にあるCrawfordから藤山君宛ての手紙は、当日諸熊奎治氏が代読して参列者に披露されました。葬儀の一部始終を朽津耕三氏と下沢隆氏がCrawfordに手紙で書き送ってくれました。次に収録してある英文の手紙は、それに対する朽津氏宛てのものです。な

お、ミネソタ大学のユニオンでの Crawford との出会いのかぎは、私と同行された下沢氏が全部握っていたのです。此の度びのことでいろいろと私や故人のことを助けて戴いた方々にお礼を述べたいと思います。

December 4, 1981

Dr. Kozo Kuchitsu
Department of Chemistry
Faculty of Science
The University of Tokyo
Bunkyo-ku
Tokyo 113
Japan

Dear Kozo:

Thank you very much for writing me about the death of Tsunetake Fujiyama. I was of course very much shocked, as indeed all of his friends must have been. I had no idea myself that he had suffered from the sort of kidney trouble you describe. I certainly thought of him as a very healthy and energetic and driving young man, as he certainly was in his Minnesota days — quite a demon he was at tennis especially! — and as he always had appeared whenever I have seen him since.

So I was indeed shocked. And moreover the fact that I had just had so pleasant a message from him through Haruo Hosoya's courtesy made your sad news particularly stunning. There's a poignancy to the fact that I had just had this nice word from Fuji, and the fact that my note to him just missed.

I think we must remember that, with his intense quality which applied to his work as well as to his athletics, Fuji lived a very full life all the time. We have a phrase for such intense activity: burning one's candle at both ends. Perhaps you have a similar phrase in Japanese. One of our poets, Edna St. Vincent Millay wrote these lines:

I am burning my candle at both ends;
it will not last the night.
But oh! my foes and ah! my friends,
it gives a lovely light.

I think we must remember that, with his intensity, Fuji made quite a number of strong contributions to science, particularly in connection with the development of our understanding of liquids; we know more than we would have without his contributions. And in addition, in his group at Tokyo and I'm sure more recently at Okazaki, he helped to develop other young scientists who will carry science forward and make their own contributions. I think that people like you and me who are in this activity know how very rich and satisfying and important it can be; Fuji also made his contributions, which will carry forward.

Nevertheless, I feel as you do, that Fuji was one of the best junior colleagues I have known, both in science and in life. I share with you the feeling that I have lost him. Please convey to his family my respect and sympathy and tell them that in Minneapolis as in Tokyo and Takahagi Fuji was loved and will be remembered always.

My very best wishes to you and to my friends at Todai.

Sincerely yours,

Bryce Crawford, Jr.
Professor of Chemistry

A Place in the Sun

マニトバ大 Bryan R. Henry

Scientifically this has been a most rewarding three months, Freed of any administrative duties, I've had the opportunity to reconsider and discuss science in an extremely stimulating environment. I cannot recall a period in my career when so many new research options have come to light. Credit for this must, in no small measure, go to Bunshi Ken staff who seemed always ready to discuss hairbrained Canadian schemes.

What did I contribute scientifically to Bunshi Ken? In my view, I received much than I gave. A modest research project was initiated in cooperation with Professor Hanazaki and Dr. Nakagaki. Although we have made some progress, the project is not completed. Hopefully it will serve as a catalyst to continued collaboration. I have given three review lectures on the theory of radiationless transitions, a survey seminar on our local mode research, and a seminar describing the more theoretical aspects of a local mode description. The latter was presented at a seminar supported by Bunshi Ken's joint studies program. I have also had the chance to read several manuscripts and to make suggestions for revisions, primarily concerning English. Often my colleagues were overly apologetic about asking for this kind of help. There was certainly little reason for such an attitude. I was more than happy if I was able to offer any assistance. Moreover, reading these papers helped me to learn a little about the scope of research at Bunshi ken.

I must comment on the Symposium on Highly Vibrationally Excited States organized by Professor Hanazaki. The Symposium was a marked success, but for me it was, in some ways, a humbling experience. As the only non-Japanese participant, I realized the effort involved by my Japanese colleagues in presenting papers and carrying out all discussion in English. I attempted to express my gratitude in the Conference concluding remarks, albeit inadequately, with my pre-kindergarten level Japanese:

Anatagata wa Eigo mo hanasemasu.

Watashi wa Nihongo o hanashimasen.

Watashi wa ototteimasu.

In many ways, the most rewarding part of my visit has involved learning about Japanese history, culture, and society. Seminars at Universities in Osaka, Kyoto, Tokyo, and Sapporo were accompanied by sightseeing in which many people showed great kindness to myself and my family. We've seen many lovely shrines, temples, and gardens, and learned a little bit about Japanese attitudes and ways of life. There is no space here to describe in detail our travels

through this beautiful country. However, one purely sightseeing trip to Hiroshima and Miyajima made a deep impression, and I would recommend such a visit to all Bunshi Ken "gaijin". The tranquil mountain trails of Miyajima offer an ideal settings to contemplate the horror of the atomic catastrophe, as revealed in graphic human terms by the Peace Park Museum in Hiroshima. It is difficult to come away from such a place without a determined degree of pacifism.

Life in Oakazaki was extremely pleasant, due largely to the unselfish assistance offered to my family and I by Bunshi Ken staff and their wives. Together, they succeeded in giving my family a feeling of involvement and participation in the community. Arrangements were made for my son to attend school, and for my daughter to learn a Japanese dance and to meet members of the Japanese Girl Scout movement. My wife was also involved in Girl Scouts and in countless activities arranged by a seemingly inexhaustible group of Japanese ladies. These are but a few of the highlights that served to quickly cause us to identify Okazaki as our home away from home.

All visitors to Bunshi Ken are impressed by the level of equipment. The number and quality of the instruments combine to give a capability that's greater than any laboratory I have previously visited. The staff comprise a group of highly motivated and very hard working scientists. There is excitement about science here. Not surprisingly, the combination of all these factors produces research of a very high quality. One aspect of the operation of this Institute that I found most impressive was the nature of the contact and collaboration with Universities. For example, the solar energy group acts as a focal point to produce collaboration, not only between the Institute and the Universities, but among the Universities themselves.

However, in my view, there are one or two areas in which the Institute could improve. The staffing levels here are undoubtedly too low. One could envision a number of different ways of overcoming this difficulty. My choice would be to introduce significantly larger numbers of post doctoral fellows. These should be short term (three years at most) appointments that maintain an ever renewable supply of fresh young minds. If every Professor and every Associate Professor was guaranteed at least one or two such positions, the evident shortage of hands would be alleviated and a permanent spirit of scientific vitality would be ensured.

Staff shortages also deserve attention at the secretarial level. Judging from this department, the workload assumed by these positions is very large. As a result, science is directly and deleteriously affected. I have seen Professors, Associate Professors, and Research Associates spending long hours xeroxing, and typing their own manuscripts. These activities are a flagrant waste of time for such highly trained people, whose time could, and should, be spent much more profitably.

My second area of advice is less concrete, and deals not with a perceived current deficiency, but with the future development of this relatively young Institution. University research is

often (and in Japan, almost exclusively) tied to graduate education. As such it is limited in the degree to which it can be speculative and explore totally new ground. Such projects must yield publishable results since a young person's life and career are often intimately connected with the success of a graduate research project. This Institution should never face such restrictions. However, such a freedom carries with it the responsibility to concentrate a significant part of Institute efforts on truly original forefront research. It is not sufficient for scientists here only to do experiments better than they are done in other places. In several instances, they must be the first in the world to carry out a given type of experiment.

Much has been written and discussed about originality in Japanese science. I have neither the space nor the expertise to reproduce the many arguments here. I would, however, note two factors. The Japanese educational system places a heavy emphasis on examinations. Such a system can encourage students to learn to do well on examinations without teaching them to think independently. Secondly, deeply ingrained in Japanese society is a respect for hierarchical authority. Many of the most creative and innovative advances in science are made by those with the courage to stand up against such authority. Recognizing these two restraints, both of which are almost entirely outside of the Institute's control, the Senate and the Administration should adopt policies that encourage, and indeed require, such originality in Institute research programs. I have every confidence in your ability to achieve this goal. It's success will ensure that this Institution will meet its potential to be one of a select group of world leaders in the advancement of chemical physics.

In conclusion, I would like to express my sincere gratitude to all of the Bunshi Ken staff for their kindness and help. I greatly value the new friends I have made here. As always, it is difficult to single out individuals. However, Professor Hanazaki and his wife have unselfishly catered to our every need and we certainly do owe them our special thanks.

Four Months in Bunshi Ken

シカゴロヨラ大

David S. Crumrine

We were rather apprehensive before we came to Japan. We had never been out of the U. S. and my wife and I had only taken one semester of a beginning Japanese Class. Although others had told us how lovely Okazaki and IMS were, we were uncertain how the presence of two children might change our experience. Our fears were groundless.

The IMS setting is lovely. The panorama from Yamate Lodge was spacious and gave no sense of conjection. We enjoyed both the usual Sunday morning baseball games held on the field below the lodge and the distant mountains. We also enjoyed walking and biking about the city among the parks, the shops, the shrines, and the rice fields. We enjoyed the opportunity of

experiencing an approximation to the Japanese lifestyle in a smaller town.

It was a tremendous opportunity to work and talk in such a stimulating atmosphere. The range of scientific interests at IMS suited me particularly well, and I was very interested in work being conducted by a number of the staff members. The excellent symposia and seminars were conducted in English, and most of the research seminars in our group were also conducted in English, for my benefit. IMS is blessed with both new facilities and new equipment. The outstanding research being done here is making Okazaki famous throughout the world. The laboratories are among the best equipped that I have seen. The offices were also well stocked for visitors. Electric typewriters, slide making facilities, and secretarial support were also available. The only criticism that I could make concerns the library. As a new Institution, the library is still growing, and some references such as the Journal of Organometallic Chemistry and a few others are not yet available. This will be rectified with time.

I was surprised that the staff was as small as it was. In several groups there is equipment not being efficiently used because of lack of personnel. To some extent this is necessary, if one wants to have the equipment available for outsiders. But in many cases, the amount of money spent on equipment could easily justify a few more assistants.

I was impressed with the dedication and hard work that everyone exhibited. This was not nearly so evident in the laboratories that I visited in other countries. This went beyond the 5.5 days per week that everyone worked (For some reason, it was not widely known that Japanese work and go to school 5.5 days per week. Our son was quite surprised.).

We should thank Mishima Shogakko for accepting our 9 year old son. They were extremely gracious about accepting an illiterate foreign child, and his teacher Mr. Suzuki had a great deal of extra work because of his kindness. Our son, on the other hand, had an amazing experience!

For nearly four months he discovered how much could be conveyed with a minimum of language. He made friends with the students, learned about their games, their discipline, and their daily life. Academically, he worked with them in art, athletics, science, and math. He took a grammar book along to use with them. I can only hope that they got some small benefit from having a foreigner in their classroom.

My wife feared that she would have nothing to do and that the language barrier would cause her a lot of trouble. With the help of Masako Shobatake, however, she found herself fully occupied meeting new friends, practicing English conversation, taking our 4 year old to nursery school and swimming classes, shopping, and many other activities.

I would strongly recommend the IMS to any research worker. This experience has certainly changed my outlook on my own country as well as my own job. I was revitalized and ready to plunge back into the rounds of teaching and writing. I have made many new friends and professional contacts and hope that I can repay their generosity and interest in the years to come. I would particularly like to thank Professor Iwamura for inviting me to IMS and his research group for helping me so greatly.

研究室紹介

分子基礎理論第一部門(I)

分子研 諸 熊 奎 治

理論研究系が設置されたのは、分子研創設の2年目、1976年である。同年12月塚田助教授と私がほぼ時を同じくして着任したが、私の方はロチェスター大学での授業のため行ったり来たりで、落ち着いたのは翌年夏である。この間、加藤重樹氏が助手として、また大峰巖・北浦和夫両氏がリサーチフェローとしてグループに参加してくれ、早々にして強力無比なチームが編成できたのは、まことに幸運であった。

私たちグループの研究の中心テーマとして、化学反応を中央に、分子の励起状態および遷移金属化合物の3つの柱をたてることにした。分子の電子状態の理論的計算は、分子の静的な性質や基底状態については、70年代前半に相当の成果が上るようになっていたが、上の3つの分野は重要な問題でありながら、本格的研究はまだまだという状況であった。この3つの柱は、活動開始以来5年たった今も、基本的には変わっていない。

この研究には、大量の計算機時間が必要であるが、電子計算機センターの大型計算機に支えられて、思う存分やらせて頂いていることに先ず感謝したい。後の塚田助教授の文章にもあるように、発足当時はずい分苦労した。1979年1月導入を目標として提出してあった計算機借料の概算要求が通らないかも知れないという情報が入った時、研究所をやめる決心をしたことを思い出す。所長、管理局のその後の尽力で無事予定通りの導入が出来た感激を忘れない。

さて、化学反応の理論的研究の第一歩は、ポテンシャルエネルギー面を求めることであるが、1970年代のはじめに導入されたエネルギー勾配法が画期的な変化をもたらしつつある。従来の *ab initio* 分子軌道法では、与えた核配置 R に対するエネルギー $E(R)$ を計算し、この $E(R)$ をつないでポテンシャル面を画かせるが、多原子系では自由度が多いので、 $E(R)$ の全貌を知ることにはなかなか困難である。勾配法は、 E と同時にその核座標に関する変化 $\text{grad}E$ も求める方法で、原子数10をこえる系でも、平衡状態や遷移状態の核配置を従来とは比較にならないほど効率よく決定することが出来る。私たちは、独自に開発したり譲り受けたりしたプログラムをもとに、方法論の改良と拡張およびその応用を行っている。

方法論では、加藤氏が世界に先がけて、エネルギー勾配が多配置SCF法にも使えるよう拡張した。勾配法関係の一連のプログラムはIMSPACKという大きなシステムにまとめられて電子計

算機センターに登録されており、所内外の多くの研究者に利用されている。現在は、リサーチフェローの長村吉洋氏が、開殻系のCI波動関数に対するエネルギー勾配のプログラムを開発中である。

化学反応へ勾配法を応用し、多原子系の素反応における反応エネルギーの再配分を加藤氏が一連の論文で論じている。素反応の逆活性化エネルギー（遷移状態から生成物までに放出されるポテンシャルエネルギー）が反応生成物の相対併進モードに行くのか、どの振動モードに入るのかは、最近のstate-to-state反応速度の測定で明らかにされつつあり、反応の動力学を知る上で重要な知見である。しかし、多原子系について、この再配分の仕方を理論的に求めることはほとんど不可能であった。

加藤氏は、遷移状態から生成系までをスムーズに結ぶ反応座標を求め、その曲率と反応座標付近のポテンシャル面の特性から、定性的にエネルギー再配分を予言する方法を提唱し、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{F} \longrightarrow \text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{HF}$, $\text{CH}_2=\text{CHF} \longrightarrow \text{CH}\equiv\text{CH} + \text{HF}$ などに応用して成功をおさめた。現在も、ポテンシャル面の特性から原子分子衝突の際のエネルギー移動のモード選択性を論じる研究などが進行中である。

ポリエンの光異性化機構について、*ab initio* および半経験的分子軌道法、多次元 **Franck-Condon** 要素、古典論的トラジェクトリなどを駆使して広汎な研究を進めたのは大峰氏（現慶応大理工）である。まず、ブタジエンからオクタテトラエンまでのポリエンについて、基底状態におけるCC二重結合まわりの回転の遷移状態と、励起三重項状態の最低エネルギー構造との間で核配置が類似していること、両状態間の **Franck-Condon** 重なり積分の大きさなどから、三重項状態から基底状態への無輻射遷移後のエネルギーの行き先は、主に当該CC二重結合だが、一部はHの **flapping** と他のCC二重結合にも現れうることを見出した。また、三重項状態において、ブタジエンの二重結合が同時に回転する経路はポテンシャルエネルギーが高く不可能だが、実際の古典トラジェクトリ計算によると、一つのCC二重結合の回転にひきつづいて直ちにもう一つのCC二重結合が回転して **trans trans** 体から **cis cis** 体に変る、いわゆる“動的二重回転”が起りうることが示された。一重項励起状態を経たポリエンの異性化機構についての研究は近くまとめられる。

エネルギー勾配法により、種々の有機反応の遷移状態を決める研究は、永瀬茂技官（現横浜国大教育・助教授）、花村光泰大学院生（東北大理）らを中心に、**Ray, Lohr, Borden** 教授ら外国人研究者も加えて進められた。エチレン + H $\longrightarrow$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\cdot$ の遷移状態、遷移状態理論による速度定数、同位元素効果、ハイドロボレーションのモデルとしての $\text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{BH}_3 \longrightarrow \text{CH}_3\text{CH}_2\text{BH}_2$ が四中心遷移状態を持つこと、 $\text{X}_2\text{Si}=\text{CH}_2$ の H_2O 付加反応および二量化反応の障壁の低いことなどが見出された。また、気相反応と溶液反応のちがいを調べるため、水和クラスターの $\text{S}_\text{N}2$ 反

応 $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n + \text{CH}_3\text{Cl} \longrightarrow \text{ClCH}_3 + \text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n = 0, 1, 2$) のポテンシャル面の特性をしらべる研究, アジリン- $\text{CH}_3\text{CN}-\text{CH}_3\text{NC}$ 間の異体化反応の経路の研究など進行中である。

遷移金属錯体の電子状態の *ab initio* 分子軌道法の研究も北浦氏（現阪市大理）が中心となり発足当初から着手したが、d 電子のため SCF 法が収斂しにくく、当時はノウハウも持ち合わせていなかったで、国内留学で来ていた中川節子氏（北里大薬）などと一緒に大変苦勞した。計算機もまだない頃で、北浦氏と「もう一年がんばってみて、だめならこの分野から撤退しよう。」と話し合ったのを忘れない。北浦君の文字通り夜も寝ない努力のおかげと、小原茂枝官の参加とで、見通しが立ったのは二年ほど前からである。

原子番号の大きい原子では電子数が多く、全電子を計算に取り入れると大変な手間になる。化学現象の多くを支配するのは主に価電子だから、*ab initio* 法の範囲内で価電子のみをあらわに考慮し、内殻電子は価電子への場と考える“有効内殻ポテンシャル近似”が遷移金属の計算に急速に普及しはじめている。北浦・小原両君は、この近似の下でエネルギー勾配法が使えるよう、いちはやく拡張し、これを使って、 $\text{H}_2 + \text{Pt}(\text{PH}_3)_2 \longrightarrow \text{Pt}(\text{H})_2(\text{PH}_3)_2$ という酸化的付加反応の始原系、生成系および遷移状態の構造を決めた。遷移金属を含む化学反応の遷移状態を決めたのは、世界ではじめてである。この系についての詳細な研究、遷移金属アルキルの安定性と反応性の一つのモデルとして、 $\text{Pd}(\text{H})(\text{C}_2\text{H}_5)(\text{PH}_3)_2$ の熱分解の全中間体の構造とエネルギーの計算、気相中の遷移金属イオンの反応として注目をあびている Co^+ と H_2 , CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 との反応の中間体の決定などの研究が今まとめられつつある。遷移金属化合物の化学反応は、内容が豊富であり、また触媒反応機構とも関連して興味深い。今後の発展が期待される。

遷移金属錯体の安定性の比較については、熊本大工・榊茂好講師と北浦氏との共同研究に成果が上っている。 $\text{Ni}(\text{PH}_3)_2$ と C_2H_4 , C_2H_2 , H_2CO , CO_2 , CO との錯体の構造や安定性の比較検討によって、これらの有機配位子と金属の相互作用の起源が明らかになりつつある。 $\text{PtCl}_2(\text{NH}_3)_2$ の構造とトランス効果、 $\text{Pt}-\text{CH}_3$ 結合への CO 挿入反応経路などの研究が進行中である。

研究グループの独自の研究の他に、所内・外の研究者との共同研究も活動の大きな部分を占めている。私たちは、創設当時から“役に立つ量子化学”を一つのスローガンに、実験グループがほしい情報を理論的に提供したいと考えていたが、おかげで沢山のグループと知り合いになり、勉強させていただいた。たとえば、東北大科研補助教が実験をされた反応： $\text{C}^+ + \text{H}_2 \longrightarrow \text{CH}^+ + \text{H}$ に関して、基底及び励起状態のポテンシャル面の大規模な計算を行い、反応機構を提唱したが、これは楠氏、加藤氏および酒井章吾氏（関西大研究生）の3年以上にわたる共同作業の汗の結晶である。また、東大薬坪井研究室の菅原洋子、西村善文、平川暁子、浜田嘉昭氏らとは、フォルムアミドや核酸塩基など比較的大きな分子の基準振動と吸収強度をエネルギー勾配法で求める研究を共同で行ったが、計算結果に基づいて過去の実験が再評価され、同定が変更されるのを

見る時、身のひきしまる思いがした。

この他、1978年12月から来所したH. F. King教授を皮切りに、すでに9名の外国人研究者が私たちの研究グループに滞在した。これらの人々が持ち込んでくれる新鮮な空気が所内外の若い人々の糧になっていると信じている。

私たちのグループも発足して5年たった。研究スタッフもすでに3人が大学の研究室に育って行き、それぞれ第一線で活躍している。今後の研究の方向について、個々のテーマは当然変わって行くだろうが、3本の柱はこのままで続けたいと思っている。特に、励起状態の反応、溶液中の反応、遷移金属錯体の反応の研究を積極的に進めて行きたい。

分子基礎理論第二部門も発足し、中村宏樹教授、高塚和夫助手が着任され、化学動力学についての研究が開始されている。力を合わせて、化学反応の理論的研究のフロンティアに挑戦したい。

分子基礎理論第一部門 II

分子研 塚 田 捷

創設もない分子研に私が赴任したのは、昭和51年12月だから、今から丁度5年前の事になる。その頃私は、国内の物性理論研究者は見通しは良いが、実用上の重要性和無関係な問題ばかりに関心を向けている事に、ものたりなさを感じていた。そして、理論としては泥くさいかも知れないが、現実的には重要な問題と正面からぶつかってみたいと思っていた。そうした訳で分子研では、固体表面やそこでの反応過程の基礎理論を手がけてみたいと考えていたのである。

当時、固体表面の基礎のしっかりした理論は殆んどなく、先駆的な試みが少しづつ海外の雑誌でみられる様になった段階だった。従って分子研では、まづこの分野の基礎研究をどう進めるか模索するところから始めなければならなかった。そうした中で、分子研の狭義の共同研究「固体表面における吸着の理論」(昭和52年度)を採択して頂き、表面の理論研究に関心の深い方々との交流と討論の機会を十分に持つ事ができたのは、研究の方向づけを行う上でかけがえのない事であった。昭和52年5月に里子允敏助手が研究グループに加わった。物理的な問題に対してすぐれた把握力を持つうえ、化学的な問題に対しても興味があり、ねばり強い同助手の参加は、誠に心強いものがあった。

いろいろの試行錯誤の後、当時私たちは非経験的な表面系電子構造の数値計算を実行し、それを手がかりにして表面の基礎的問題にせまりたいと思うようになっていた。そのためには信頼性

が高く、固体表面の様な大規模な系でも実行可能な計算法がどうしても必要になる。その頃、阪大工学部の足立裕彦氏がDv-X α クラスタ法による試みを始めていたのであるが、私たちはこの方法が多く の点から表面系の計算に最も適していると判断した。そこで足立氏の全面的な協力を得て、大規模な表面系の計算に適したプログラムの開発と拡充を行う事を計画した。最初の目標は金属酸化物表面の電子構造においたのであるが、その理由と研究内容については後にふれる事にしよう。

ところでこの様に研究計画がかたまってきて大型電子計算機を使う必要にせまられたにもかかわらず、分子研にはまだ計算機センターがなく、私達はきわめて不便をしのばなければならなかったのである。諸熊先生は早期に大型電子計算機センターを導入するため、ほんそうされていたが、その実現は楽観的にみても、2年程先という事であった。従ってそれまでの間、理論部門の研究をどの様にして離陸させ軌道にのせるかが、緊急の問題であった。幸いにして予算的には恵まれていたので、まづミニコンピューターによる京都大学大型計算機センターの端局を設置する様に準備をすすめた。いろいろの手続きでとまどったが、ともかくも52年10月からミニコン(U100)が動いて、京大センターと接続できた時は大層うれしかった。それまではTSS端末一台で、高額な電話料を支払いながら京大センターを使っていたのだから。このTSS端末の時代は、理論系の全員が京大センターに頻ぱんに通っていた。研究の効率は悪かったが、今から想うと楽しい思い出の多い時だった。

しかし、54年1月にその稼動が始って以来の分子研大型計算機センターの充実は、目をみはるものがあった。今では無人の終夜運転も行い、分子科学計算に特有な大型ジョブが最も効率良く処理できる様、理想的なシステムになっているといえよう。諸熊センター長、柏木助教授はじめ関係各位のご努力に感謝したい。この大型計算機センターの利用によって、我々グループの研究も著しく促進される事になった。具体的な内容に立入りながら、その経過を後づけてみよう。

酸化物表面の電子構造

これは分子研における研究活動の初めから、一貫して推進してきたテーマである。酸化物の種類と、それぞれが示す表面の化学的性質は実に多様性に富んでいる。また実用触媒の機構を探るためにも酸化物表面系は最も重要である。私達は実験的に良く研究されており、電子構造が簡単と思われるMgOから始めたが、単体金属表面ではみられない酸化物表面の興味ある性質にたちまち魅了されてしまった。その後、TiO₂やSrTiO₃表面の研究を行ったのは基礎電子部門の坂田グループの光電極反応に関する実験研究に刺激を受けたからである。以後、それぞれ違ったタイプの酸化物を代表すると思われる鉄族酸化物MeO(Me=Ti, V, Mn, Fe, Co, Ni), ReO₃, ZnOと研究を進める事になったが、それによって酸化物表面の電子構造の特性を、系統づけて明らかにできた様に思う。主な結論を要約すれば次の様になるだろう。

理想中性表面の電子構造は一般に、①表面におけるマールデング・ポテンシャルの減少、②配位の欠けたイオン配置における強い実効電場の存在と、それによる大きい軌道の歪み、③表面イオン間の共有結合性の増大とイオン電荷の減少の三つの要素が複雑に影響しあって決定される。単純金属酸化物の表面では②の効果が著しいため、真空側につき出た軌道を持つ表面準位ができる。一方遷移金属酸化物の d バンドでは、③の効果は著しいが②の効果は大きくなく、対称性の低下による d 状態の分裂は、交換分裂より小さい。表面に酸素空格子点があると、近接イオン迄広がった欠陥準位が生じ、電子を二個収容する事によって電気的中性条件を回復する。このような欠陥に伴う局在状態は、エッジやコーナーにおける局在状態と同様に、真空側につき出た軌道の形や、禁制帯内の深部にあるエネルギー位置などからみて、外部から接近するイオンや分子と最も強い相互作用をし、活性中心の原因になる。極性表面では表面準位とフェルミ準位の交叉、及び陰・陽イオン軌道の著しい混成によって、その表面電荷は減少し結晶の安定性を保つのに必要な補償電荷が誘起される。表面カチオンは従って単体金属的性質を示す。

半導体表面の原子構造と電子構造

共有結合半導体の様に、結合に方向性の強い結晶表面では、内部とは全く違う構造、“再構成構造”をした結晶面が出現するのが普通である。その電子論的な起源を探る事は表面物性の基礎を明らかにする上で重要であり、私達グループの大きい研究課題としてとりあげる事にした。その推進は55年4月より特定領域奨励研究員として参加した星野敏春氏の精力的な研究活動に多くを負っている。

私達は多くの実験研究にもかかわらず、未だにその原子構造が論争の焦点になっているSi(111) 7×7 面について研究を進めてきた。10数個程度のSi原子を含むクラスターの電子状態、特にそれと表面における原子配列との相関関係を詳しく検討する事によって、表面Siの空格子点を含む構造がUPSの実験結果を良く説明できる事を発見した。表面に7%程空格子を含むSi(111) 7×7 構造は、反射高速電子線回折(RHEED)によって東北大の井野氏が可能なモデルとして提唱していたものであるが、私達は電子状態の立場からこれを裏づける事ができた。最近では化学擬ポテンシャル法による表面エネルギーの直接的な計算によって、井野モデルが安定構造である事を確めている。

LCAO-X α 法による力場計算

原子構造を仮定した上で、表面の電子状態を求める事は、今日では計算時間がかかるのはさけがたいとしても、比較的に見通しよくできる様になっている。ところが、表面の原子構造を電子構造から第一原理的に決定する事は容易な事ではない。しかし表面における素反応過程の研究には、どうしてもポテンシャル面についての手がかりが必要であって、全エネルギーの決定という問題をさけて通るわけにはいかない。

里子氏は長期にわたってこの問題に集中して取り組んできたが、 $X\alpha$ 法で力場を求めるための効率の良いプログラムの開発に成功した。現在はAlやMgへの酸素吸着、遷移金属表面での分子の解離吸着などに適用して、新しい知見を次々に明らかにしつつある。

低次元化合物の物性理論

最近、超伝導や電池などいろいろの応用上の興味から、低次元化合物の電子物性が注目されている。我々のグループは表面と共にこうした低次元物質の研究にも興味を持ってきたが、56年4月に技官の島信幸氏が着任してからは、 $NbSe_3$ の物性理論に本格的に取り組む事になった。この物質は低温での複雑な相転移と、それと関係した特異な非線形伝導現象を示す事で重要である。島氏は相対論効果まで含めたLCAO- $X\alpha$ 法により、大局的なバンド構造と、5枚のフェルミ面の詳しい形を決定し、CDW相転移機構の解明に向けて重要な手がかりを得る事ができた。

我々のグループは発足以来5年になるが、その研究プロジェクトとしては、即にはぼ一段階を終えたものもあり、またまさにこれから始まろうとするものもある。そうした中で私が来年(57年)早々に東大理学部に移る事になったのは、誠に心苦しい限りである。しかし本来理論研究者にとっては、周囲の条件に束縛される事なく、自由で新鮮な思考を大切にする事も必要ではなからうか。グループの各人が今後、ますます独創的な価値ある研究をされる様、願ってやまない。

最後になったが、私達グループの活動を暖かく支援し、かつ我がまを許して下さい下さった諸熊先生、ならびに分子研の皆様方に心から感謝いたします。

化 学 試 料 室

分子研 高 谷 秀 正

化学試料室は分子研創設の年(昭和50年)の翌年に早くも設置された。その目的、役割などについては既に各所で述べられているのでここでは割愛させていただく。以下に現在の化学試料室ができあがるまでの経緯と現在の主な業務内容を簡単に記したのち、化学試料室でこれまでに得られた研究成果について記述する。

昭和51年11月に私が名古屋大学理学部から転任して来たとき、分子研のすべてのメンバーが旧愛知教育大学図書館を改造した建物内に雑居していた。翌52年1月に実験棟北半分の完成に伴い三階の2室を化学試料室として借用し化学実験室としての整備を行った。その年の6月頃までに化学試料棟の設計が終り、ようやく建設がはじまった。化学試料棟設計上の基本概念の作成は井口洋夫室長をはじめ千原秀昭教授(阪大理)、坂田忠良助教授(分子研)らの方々のご努力で、私

の就任前にすでに大部分なされていた。お陰でそれ以後の具体的な作業も比較的円滑に進んだように記憶している。52年8月に安田 新技官が京都大学工学部工業化学科の博士課程後期2年を中退して化学試料室に加わって下さった。53年4月に化学試料棟の完成と同時にわれわれも実験棟から化学試料棟へ移り、岩村 秀室長のもとに名実ともに化学試料室の発足となった。しかし実際にはその後が大変であった。実験室内の配管工事、実験台やドラフトの設置と併行して実験台上のアングルや真空ラインの設置など化学試料棟内の全実験室をいつでも使用可能の状態にもって行くための作業に多くの労力を費すこととなった。試薬ストックルームも化学試料棟完成と同時に開設された。試薬整理用カードの作成等にはこの年の7月から事務補佐員として加わって下さった佐藤明子氏の努力によるところが大である。54年3月に佐藤さんが図書館に転出、後任として6月に堺 恵子氏が加わった。54年9月にはそれまでカリフォルニア工科大学博士研究員であった宮下 晃氏が助手として赴任した。これで助教授1、助手1、技官1、事務補佐員1という現在の化学試料室の人員構成になったわけである。その後54年8月に安田技官が旭硝子株式会社に転出された。後任としてその年の10月にそれまで名古屋大学理学部化学科で大学院博士後期課程を満了し、大学院研究生であった山川 仁氏が就任し今日に至っている。

化学試料室運営に関する業務内容は多岐にわたっている。詳しい内容は昭和56年7月17日付教授会議資料中で述べられているのでここでは主な項目のみを略記する。

- (1) 物質の合成、単離精製、分析などの作業を行う。また、研究者がこれらの実験を行うための技術相談、作業協力を行う。
- (2) 化学試料室設置機器類の保守、管理を行う。必要に応じガスクロマトグラフ質量分析計や核磁気共鳴装置その他化学試料室設置機器類使用のための技術指導や講習を行う。
- (3) 試薬ストックルームの管理、運営。
- (4) 実験廃棄物の処理、管理に関与する。

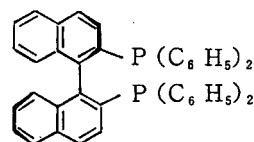
以上のような業務内容のうち、私達は(1)に最も重点が置かれるべきであると考えているが残念ながら目的達成には現在極端に職員数が不足している。化学試料室では今後(1)のような業務を遂行できる高度の技術レベルをもつ技官を早急に養成する必要に迫られている。

つぎに化学試料室においてこれまでに研究面で得られた成果を要約して記す。われわれは一貫して分子科学的に興味ある高い機能を有する新しい有機および有機金属化合物の分子設計ならびにその合成法の開発や、それらを用いる高選択的化学反应の実現を目指している。また遷移金属錯体触媒を用いる有機反応の不安定中間体を単離し、その化学的性質を明らかにして反応機構を解明すると同時に高選択性化学反应実現の要因を明らかにする努力をしている。これらの成果を新しい高機能性触媒の分子設計に役立てることは言うまでもない。

(1) 新しい高機能性遷移金属触媒の開発

われわれにとって有用な生理活性有機化合物の大部分が光学活性物質であり、炭素不斉中心をもっている。これらの分子を人工合成する場合、酵素反応と同様に一つのキラールな触媒分子から接触的にほとんど無限に近い光学活性体を生みだすことのできる不斉触媒反応を採用するのが最も効率が良い。近年、このような不斉接触反応の触媒として新しいキラールな遷移金属錯体の開発が盛んに行われているが、その際研究の成否は新しいキラール配位子の開発にかかっている。われわれは軸性キラリティをもち、しかもビス(トリアリール)ホスフィンである1(BINAPと略称している)を光学的純粋に得る新合成法を開発した。この新しいタイプの二座配位ホスフィンがRh(I)に配位した錯体を触媒に用いてアラニンやフェニルアラニンなどの α -アミノ酸誘導体を100%に近い光学収率で合成する手法を確立した。また、 ^{13}C 、 ^{31}P NMRを駆使して不斉収率に及ぼす各種の要因を解き明かした。¹

BINAPの絶対構造は関分子科学研究部門との共同研究により、単結晶X線構造解析によって明らかにされた。²以上の成果は昭和56年7月、スタンフォード大学で開催された日米シンポジウム「不斉の化学反応とプロセス」において報告された。最近、大塚教授(阪大

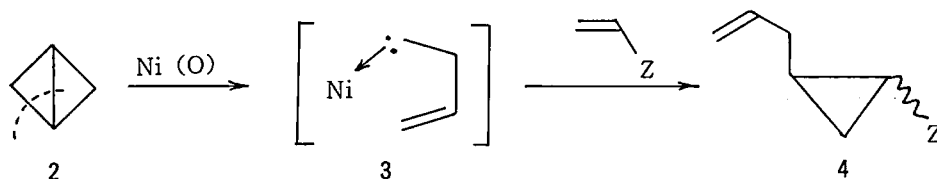


(R) - (+) - 1

基礎工)らは1が配位したロジウム錯体がアリルアミン類を不斉1,3-水素移動反応によって光学活性エナミンに変換する触媒として極めて優れていることを発見した。³この種の不斉反応を工業的規模でシトロネールなどの香料を合成するkey-stepとして応用することが最近可能になりつつある。

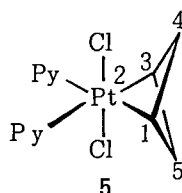
(2) 高歪み炭化水素と遷移金属錯体の相互作用の研究

高歪み環状炭化水素は近年、光エネルギー貯蔵物質として注目を集めている。ある種のオレフィンをまず光化学反応によって高歪み炭化水素に変換する。ついでこれを遷移金属錯体触媒に接触させて元のオレフィンに異性化させ、その際解消される歪みエネルギーを熱として取り出す。この種の接触反応は十数年前から知られていたにもかかわらず金属触媒の作用機構など、分子科学の面からの研究はほとんどなされていないのが現状である。たとえば、異性化が協奏的に起こるのか、あるいはいくつかの中間体を経由して段階的に進むかといった化学反応の最も基本的問題についても現在のところほとんどわかっていない。われわれは双環性炭化水素では最も基本的分子であるビシクロ[1.1.0]ブタン(2)と遷移金属との相互作用に注目した。2は各種の遷移金属錯体によって容易に1,3-ブタジエンに異性化する。われわれは先にNi(0)錯体触媒を用いると、2がオレフィン類に分子間付加反応をしてアリルシクロプロパン体4を与えることを見出し、反応中間体がアリルカルベン-ニッケル錯体3であることを明



らかにした。⁴ 最近、われわれは 2 と Pt(II) 錯体の反応を行い、この種高歪み炭化水素と遷移金属との錯体をはじめて単離することに成功した。⁵ 不活性ガス雰囲気での低温クロマトグラフィー技術を駆使して純粋な試料を得、錯体はこれまでに例のない双環性プラチナサイクル錯体 5 であることを明らかにした。

また、 ^{13}C , ^{31}P , ^{195}Pt NMR や同位元素標識の手法を用いて錯体 5 の溶液中でのユニークな構造変化や反応性を解明した。これらの結果は Pt(II) 錯体による 2 の異性化は、協奏的に進むのではなく、5

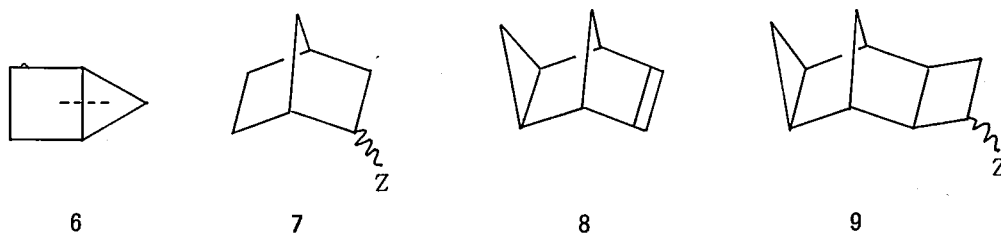


Py = Pyridine, γ -picoline, 4-*t*-butylpyridine

のようなメタラサイクル中間体を経て段階的に進行することを強く示唆している。

もう一つの代表的炭化水素であるビシクロ〔2.1.0〕ペンタン(6)も Ni(0) 錯体の作用によって中央の結合が選択的に切断され、オレフィンに環化付加し 7 を与える。熱反応に比べ反応の選択性が 1 ケタ向上することや、反応の立体化学が熱反応のそれとは逆転することなど、反応論的に興味あるいくつかの事実が明らかにされた。⁶ 現在、この種反応の中間体の単離に努力が払われている。

ビシクロ〔2.2.1〕ヘプテン誘導体 8 はノルボルナジエンの構造に類似しており、後者と同様に遷移金属との相互作用が注目される。Ni(0) 錯体が存在すると 8 は電子欠損性オレフィ

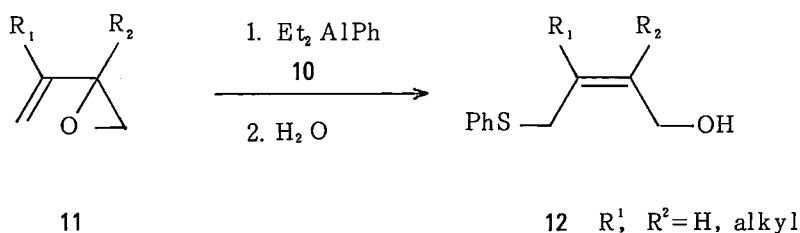


ンと〔2+2〕型交差付加体 9 を与えることを見出した。反応は 100% 選択的である。ベンゾノルボルナジエンも同様の反応を行う。ところが 8 のエンド異性体やノルボルネン は反応性を

示さない。反応機構や高選択性の要因を考察した。⁷

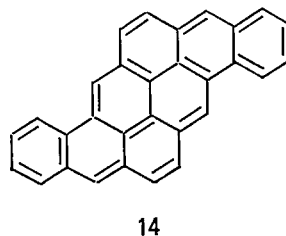
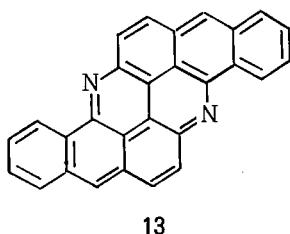
(3) 高選択的有機反応の開発

オキシラン類は有機合成中間体として重要な化合物である。われわれは新しいアルミニウム化合物10がビニルオキシラン類11に位置および立体選択的に1,4-付加し、Z立体構造をもつアリルアルコール12が高収率で得られることを見出した。⁸ 12は容易にフラン誘導体に変換される。また、オレフィンの立体構造を保持させたままアルキル化することもできる。今後さらに10が合成試薬として利用されることが望まれる。



(4) 高純度縮合芳香環化合物の合成と物性に関する研究

縮合芳香環化合物は分子科学の立場から興味ある物性をもつものが多いが一般に有機溶媒に難溶で、高い融点をもつため精製が極めて困難である。フラバンスレン(13)、ピランスレン(14)などの縮合芳香環化合物の構造と光電導性などの物性との関連を明らかにするため、これらの高純度サンプルの合成に努めた。本研究は物性化学部門との共同研究で行われ、協力研究員の小谷野錦子博士が中心となって進められている。これまでに13の高純度試料を得、相関分子科学部門の手によってX線構造解析がなされた。⁹ 14についても高純度化の手法が確立され、現在



構造解析の段階に来ている。今後、物性研究者と共同して研究を進め、構造と物性との関連を明らかにしようとしている。

その他金属蒸気反応装置の製作および装置の改良をほぼ完了し、金属原子と各種有機分子との反応による新しい機能性金属錯体の合成に関する研究が開始されている。今後も化学試料室のそれぞれのスタッフがもつ高度の専門知識と実験技術を結集し、新奇な反応の発見よりはむ

しろ緻密に分子設計された高い機能をもつ分子の合成や、有機化学、有機金属化学、触媒化学などの分野における基本的諸問題の解明に努力する所存である。最後に以上の研究を直接、間接にサポートして下さった分子研内外の研究者および技官の方々に深く感謝致します。

参 考 文 献

- (1) A. Miyashita, A. Yasuda, H. Takaya, K. Toriumi, T. Ito, T. Souchi, and R. Noyori, *J. Am. Chem. Soc.*, **102**, 7932-7934 (1980).
- (2) K. Toriumi, T. Ito, H. Takaya, T. Souchi, and R. Noyori, *Acta Cryst. Sec. B*, in press.
- (3) 大塚, 山県, 谷, 高谷, 宮下, 野依, 芥川, 日化第44秋期年会, 岡山, 1981年10月, 要旨集Ⅲ, PP 864 — 865.
- (4) H. Takaya, T. Suzuki, Y. Kumagai, M. Hosoya, H. Kawauchi, and R. Noyori, *J. Org. Chem.*, **46**, 2854-2861 (1981); H. Takaya, M. Yamakawa, and R. Noyori, "Fundamental Research in Homogeneous Catalysis," Vol. 2, Plenum Publishing Co., 1978, pp 221-240.
- (5) A. Miyashita, M. Takahashi, and H. Takaya, *J. Am. Chem. Soc.*, **103**, 6257-6259 (1981).
- (6) H. Takaya, T. Suzuki, Y. Kumagai, M. Yamakawa, and R. Noyori, *J. Org. Chem.*, **46**, 2846-2854 (1981).
- (7) H. Takaya, M. Yamakawa, and R. Noyori, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, in press.
- (8) A. Yasuda, M. Takahashi, and H. Takaya, *Tetrahedron Lett.*, **22**, 2413-2416 (1981).
- (9) K. Toriumi, K. Koyano, N. Sato, H. Takaya, T. Ito, and H. Inokuchi, *Acta Cryst. Sec. B*, in press.

岡崎コンフェレンス報告

第13回岡崎コンフェレンス

「短寿命分子とイオン—星間過程におけるその役割」

分子研 齋 藤 修 二

1970年代における宇宙電波分光の発展はめざましく、数多くの星間分子が電波望遠鏡によって発見された。その結果、温度も密度も極端に低い星間空間における物理的・化学的諸過程、すなわち、星の生成の初期過程や星間分子の生成過程について、新しい詳細な知見が得られ、星の進化、宇宙における物質の輪廻に対する理解が驚異的に進んだ。さらに、その当然の帰結として、もっとエネルギーの大きい現象、すなわち、赤外・遠赤外領域にスペクトルを与えるような過程に興味が持たれるようになり、分子を対象とした赤外線・遠赤外線天文学の進歩を促した。

一方、実験室における分光学では、従来からのマイクロ波分光法やミリ波分光法の性能の向上が著しく、また、レーザー光源の出現に助けられ、赤外・遠赤外分光法が画期的に進歩した。その結果、これらの分光法の分解能のみならず感度も飛躍的に向上し、星間分子として重要な、多くの寿命の短い分子や分子イオンの分光が実現している。

このような時点において、天文学および分光学の研究者が集まり、星間分子に関連する研究の現状を報告、討論する事は、両分野の発展、展開に資する所が大きいと考え、本コンフェレンスを企画した。会期は昭和56年9月8日～10日、参加者は66名にのぼった。外国人招待者は、G. Herzberg 博士(カナダ国立研究所)、岡武史教授(シカゴ大学)、G. Winnewisser 教授(ケルン大学)の3名で、このほかに特別協力研究員 I. Botskor 博士(ウルム大学)が参加した。

第1日目は、長倉所長の Opening Address に続いて、主に、光の領域の問題に割り当てられた。辻、藤田両氏は星の大気中に存在するいろいろな分子種の光学的同定定量方法とその問題点ならびに得られた結果の持つ意味を論じた。これに対し、実験室の側からはいくつかの新しい分光法の試みとその適用結果が紹介された。特に、Herzberg 博士は、最近、NRCで自らおこなった、 H_3 および NH_4 ラジカルのリドベルグスペクトルの観測、解析結果を詳細に論じ、大きな感銘を与えた。

- ・ G. Herzberg (NRC) : Rydberg Spectra of Triatomic Hydrogen and the Ammonium Radical
- ・ 藤田良雄 (東大理) : The Role of the CN Red System ($A^2\Pi-X^2\Sigma$) as an Indicator of the Abundance Ratio $^{12}C/^{13}C$ in Carbon Stars
- ・ 辻隆 (東京天文台) : Quantitative Analysis on Molecules in Stellar Atmospheres and Its Imple-

cation to Interstellar Chemistry

- 山田千樫 (分子研) : Near Infrared Diode Laser Spectrometer
- 高木光司郎 (富山大理) : Microwave Optical Double Resonance of HNO : Rotational Spectrum in $\tilde{A}^1A''(1, 0, 0)$ and $(0, 2, 0)$
- 粕谷敬宏 (理研) : Predissociation of Diatomic Molecule by Dye Laser Spectroscopy
- 鈴木哲雄 (分子研) : Laser Excitation Spectrum of SiH_2

第2日目は 主に赤外領域の研究に割り当てられた。星間分子の化学において最も基本的で重要な分子イオンは N_3^- である。岡教授は H_3^+ の赤外吸収スペクトルを差周波レーザー分光法によって観測する事に成功し、その結果を報告した。ほかに実験室の分光としては、赤外半導体レーザー分光法、LMR分光による、寿命の短い分子の分光例が紹介された。このうちいくつかの分子については星間分子としての存在の可能性も検討された。奥田、松本両氏は、赤外線天文学の現状、特に我が国における活動状況を報告するとともに、星間分子を目的とした将来計画も論じた。この日の最後は、星間分子として注目を集めているポリアセチレンが取り上げられた。ポリアセチレンの電波望遠鏡による観測とその星間分子としての振舞、関連化合物の実験室でのマイクロ波分光、ポリアセチレンの生成過程に対する理論的な検討の報告があり、実りの多い議論がなされた。

- 岡武史 (シカゴ大学) : The Infrared Spectrum of H_3^+
- 清水忠雄 (東大理) : Collision-Induced-Transition Rate of Several Interstellar Molecules
- 奥田治之 (京大理) : Infrared Studies of Circumstellar and Interstellar Space
- 松本敏雄 (名大理) : Search of Molecular Hydrogen in M17
- 広田栄治 (分子研) : Infrared Diode Laser Spectroscopy of Transient Molecules
- 上原博道 (相模中研) : Infrared Laser Magnetic Resonance. Study of the Avoidance of Zeeman Level Crossings for Non-Linear Radicals and Detection of AsO and PD
- 田中武彦 (九大理) : Microwave Spectrum of Diacetylene
- 岡武史 (シカゴ大) : Long Chain Polyacetylene Molecules in Interstellar Space
- 鈴木博子 (京大理) : Interstellar Synthesis of Carbon Chain Molecules

二日目の夜のレセプションでは、霜田光一教授 (慶大理工) から

After dinner talk : Two Reflectors made in 1930

と題する大変興味深いお話をしていただいた。

第三日目の主な話題は電波領域での研究であった。Winnewisser 教授はボンの 100 m 電波望遠を駆使して得た高感度、高分解能データが、星間分子雲の諸過程の解明にいかにも有効であるかをいくつかの例を用いて示した。森本教授は、現在東京天文台が野辺山に建設中の 45 m 大型電波望

遠鏡の詳細を紹介した。このほかに、名大および木更津工専で稼働中のミリ波望遠鏡の紹介と観測結果の報告があった。これに対し実験室からは、寿命の短い分子のマイクロ波分光法の詳細と分光例の報告があった。

- G. Winnewisser (ケルン大学) : High-Resolution Spectroscopy and Star Formation
- 長谷川哲夫 (東京天文台) : Observation of HCO^+ in Interstellar Molecular Clouds
- 森本雅樹 (東京天文台) : Astronomical Radio Spectroscopy by the 45-m Radio Telescope
- 福井康雄 (名大理) : Mm-Wave Astronomy at Nagoya University
- 小平真次 (木更津工専) : 1.5-meter CO Telescope
- 松村知 (化技研) : Microwave Spectroscopy of Unstable Boron Compounds
- I. Botskor (ウルム大学) : Rotational Isomerism in Ethylamine
- 齋藤修二 (分子研) : Laboratory Microwave Spectroscopy of Interstellar Molecules, and Concluding Remarks

最後に齋藤が Concluding Remarks でしめくくった。このコンフェレンスは天文学、分光学双方の研究者が、それぞれ、何に興味を持ち、どのように考え、どのようなポテンシャルティを持っているかお互に理解し、さらに、個々の分野で星間分子に関連する研究の将来の展望を持つのに良い機会であったと思う。



After Dinner Talk Two Reflectors Made in 1930

慶応大理工 霜 田 光 一

In this after-dinner talk I will not speak on interstellar molecules nor ions. Professor Saito suggested me to talk about my personal history of astronomical connection. In recollecting my life, I found that I was enthusiastic about two different types of reflecting telescopes, one in 1930 and the other in 1948; the latter reflector has recently been traced to the original report of 1930.

When I was about nine years old, I was fascinated in star-gazing with my young brother. After some months of observation with the naked eye, I was naturally tempted to get a telescope. The telescope was very expensive at that time; no popular telescope was on the market, at least with a reasonable price within reach of young boys and girls.

Finally, I made up my mind to make a telescope all by myself. And I bought a book to learn how to make a telescope. I found that the first thing to do was to obtain an objective lens or a reflector. I went to a nearby optician asking in vain for a lens with a long focal length. Then I tried another optician again and again. They were selling eye glasses and magnifiers but they had no lenses suitable for a telescope.

Somehow or other, in the meantime, I happened to find a lens maker at a distance of nearly 4 km from home. Since then, I often went there, watching the grinding and polishing processes; the automatic quasi-periodic motion of the tool was quite interesting to me and, I remember, I never tired of watching it.

According to my request, the lens maker kindly produced an objective lens and an eye-piece lens almost as specified by the guide book. I bought them and built a refractive telescope with a magnification of perhaps 30x using the objective of no more than 3 cm in diameter.

In a year or so, as everyone would be, I became dissatisfied with such a small telescope and wanted for a bigger one. Under the circumstances of limited budget, my resolution was to make a 10 cm concave reflector from a pair of glass plates. But the poor skill and endurance of a young boy was far from finishing the concave reflector of optical quality. The aberration was too big and the 10 cm reflector telescope has never come out.

The technique of reflector making I learned in 1930, though unsuccessful at that time, turned out to be just useful in 1966, when I made a far-infrared water vapor laser at the Institute of Physical and Chemical Research. I ground and polished two copper disks of 6 cm in diameter by hand to form a spherical mirror of about 10 m radius of curvature. At the wavelength of 50 to 200 μm , the required accuracy was not so severe compared to the visible that my hand-

lapped mirrors could result in a successful operation of the first water-vapor laser at many wavelengths in the far-infrared.

The story of the second reflector dates back to 1930, when two paraboloidal reflectors of 2 m diameter were constructed at the Aeronautical Research Institute of the University of Tokyo. It was as long as 18 years afterwards, however, that I discovered one of them to build my radio-telescope.

I was graduated from the University of Tokyo during the World War II in September 1943, and immediately I was asked to participate in the development of microwave radars of the Japanese navy. I studied microwave detectors, waveguide components, and microwave receivers for two years as a graduate student until the end of the War in August 1945.

Shortly thereafter, the occupation forces decomposed the Aeronautical Research Institute. Many airplane engines, instruments and their test facilities were destroyed. Other associated equipments which were not directly related to airplanes were just abandoned to evacuate the laboratories.

The Institute of Science and Technology was established in 1947 in place of the Aeronautical Research Institute. As a graduate student of physics at the University of Tokyo I started experimental studies on microwave physics at the newly-built Institute of Science and Technology and became interested in microwave astronomy.

One day in the early spring in 1948, I happened to find a nice paraboloidal reflector among scraps of the Aeronautical Research Institute. The surface of the reflector was made of copper plates mounted on a hardwood frame. The shape of the paraboloid was precise to within a few millimeters with a focal length of about 73 cm.

I was very much delighted with this reflector, because it had the quality comparable to, or better than the best radar antenna for 10 cm waves. Moreover, the size of 2 m in diameter and 35 cm in depth was just I wanted.

The astronomical calendar said that there would be a partial solar eclipse in Tokyo on May 9, 1948. So, I was in haste to design and mount a microwave feed to the reflector in time for observation of the solar eclipse. A 3-GHz radar receiver using a magnetron local oscillator was modified into a rudimentary Dicke-type radiometer. The bandwidth of the IF amplifier was only 2 MHz, while the noise temperature could not be measured.

On May 9, 1948, the reflector was manually pointed towards the sun to observe the intensity variations of the solar noise at 3-GHz. A copy of the recorded trace is shown in Fig. 1. Because of the poor sensitivity and stability of the receiver, a decrease in received power can barely be recognized. The background noise and external disturbance prevented me from revealing any fine structures. The observed result was only orally reported at a meeting and has not been

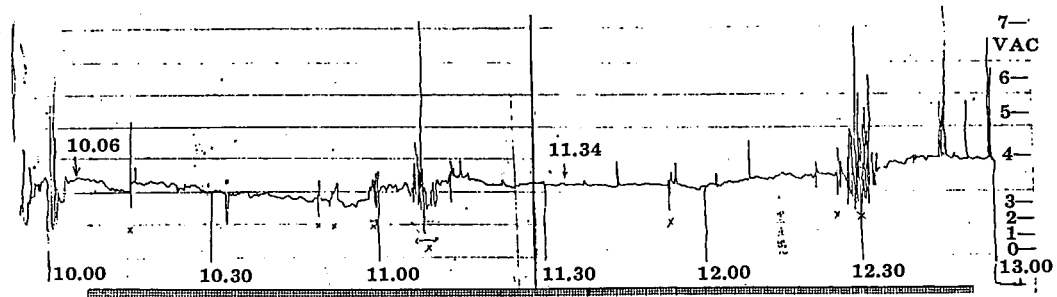


Fig. 1. Copy of the recorder trace of 3-GHz observation of partial eclipse on May 9, 1948.

published anywhere. Anyway, this was the first microwave astronomical observation in Japan.

In the summer of 1948 I moved to the Physics Department of the University of Tokyo. In the following year of 1949, observation of solar noise at 200 MHz was initiated at Tokyo Astronomical Observatory by Professor Hatanaka. The 2 m copper reflector was transferred to Tokyo Astronomical Observatory in 1951 by Professor Akabane, who constructed an improved 3-GHz radiometer with that reflector. The bandwidth was 10 MHz and the minimum detectable temperature was 5 K. His 3-GHz observation of the eclipse on Feb. 14, 1953 was reported in Ref. 1 as shown in Fig. 2. Apparent limb-brightening and a region of enhanced emission in one part of the solar disk were found. No visual observation of the sun spots could be made because it was overcast.

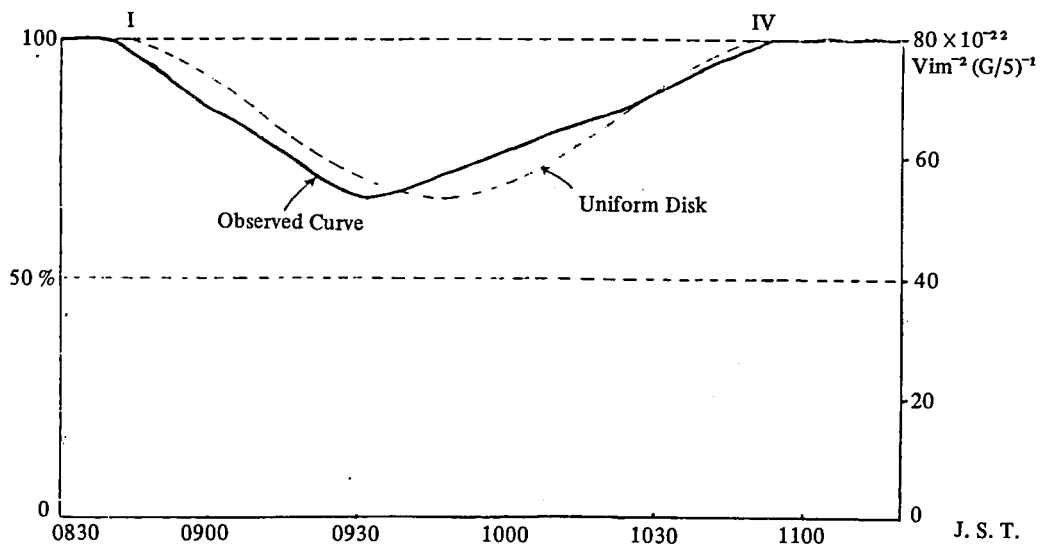


Fig. 2. Observed curve of partial eclipse on Feb. 14, 1953 and calculated curve assuming a uniform disk with the same diameter as the visual disk²⁾

The following eclipse on June 20, 1955 was also observed with the reflector. At that time, this 2 m paraboloidal reflector was taken to Kagoshima at the south-western end of Japan for observation of larger eclipse of 38 percent. Figure 3 is reproduced from Fig. 2 of Ref. 2. The observed results at Kagoshima are shown in Fig. 3(a). Fig. 3(b) and (c) are respectively the 3.75-GHz observation at Toyokawa located about 30 km south-west of Okazaki, and the 3-GHz observation at Tokyo Astronomical Observatory.

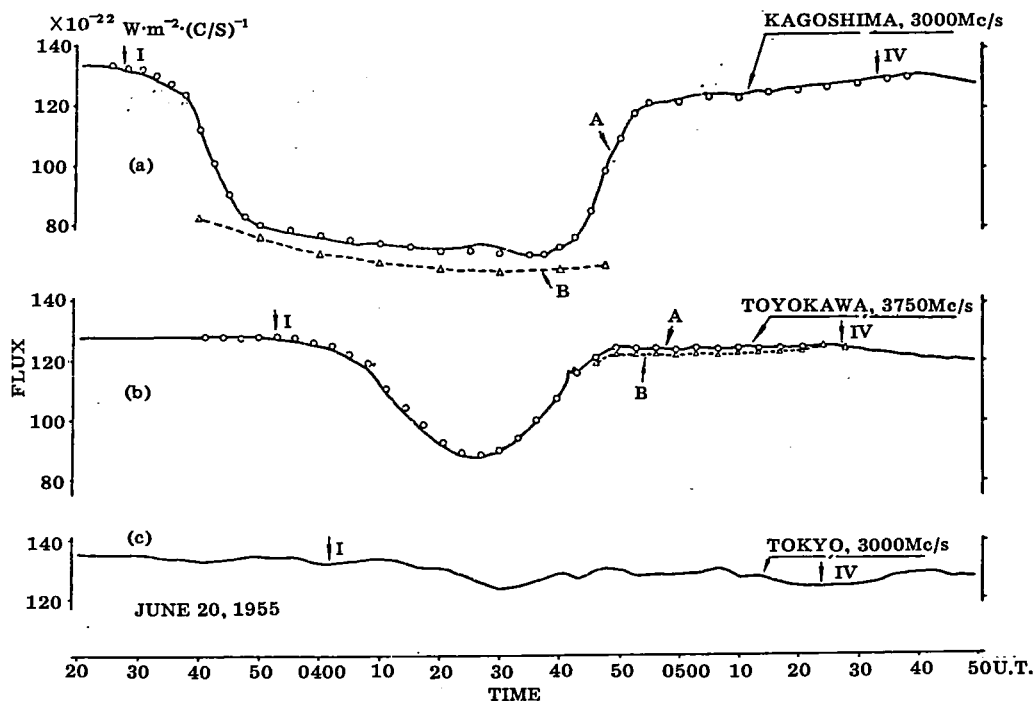
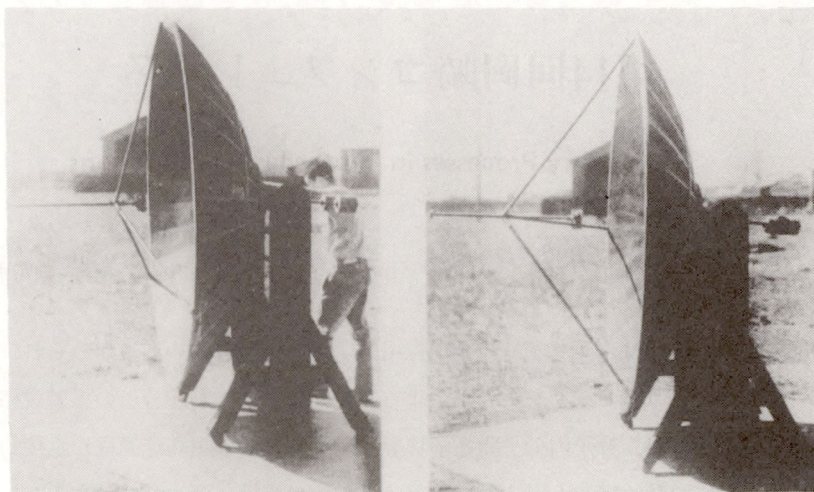


Fig. 3. Observation of solar eclipse on June 20, 1955 (a) at Kagoshima with the 2 m dish, (b) at Toyokawa with a 2.5 m dish, and (c) at Tokyo with a 10 m dish³⁾

From these observations they were able to identify the enhanced region of microwave emission as local electron activities associated with sun spots and calium plage.³⁾

A few weeks ago, as I was requested to give this after-dinner talk, I went to three different libraries in search of the initial report of this 2 m dish. And finally I found Ref. 4 published in 1930, more than 10 years older than I supposed. Fig. 4 is a reproduction of Fig. 13 in the paper. Professor Obata made these two reflectors as sound collectors.

The title of the paper says "Acoustical Properties of Some Sound Collectors for the Aircraft Sound Locator". One of the reflectors has a depth of 46 cm with a focal length of 55 cm and the other has a depth of 35 cm with a focal length of 73 cm. The authors compared acoustical



(a) Type I.

(b) Type II.

Fig. 4. Two paraboloidal reflectors for sound collectors⁴⁾.

properties of these reflectors with exponential horns. The Aeronautical Research Institute had such an excellent machine shop that one of these reflectors, type II, could satisfactorily be used for 10 cm. microwaves. The half-beamwidth at 3-GHz was 3 to 3.5 degrees.

After being used as a radio dish for nearly ten years from 1948, this 2 m reflector was abandoned, according to Professor Morimoto, when they built a small dish for 35-GHz observation.

The second generation of microwave astronomy in Japan started in 1967 to construct a 6 m dish with a surface precision of 0.1 mm for mm-wave astronomy. The 6 m dish and a 3 mm receiver were completed in 1970. Additional receivers and spectrometers have since been developed and some interstellar molecules have been observed by using the 6 m telescopes as you know.

The third generation of our microwave astronomy is the 45 m dish which will be reported by Professor Morimoto tomorrow morning. So I will close my talk this evening. Thank you.

References

- 1 Kenji Aoki : Rep. Ionosphere Res. Jpn. 7 (1953) 109.
- 2 T. Hatanaka, K. Akabane, and F. Moriyama : Rep. Ionosphere Res. Jpn. 9 (1955) 195.
- 3 T. Hatanaka, K. Akabane, F. Moriyama, H. Tanaka and T. Kakinuma : Publ. Ast. Soc. Jpn. 7 (1955) 160.
- 4 J. Obata and Y. Yosida : Rep. Aeronautical Res. Inst. 5 (1930) 231.

第14回岡崎コンフェレンス

The Primary Processes in Photochemical Reactions

大阪大基礎工 又 賀 昇
分子研 吉 原 経太郎

光化学反応機構の解明は、レーザー技術の採用によって近年著しい進歩がみられ、特に、ナノ秒レーザー、ついでピコ秒レーザーの導入によって光励起直後の励起分子の振動緩和、配向緩和異性化、分子間励起移動、分子内分子間電子移動、陽子移動等の超高速過程が直接的に測定できるようになり、物質の動的構造と反応過程に対する理解は格段に深まりつつある。このような時期に、ピコ・ナノ秒レーザー分光やその他の方法による光化学初期過程の研究について、この分野の現状と最近の成果に関し討論し、今後の方向を探ることは極めて有意義と考えられる。当岡崎コンフェレンスはこのような趣旨に基づいて、自由で活発な討論を行うべく企画されたものである。

出席者の一人、英王立研の Porter 教授が分子研の外国人評議員としての仕事を兼ねて来所されたので、コンフェレンスそのものはできるだけコンパクトなスケジュールとした。その代り東北大・伊藤光男教授にお願いして、後述のサテライトミーティングを開いて頂いた。

はじめにコンフェレンスとサテライトミーティングのプログラムを下記に示す。

PROGRAM

October 20th (Tuesday)

S. Nagakura :

Opening Address

Session I : Dynamics of Molecular Motions in Solution

G. Porter (Royal Institution) :

Rotational Diffusion in the Excited State

A. Ikegami (Inst. Phys. Chem. Res.) :

Restricted Rotational Diffusion in Biological Membranes

Coffee Break

Y. Nishijima (Kyoto Univ.) :

Molecular Motions in Solution Studied by Intramolecular Excimer Formation

T. Okada (Osaka Univ.) :

Picosecond Laser Spectroscopy on the Solvation Processes of Some
Intramolecular CT Systems

T. Kobayashi (Univ. of Tokyo) :

Conformational Change in Charge-Transfer Complex and Photo-
chromic Systems

Reception

October 21st (Wednesday)

Session II : Elementary Processes from Excited States

R. M. Hochstrasser (Univ. of Pennsylvania) :

Studies of Photochemical Processes in Porphyrins, Stilbenes, and
Tetrazines

H. Shizuka (Gunma Univ.) :

Excited-State Proton Transfer Reactions and Proton-Induced Quen-
ching

Coffee Break

N. Nakashima (IMS) :

Nanosecond Laser Photolysis of Benzene : $^1E_{2g}$ States, Hot Ben-
zene, and Droplet Formation.

I. Tanaka (Tokyo Inst. Tech. and IMS) :

Multiphoton Process of Polyatomic and Diatomic Molecules

N. Nishi (IMS) :

Photofragmentation Processes in Ethylene Derivatives Induced by a
VUV Laser at 193 nm

Lunch

Session III : Electron Transfer and Related Processes

A. Weller (MPG Inst. Biophysik. Chem.) :

Mechanism and Spin Dynamics of Photo-induced Electron Transfer
Reactions

N. Mataga (Osaka Univ.) :

Charge Separation and Intersystem Crossing in Some Exciplexes –
Picosecond Laser Photolysis Studies

Coffee Break

H. Kokubun (Tohoku Univ.) :

Fluorescence Quenching by Alkylhalides

J. Tanaka (Nagoya Univ.) :

Photoionization Mechanisms of Naphthylamine Derivatives

A. Namiki (Toyohashi Tech. Univ.) :

Electron Transfer in Low Temperature Matrices

October 22nd (Thursday)

Session IV : Photochemical Reactions in Organized Systems

J. K. Thomas (Univ. of Notre Dame) :

Photochemical Reactions in Organized Systems

H. Hayashi (Inst. Phys. Chem. Res.) :

Magnetic Field and Magnetic Isotope Effects upon the Primary Processes in Photochemical Reactions in Micelles

Coffee Break

T. Matsuo (Kyushu Univ.):

Photoinduced Electron Transfer from Metal Complexes to Electron Relay Systems in Organized Molecular Assemblies

H. Sato (Mie Univ.) :

Fluorescence and Energy Transfer of Dye-Detergent Systems in the Premicellar Region

S. Tagawa (Univ. of Tokyo) :

Picosecond Pulse Radiolysis Studies on Charged Species and Excited States of Polymers

Closing Remarks :

K. Yoshihara (IMS)

Half-day Discussion on coherent molecular spectroscopy

R. M. Hochstrasser (Univ. of Pennsylvania) :

Coherent Spectroscopic Methods in the Study of Molecular Dynamics: Coherent Excited State Raman Effects

Coffee Break

Yuzo Yoshikuni and Shigeo Shionoya (Univ. of Tokyo) :

Picosecond Photon Echo of Pentacene Molecules in Crystals.

Masahiro Matsuoka (Kyoto Univ.) :

Photon Echo Studies on the Collisional Relaxations in Simple Mole-

cules.

Jun-ichi Murakami (Tohoku Univ.) :

Ion-Dip Spectroscopy of Benzene Derivatives in a Supersonic Free Jet.

Session Iでは溶液中における励起分子の構造変化や分子の回転について講演と討論が行われた。Porterは液体中の分子の運動の基本から説き起こし、次に光励起に伴う分子の回転運動の一般論について論じた。回転運動は分子の大きさ、温度等の条件によって大きく異なるが、多くの場合ピコ秒蛍光および過渡吸収が最も一般的な場合に有力である。豊富な実験結果や、up-conversionを用いた新しい実験方法の紹介があり、高分子・生体系への応用、液体構造研究への発展等を論じた。続いて、生体膜系、高分子系、電荷移動錯体、エキサイプレックス系等における最近の研究の紹介、活発な討論が行われた。

Session IIでは光化学反応初期過程の研究に欠かせない電子励起状態の諸性質と反応性の関連を中心に討論が行われた。Hochstrasserは励起電子状態における振動状態の緩和についてはじめに論じた。いくつかの分子について、ピコ秒分光によって振動緩和の直接測定が可能であり、今後反応のチャンネルへのエネルギー分配過程を明らかにできるようになるという見通しを述べた。今後詳しく検討されるべき問題である。他にポリフィリン系化合物の電子励起状態の緩和とミオグロビン等に見られる生物活性を論じた。続いて、励起状態の水素移動反応、多光子過程、光解離反応等が何れも励起電子状態の性質と関連づけて論ぜられた。

Session IIIでは光電子移動反応の研究に関して講演と討論が行われた。Wellerは溶液におけるエキサイプレックス系の電子移動反応について一般的なスキームを示し、特に極性溶媒中のgeminate pairの挙動に対する磁場効果による研究について報告した。続いてエキサイプレックス系の光イオン解離と電子移動状態からの高速項間交差のピコ秒分光による研究、その他の電子移動消光反応や光による溶媒への電子放出、さらに低温マトリックスにおける捕捉電子の移動の機構についての理論的考察等について報告があり、光化学反応の最も基本的な過程の一つである溶液における光電子移動の機構の詳細について活発な討論が行われた。

以上はいずれも均一溶媒中での反応であるが、Session IVでは、種々の観点から最近非常に興味を持たれているミセル、ベシクル系、高分子系等における光電子移動、エネルギー移動について討論した。Thomasはミセル系における光電子移動と電荷分離についてエキサイプレックス系の場合を例として報告し、電子移動の機構やミセル内の極性等について討論した。続いてミセルにおける光水素引抜き磁場効果による研究、ルテニウム錯体を含むミセル・ベシクル系での電荷分離、界面活性剤-色素会合体での励起移動の機構、高分子の励起状態とその消光機構に対するピコ秒パルスラジオリシスによる研究について報告され、興味深い討論が行われた。

以上のコンフェレンスの全期間を通じて自由で活発な議論が行われ、問題点を明らかにし、極めて有意義であったと考える。

コヒーレント分子分光

(Coherent Molecular Spectroscopy)

東北大理 伊藤 光 男

Hochstrasser 教授を第14回岡崎コンフェレンスに呼ぶに当りコンフェレンスだけで帰すのは勿体ないので、何か彼を中心にした研究会を企画してはという吉原教授の示唆に従って、この研究会を岡崎コンフェレンスの終了後の10月22日午後に開催した。岡崎コンフェレンスのハードスケジュールのあとにも拘らず、約30名の出席者があり熱心な議論が行われた。とくに Hochstrasser 教授はコンフェレンスでは多少控え目であったが、この研究会では水を得た魚の如く生き生きした講演が極めて印象的であった。リラックスした雰囲気のもとで自由な議論が活発になされ、盛会裡に終了した。以下プログラムにそって講演の概要を記す。

(1) Coherent Spectroscopic Methods in the study of Molecular Dynamics : Coherent Excited State Raman Scattering.

3 次の非線形感受率 $\chi^{(3)}$ のラマン、2 光子同時共鳴を利用した新しいコヒーレント分光についての紹介がなされた。2 つの波長可変レーザー w_1, w_2 を低温結晶に入射し、発生する $w_3 = 2w_1 - w_2$ のコヒーレント光を観測する。 w_1 及び w_2 を、 $w_1 - w_2, 2w_2$ がそれぞれ結晶の振動準位、電子準位に共鳴するように選べば、 w_3 のシグナルとして基底電子状態のラマン (CARS に相当) と同時に、励起電子状態のラマンと同質のスペクトルが得られる。ペンタセン結晶についての実験結果を紹介し、この方法は色んな共鳴レベルの population decay, coherence decay のダイナミックスの研究にも極めて有効であることが示された。

(2) 塩谷繁雄 (東大物性研)

Picosecond Photon Echo of Pentacene Molecules in Crystals.

ナフタレンおよび p-ターフェニル結晶にドープしたペンタセン分子のフォトン・エコーを波長可変ピコ秒パルスを用いて 1.6 ~ 4.2 K で測定した。エコーの信号の減衰時間から横緩和時間 T_2 を求め、既知の縦緩和時間 T_1 を用いて純位相緩和時間 T_2^* を得た。 T_2^* は 2.2 K 以下では温度によらず一定になることを見出した。2.2 K 以上では T_2^* はフォノンとの相互作用により温度と共に減少する。温度に無関係の T_2^* は濃度にほぼ比例して減少する。この濃度依存の位相緩和機構について議論した。

(3) 松岡正浩 (京大・理)

Photon Echo Studies on the Collisional Relaxations in Simple Molecules

原子あるいは分子における衝突をフォトンエコー法によって調べると、準位間の遷移を起すような強い衝突のほかに、励起状態の位相だけを変化させる弱い衝突、さらに位相の変化も無視できるような小角度の散乱の衝突も検出できる。ここでは、 $\text{Na}-\text{Ar}$ 間と Na_2-Ar 間の衝突について、コヒーレンスの緩和に関する位相変化、速度変化および状態変化の各断面積を、また分子数の緩和に関して速度変化と状態変化の各断面積を測定した。このような微細な情報を分子における種々の物理・化学過程の研究に役立てることを意図している。

(4) 村上純一 (東北大・理)

Ion-Dip Spectroscopy of Benzene Derivatives in a Supersonic Free Jet.

w_1 のレーザーで S_1 を共鳴中間状態とする多光子イオン化を起させイオン電流を測定する。これにさらに波長可変の w_2 のレーザーを入射する。 w_2 が S_1 と S_0 の振動準位のエネルギー差にマッチした時、誘導放出が起りイオン電流が減少する。この原理を利用した分光法がION-DIP分光法であり、SVLけい光と同質のスペクトルが得られ、またION-DIPの強度から S_0-S_1 , S_1-I (イオン化状態)間の遷移確率の比を求めることができる。トルエン、アニリンの超音速自由噴流に対してこの分光法を適用した結果について議論がなされた。



研究会報告

UVSORストレージリング観測システムの設計

分子研 木村 克美

現在、分子研では 0.6 GeV の極端紫外光実験装置(UVSOR) およびその周辺の観測システムの建設が具体的に進められている。(すでに UVSOR 計画は分子研のパンフレットで数回にわたって紹介されてきた。) 今年度は、マシンの建設が始められ、さらに建物が着工になり、UVSOR 計画は急速に実現に向けて動きだしている。したがって、現在の UVSOR 計画の進捗状況および来年度の計画を広く所外に紹介するとともに率直な意見を頂くための本研究会が企画された。

またこの機会に、LURE (フランス)、SOR-RING (物性研)、電総研 SOR の状況をきくことができ、またとくに今回はシンクロトン放射用ミラーに重点をおいた講演がおり込まれ、極めて有意義な研究会であった。

研究会は次の三つに分類することができる。

A) UVSOR 関係

1. UVSOR 入射器の進捗状況とストレージリングの設計 I (分子研) 渡辺 誠
2. UVSOR ストレージリングの設計 II (分子研) 春日 俊夫
3. SOR 出射部 (分子研) 酒井 楠雄
4. UVSOR 施設の建物の現状と計画 (分子研) 内田 章
5. UVSOR 観測システムの現状と計画 (分子研) 小谷野猪之助
6. 固体光電子分光用分光器 (分子研) 関 和彦
7. CAMAC を用いた自動計測 (分子研) 高木 芳弘

B) 他の SOR 施設

1. LURE の現状 (パリ大南校) P. M. Guyon
2. SOR-RING における電子ビームの性質 (東大物性研) 宮原 義一
3. 電総研 SOR 施設における観測システムの現状と研究計画 (電総研) 小貫 英雄・
富增多喜男

C) シンクロトン放射用ミラー関係

1. シンクロトン放射用反射光学系 (筑波大物工) 野田 英行
2. オプティカル・ショップ・テストニング (阪工試) 川井 誠一

3. シンクロトロン放射用ミラーの XUV 反射率 (群馬大) 菅原 英直

今回の研究会は UVSOR 計画を具体的に紹介した 2 度目の研究会であり、多数の所外参加者(所外30名)から沢山の貴重な意見や示唆を頂いた。

これらの有益な意見を今後の UVSOR 計画に反映させていきたい。なお、この研究会には所内からも31名の参加者があり、関心の高さがうかがわれる。今回の研究会の講演要旨集は分子研 UVSOR-8 および UVSOR-9 として出版される予定である。

化学反応への衝突論的アプローチ

北大理 大野 公男

反応動力学の理論的研究が化学反応の理解にとって最も重要な分野の一つであることは言うまでもないが、残念ながら日本での研究は今迄の所かなり乏しい状態にある。しかし最近、日本でもおくれればせながらこの分野の研究の機運がもり上がってきている。そこでこのテーマに興味をもつ研究者が一堂に会して勉強をしようというのがこの研究会開催の主旨であった。

まず世界における研究の現状を把握することを第一とし各テーマ毎にレビューを行うことを主たる企画とした。もちろんレビュー以外にもいくつかのオリジナルな仕事の紹介も行われた。

研究会は昭和56年9月3日～5日の3日間にわたって催された。その内容の概略は以下の通りである。

「ICPEAC からの話題 — introduction に代えて」 高柳 和夫 (宇宙科学研)

第12回原子衝突国際会議 (1981年7月 Gatlinburg, Tennessee) における Kupperman の講演を中心として、超球座標系の話、DWBA の計算例の話などの紹介があった。

「反応力学 I — 古典的軌跡」 諸熊 奎治 (分子研)

3 原子系では古典軌道法がルーチン化し多原子反応系への応用に進んでいること。変分法的遷移状態理論の紹介。

「反応力学 II — 量子的アプローチ」 島村 勲 (宇宙科学研)

いろいろな量子効果の説明。J₂ 保在の近似、回転瞬間近似などの有効性を議論。

「水分子の光分解反応 (Contributed paper)」 大旗 淳 (九大教養)

衝突論的手法を用いた半衝突としての光分解過程のオリジナルな研究の中間報告。

「重粒子間の非断性衝突の理論」 渡部 力 (東大工)

原子-原子衝突過程における諸現象と理論的手法の現状概観。

「非断熱的遷移の理論」 中村 宏樹 (分子研)

電子状態間遷移を伴う反応の理論的手法の概観。半古典的S行列理論の問題点を整理。

「 $\text{Ar}^+ + \text{H}_2$ の state-to-state chemistry」 小谷野猪之助 (分子研)

独自の TESICO 技術による実験の紹介。 $\text{Ar}^+ + \text{CO}$ では $\text{C}\infty\text{v}$ の、 $\text{Ar}^+ + \text{N}_2$ では $\text{C}_{2\text{v}}$ の配位が好ましいという新しい実験事実の紹介もあった。

「ポテンシャル曲面の特性と衝突過程」 加藤 重樹 (分子研)

エネルギー曲面の理論計算の現状概観と $\text{Hg}^* + \text{CO}$ 衝突系での E-V 変換過程の研究の中間報告。

「Intrinsic reaction coordinate とその性質」 立花 明知 (滋賀医大医)

エネルギー超曲面内の非平衡点を通る一般の極限反応座標の導入と運動エネルギーハミルトンアン表現に関する一般論。

「反応の散乱理論と分子軌道理論との関係」 出口喜三郎 (金沢大理)

Woodward-Hoffman 則や Bader-Salem-Pearson 則と Lippmann-Schwinger 方程式との関係について議論。

「表面における分子衝突」 塚田 捷 (分子研)

理論の現状を概観。特に原子と結晶格子系との間のエネルギー移動に関する理論の紹介。フォノン系の量子化の重要性を指摘。

「統計的反応理論」 北原 和夫 (静岡大教養)

遷移状態理論の歴史と現状をレビュー。同理論の変分法的定式化や対称性との関係などを議論。

以上の学習を糧として、(i) 古典軌道法のルーチン化とその動力学メカニズムの理解への応用。

(ii) 半古典論の改良と量子論の実用化への努力(特に電子的非断熱過程の場合について)。

(iii) 表面反応研究のための学際的協力の必要性。……等々の多くの課題に挑み、今後日本でも独自の新しい研究を発展させこの分野が隆盛になることを祈念して研究会を閉じた。

光エネルギーの不均一系化学変換の高率化をめざして

東大工 藤 嶋 昭

太陽エネルギーの化学的変換に関する研究が国内はもとより世界中で活発であり、その研究進展状況の速さには目をみはるものがある。特に半導体電極を用いる湿式光電池、半導体粉末を懸

濁した光触媒、クロロフィルを始めとする有機感光体を用いる系、あるいはルテニウム錯体による水の光分解などを代表的トピックスとしてあげることができる。

これらの研究分野における現在の研究現況として、新しいシステムの提案、高い変換効率の達成などが活発に競われている。このような時期に、我が国でこの分野の研究を行なっている若手の研究者が昭和56年7月7日、8日の両日分子研に会し、“光エネルギーの化学的変換における高効率光電荷分離を促す研究会”をもった。

本研究会では以下に示す7件の講演の外に半導体電極と光触媒に関する外国文献の紹介を各国あるいは各研究者順に行なった。この文献紹介は新しい試みではあったが、各抄録者の十分な準備のもとに各国の研究が抄録されてまとめられたので、全参加者にこの方面の研究の流れと方向性をはっきりと認識される結果となり、非常に好評であった。

講演の概略をプログラムの順にしたがって報告する。

○ 最近の半導体電極研究の流れ 藤嶋 昭 (東大工)

光電池としての効率向上や実用化材料の探索の研究現状が解説され、次いで、Fermi レベルピンニング等を含めての半導体電極表面の反応機構に対する関連が述べられた。さらに半導体表面の処理による相異、光合成の関連、システムとしての応用性などが述べられた。

○ 半導体/溶液界面における電荷移動過程の問題点 中戸 義礼 (阪大基礎工)

GaP, CdS, ZnO などでの半導体の分解反応とレドックス反応との競争をよく説明できる考え方として、表面捕捉ホールの存在によるとする考え方が提案された。この考えは一般の酸化還元反応にも適用され、詳しく考察された。

○ 半導体電極の高効率化への新しい試み 森崎 弘 (電通大)

新しい半導体材料の探索と半導体の複合化などによる半導体サイドからの半導体電極の高効率の試みが述べられた。特に分子線エピタキシー、イオン注入等の新しい加工技術を駆使することにより有力な複合電極が開発されることの必要性が強調された。

○ 光触媒における表面の働き 坂田 忠良 (分子研)

半導体微粒子触媒の特徴がまとめられ、また光触媒系のエネルギー構造が示された。光触媒活性は粒子径と関係していることが確かめられ、粒子径が小さいほど活性であるが、1,000Å ぐらいで飽和することが明らかにされた。また水の分解による水素発生速度は電荷分離以外に、水溶液中の反応の不可逆性と強い関係があることが述べられた。

- 。 ヒドロゲナーゼを触媒とする光水素発生反応 大倉 一郎 (東工大)

ヒドロゲナーゼと光増感系との組合せによる水素発生反応が解説された。特にチオールを電子供与体とし、各種光増感剤を用いたメチルビローゲンの光還元反応とヒドロゲナーゼ添加による水素発生反応が報告された。亜鉛テトラフェニルポルフィリントリスルホン酸が特に光増感剤とした活性であり、これとメチルビローゲンとの速度論が考察された。

- 。 高分子変換系における光電荷分離 金子 正夫 (理研)

ミセルやリポソームなどの異相界面を用いる光エネルギー変換にかかわって、practical な観点から高分子系の採用の有利な点が述べられた。特に $\text{Ru}(\text{bpy})_3^{2+}$ 高分子系を利用する変換系を設計するに際しての各反応部の特徴や問題点がまとめられた。

- 。 機能化ポリフィリンと光化学 山村 和夫 (京大工)

クロロフィルの光照射によって励起された電子を有効に、しかも化学的に意味のある形に固定することが人工光合成に最も必要であることが指摘された。電荷の移行過程を有効に行なわせる方法を探るためとして、特異的分子会合を用いる電荷移動過程の加速現象、液膜を用いる光電荷分離系と電子輸送系の連結などについて解説された。

なお文献抄録は上記の講演者以外の14名の方々によって、テーマを半導体電極と光触媒に限って、Gerischer, Bard, Wrighton, Gratzel を始め、ソ連、中国、ブラジルなどの研究を含めて、まとめていただいた。1981年夏までに手に入れることのできる大多数の論文がまとめられたわけで、個人では見落しやすく、又時間がかかる作業であることを考えると、このように専門家によって分担して抄録いただいたことはお互のためにも非常に有意義であった。まとめられた400編ほどの抄録は、1981年10月になって、さらに多くの方々への利用の便を考え光電気化学研究懇談会(電気化学協会内における研究会の1つ)によって一冊の本として発行されている。希望される向きには電気化学協会に問合せいただきたい。(〒100 東京都千代田区有楽町1—12—1, 新有楽町ビル, 電気化学協会 03—214—6001)

以上述べたように2日間にわたり、世界のこの分野の研究状況を知り、又現在解決しなければならない問題点を浮きぼりにすることができ、大変有意義であった。

最後に、本研究会開催にあたって、一方ならぬお世話をいただいた分子科学研究所の坂田忠良、橋本和仁両氏ならびに原田嬢に厚くお礼申しあげます。

有機化合物にみられる弱い分子内及び分子間相互作用

横浜国大工 廣 田 穰

分子と分子の間の弱い相互作用は、固体や液体の構造、反応の初期過程、異種物質間の親和性の問題を考える上で重要であり、他方分子内での弱い相互作用はその立体配座、物性等に重要な役割を果たしている。弱い相互作用と一まとめに呼ばれている中身には、特異的な力である水素結合、電荷移動相互作用から分散力、多重極間の静電力まで含まれており、時として必ずしも弱い相互作用と呼べないほどの強さになる場合もある。しかし、今日では研究の方向は次第に「弱い相互作用」のうちでもさらに弱いものの方に向けられている。例えば、水素結合から $\text{OH} \cdots \pi$ 相互作用への発展は、さらに弱い相互作用である $\text{CH} \cdots \pi$ 仮説を生むに至り、他方では双極子間力の延長としてさらに四極子、八極子を含む静電的相互作用の重要性が指摘されている。相互作用の議論の上でのもう一つの傾向は、分子中の複数のサイトでの複合的かつ相補的な相互作用が論じられ、分子全体の構造的な識別へと発展していることである。ここにおいては、従来のエネルギー (ΔH) で支配されていた相互作用からエントロピー (ΔS) で支配される相互作用への研究の展開がみられる。

この時点において、種々の異なる立場から有機化合物の分子内及び分子間の相互作用の研究に参与している研究者が集まり、情報の交換と討論を通じてこの分野での研究の一層の発展に資することを目的として、本研究会を企画した。相互作用を理論的立場でとり上げている物理化学の分野、実際に有機化学の立場で経験的に「相互作用」を実験事実のうちから見出している有機化学の分野の研究者から次のプログラムに示すような講演者を選び、昭和56年2月7日(土)、8日(日)の両日にわたり研究会を催した。

はじめに — 弱い相互作用と問題点 (横浜国大工) 廣田 穰

1. 液相の分子間ポテンシャル (分子研) 藤山 常毅
2. 量子化学的立場からみた弱い相互作用 (横浜国大教育) 永瀬 茂
3. 分子内の芳香核間相互作用 (阪大産研) 坂田 祥光
4. 電荷移動相互作用と電子移動反応 (東大教養) 務台 潔
5. 空間的な形に特異的な弱い分子間相互作用と分子識別との関係
(青山学院大理工) 遠藤 忠
6. 静電的及び疎水性相互作用 (京大工) 伊勢 典夫
7. 四極子—双極子相互作用とNMR スペクトル (電通大) 中川 直哉

8. イオン対の安定性 (九大理) 都野 雄甫
 9. 分子認識力をもつ分子の合成 (京大工) 田伏 岩夫
 10. 立体区別反応における弱い相互作用 (東大工) 井上 祥平
 11. 力場計算による分子内相互作用 (北大理) 大沢 映二
 12. CH $\cdots\pi$ 相互作用と分子の配座, 反応の特異性 (明治製菓中研) 西尾 元宏
 13. 相関分子内回転—齒車状分子における位相異性現象 (分子研) 川田 勇三
- まとめ (分子研) 岩村 秀

研究会での討論を活発にするために、講演者の方々には短時間に大変無理をして予稿を書いていただき、「岡崎に来る途中の車中에서도眼を通してください。」との手紙を添えて予め郵送しておき、さらに関連した講演の際に飛び入りのコメントを歓迎する旨を併記しておいた。その効果があったか、議論は大いに弾み、第1日目は途中の30分の休憩を10分に縮めてもなお予定より30分も会の進行が遅れ、2日目も3時の終了予定が4時を過ぎてしまい、出席者に大変迷惑をかける結果となってしまった。

プログラムに載っていない飛び入りの小講演としては、

- ³⁵CI-NMR による塩素イオンの解離およびイオン対の形成について

(分子研) 菅原 正

- 9-(3,5-ジメチルベンジル) トリブチセン類の束縛回転について

(東大理) 山本 学

の2件があり、最後には2日間を通じて研究会に出席し熱心に討論に加わっておられた木原太郎電通大教授から、自作の模型で無極性分子の結晶構造が四極子を考慮して再現できるとのデモンストレーション付きで、近接分子間の相互作用として多重極間の力が重視されるべきであるとのコメントがあり、会を閉じた。8日の日曜日の午後には赤松所長も顔を見せられ、出席者は合計37名であった。

7日の夜には岩村さんの配慮で懇親会が企画され、暖かい鍋をかこんで、なごやかな内にもいろいろなインフォーマルな情報交換が行われ、駆け足ではあったが無駄がなく密度の高い2日間を岡崎で過ごし、三々五々帰途についた。

センターニュース

電子計算機センター

1. 昭和57年度のレベルアップについて

昭和54年1月にサービスを開始して以来、無人運転システムによる計算サービス時間の拡大、M-200 HとM-180 両システムの疎結合 (LCMP : Loosely Coupled Multi-Processor) による運用の効率化など数々のレベルアップを行い、利用者のニーズに応じてきました。その成果は次表に示すジョブ処理件数、CPU 時間の変化によって明らかです。

(CPU時間はM-200 H基準)		
	ジョブ処理件数	C U P 時間
昭和 53 年度	41, 521 件	509 ^H (3ヶ月)
昭和 54 年度	155, 980	2, 405
昭和 55 年度	183, 840	5, 405
昭和 56 年度	224, 222 (見込)	6, 572 (見込)

当センターでは昭和57年度からのレベルアップのために以下のような増設を行います。

(1) M-200 H × 2 の疎結合システム

現在のM-180 (メモリ 4 MB) をM-200 H (メモリ 12MB) と置き換えることによりM-200 H (メモリ (12MB) × 2 の疎結合システムを構成します。これにより処理能力は約 1.5 倍になります。

(2) 磁気ディスクの増設 (4 スピンドル 1270 MB 分)

(3) レーザプリンタの導入

GPSL 利用による図形の出力や漢字、ギリシャ文字などを含む高品質の文字印字出力に使えます。利用方式はSOM, MTM, OPENMT と同じオープン利用です。

2. SOM (SYSOUT Manager) コマンドによるLP用紙の節約状況について

研究能率を上げるために検索と編集によって計算結果から必要データのみを取り出すこと、LP用紙の整理や保存スペースの確保などに神経を使わないようにすること、また値上がりが激しくセンター運営を圧迫しているLP用紙を節約することの一石三鳥を狙って昭和56年度から実施した出力結果取り出し方式 (SOMコマンド) による運用の成果が出ましたのでご報告

します。

期 間	S P O O L 総出力ページ	実際に出されたページ数	出力 L P 用紙箱数	削減率(%)
4 / 1 ~ 6 / 14	470, 418	221, 908	111	52. 8
6 / 15 ~ 8 / 30	436, 227	153, 408	77	64. 9
8 / 31 ~ 11 / 15	563, 537	186, 228	93	67. 0
計	1470, 182	561, 544	281	61. 8

利用者の皆様のご協力により全体的には削減率が当初目標とした70%に近い数字を挙げることができました。今後もこの数字をさらに上げるよう利用者の皆様のご協力をお願いいたします。

3. カラーグラフィックディスプレイの利用について

カラーグラフィックディスプレイとソフトウェア CANVAS の特徴は次の3点にあります。

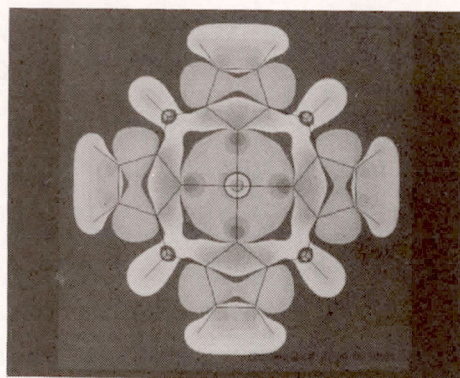
- ① 従来のベクトル作画タイプのソフトウェア（例GPSL）とほぼ同じ手続きで利用できる。
- ② 約 260,000 色までの色表現ができる。
- ③ 線画だけでなく面画（ぬりつぶし画）を表現できる。

①の特徴により、従来のグラフィックス利用者は特に容易に使用することができます。カラーで表現された図形・画像はスライドにして研究発表用を使用するとか、カラープリントにして教育用を使用する場合、非常に説得力ある分かり易い資料作りができます。基本ソフトウェア CANVAS についてはセンターに利用の手引きを用意していますので申し出てください。利用希望者は操作方法を説明しますのでセンターへご相談ください。また波動関数、電子密度などの等高図を作画される場合には CANVAS CONTOR プログラムも利用できます。

なおカラーグラフィックディスプレイにはハードコピー装置がありませんが接写のためのカメラを貸し出しますのでご利用ください。

4. 開発公募とプログラム情報の募集

新年度（57年度）も昨年度に続き、分子科学、基礎生物学及び生理学研究のために重要で汎用性の高いライブラリプログラムの公募を行っています。センターが採択したプログラムの整備または開発をされる方に対してある程度の謝金、旅費、CPU時間を配分します。単独では開発できないが協力者がいれば共同開発する意志の



分子軌道の等高表示

ある方、ご自分で開発する意志はないが有用なプログラムについて情報もしくは希望を持って

いる方もご遠慮なくお知らせください。センターが適任者に依頼して開発することができます。
応募または情報提供される方は、下記の事項を記入して当センター宛ご提出ください。

- (1) 所属，身分，氏名，連絡先，電話番号
- (2) 整備，開発，情報提供の別
- (3) プログラム，機能，規模，使用言語，機種など
- (4) プログラムの作成者，管理者など
- (5) 謝金，旅費，CPU時間の希望
- (6) その他ご希望

機 器 セ ン タ ー

今年度（57年度）から公開される中型装置3機種について御紹介します。

(1) レーザー分光分析装置

シンクロナス励起モード同期色素レーザー（繰り返し800 KHz，パルス幅8 ps），時間相関光子計数装置およびコンピューター装置から成る。微弱けい光のピコ秒減衰測定，サブナノ秒時間分解スペクトルなどの全自動測定が可能。時間分解けい光スペクトル測定の時間分解能～50 ps。

(2) 電気化学解析システム

広範囲の電気化学測定を可能にする完成市販品（PAR社370—4型）。標準的電気化学測定として，直流および交流ポーラログラフ，パルスポーラロ，パルス微分ポーラロ，サイクリックボルタメトリー，リニア掃引ボルタメトリー，電位および電流規制クーロメトリーなどが可能である。

(3) 高輝度分光光源システム

光学系は2.2 KW キセノン放電灯およびF2分光器から成る。制御系には，波長駆動，光源強度モニター，データ収集および処理（任意のアナログあるいはデジタル信号）を行なわせるコンピューターを装備。利用対象分野としては，光エネルギー変換，光電極反応，光化学反応など。

この3種の装置のうち(1)および(3)についてはセンターの利用技術開発プログラムの一環として開発を行ったものです。

機器センターではこれらの装置を分子研所内および全国の分子科学研究者の方々に利用いただけるよう配慮しておりますが、実験条件、使用形態などの条件についてあらかじめセンター職員との打ち合せをお願いします。

その他貸出用小型機器では1 GHz オシロスコープ (Tektrorix 7104) , トランジェントメモリー (Biomation 6500) , 1 GHz プリアンプ(HP 8447 D)などが新たに購入されました。小型機器については最近再編成を行ない、新たに所蔵機器リスト(第3版)を作製しました。

昭和56年度共同研究採択一覧

共同研究

◎極端紫外光源

○分子研	木村克美
分子研	渡邊誠
東京大原子核研	吉田勝英
大阪市立大	三谷七郎
東京大原子核研	片山武司
高エネ研	木原元央
京都大原子炉実験所	高見清
大阪市立大工	石黒英治
京都大理	加藤利三
理化学研	小林常利
東京工大理	小尾欣一
分子研	井口洋夫
分子研	小谷野猪之助
分子研	正畠宏祐
分子研	内田章
高エネ研	本郷俊夫

◎気相分子間化合物の分光学的研究のための分子線源の開発

○分子研	木村克美
分子研	正畠宏祐
分子研	小谷野猪之助
東京大理	朽津耕三
東京大教養	土屋莊二
東北大科学計測研	楠勲
富山医科薬科大	北川泰司
京都大工	手島光司
三重大工	川崎昌博

国立公害研

東北大理	福山力
東京大理	三上直彦
分子研	広岡知彦
分子研	花崎一郎
分子研(客員)	西信之
分子研	近藤保
分子研	宇田川康夫
分子研	阿知波洋次
分子研	田林清彦
分子研	田中健一郎
分子研	西山岩男
分子研	篠原久典
分子研	友田真二
分子研	佐藤健児
分子研	加藤立久

◎多重共鳴と多光子過程

○分子研	広田栄治
富山大理	高木光司郎
東京大工	清水富士夫
理化学研	高見道生
化学技術研	松村知
九州大理	田中武彦
金沢大理	大橋信喜美
分子研	斉藤修二

◎基本的有機化合物の光化学初期過程

○分子研	吉原經太郎
北海道大応電研	馬場宏明
北海道大応電研	太田信広
東京工大理	田中郁三

東京工大理	森 雄 次
東京工大理	市 村 禎二郎
分子研	花 崎 一 郎
分子研	山 崎 巖
分子研	中 島 信 昭
分子研	住 谷 實
分子研	村 尾 俊 郎
分子研	江 幡 孝 之

◎高い振動励起状態の動的性質と化学反応

○分子研	花 崎 一 郎
東京大教養	片 山 幹 郎
東京大薬	坪 井 正 道
東京大理	朽 津 耕 三
東京大教養	土 屋 莊 次
分子研(客員)	加 藤 肇
大阪大基礎工	山 本 直 登
分子研(客員)	近 藤 保
お茶の水女子大理	細 矢 治 夫
三重大工	川 崎 昌 博
東京大教養	渡 辺 肇
岡山大薬	玉 懸 敬 悦
理化学研	水 谷 由 宏
東京大薬	管 原 洋 子
分子研	中 垣 良 一
分子研	藤 山 常 毅

分子研	吉 原 經太郎
分子研	山 崎 巖
分子研	高 谷 秀 正
分子研	花 崎 一 郎
分子研	西 信 之
東京大教養	梶 本 興 亜
金沢大薬	伊 藤 道 也
東京大工	幸 田 清一郎
名古屋大理	金 丸 信 明
東北大理	伊 藤 光 男
大阪大基礎工	岡 田 義 男

◎Crown Ether などを含む新しい物性材料の開発研究

○大阪大工	三 川 礼
大阪大工	横 山 正 明
大阪大工	野 上 隆
大阪大工学研究科	藤 野 正 家
東京大教養	原 田 義 也
分子研(客員)	城 田 靖 彦
千葉大理	金 子 克 美
分子研	井 口 洋 夫
分子研	関 一 彦
分子研	斉 藤 軍 治

〔○印：提案代表者〕

協 力 研 究

〔前 期〕

脂肪酸 2 量体の分子軌道研究

遷移金属錯体の構造・結合性反応性に関する MO 研究

イオン分子反応に関するポテンシャル面

分子における相対論効果

京都大化学研	林 宗 一
熊 本 大 工	榊 茂 好
東北大科学計測研	楠 勲
電 気 通 信 大	松 岡 修

ab initio 計算による核酸の振動モードと分子内力場の研究

東京大薬 西村善文

励起金属原子の分子による消化過程に対するMCSCF計算

青山学院大理工 水谷公子

分子軌道法計算による芳香族分子の分子内力場の研究

東京大薬 平川暁子

低速電子線回折による結晶表面構造解析

大阪大工 塙輝雄

固体表面の電子構造の理論的研究

大阪大基礎工 永吉秀夫

DVX α 法による触媒表面電子状態の研究

理化学研 川合真紀

O, O₂ 及びO₃ とエチレン系のポテンシャル面のCI計算

大阪大基礎工 山口 兆

NH及びSとエチレンの付加反応に関する理論的研究

大阪大基礎工学研究科 藪下 聡

アダムスの局在軌道理論によるDV-X α 法の改良

東京大物性研 浜田典昭

HCOOHの赤外・マイクロ波分光

東京大理学系研究科 久世宏明

高分解能赤外分光

東京大薬 浜田嘉昭

ヒドラジン逆対称縦ゆれ吸収帯の微細構造

東京大薬 坪井正道

誘電体構造相転移のブリルアン散乱による研究

九州大理 人木駿郎

振動励起NO₂ラジカルのマイクロ波スペクトルの測定

相模中央化学研 谷本光敏

星間分子発見の可能性を探る

京都大理 鈴木博子

光散乱による高分子濃厚溶液の動的構造の研究

東京都立大理 土井正男

反射赤外分光法による吸着化学種からの赤外線発光スペクトルの研究

慶應義塾大理工 伊藤正時

非線形ラマン分光法による凝縮相の研究

東京工大資源化学研 広瀬千秋

水溶液中の部分構造のシミュレーション

京都大理 片岡洋右

ベンゼンの融解過程の研究

学習院大自然科学研究科 田路和幸

双イオン性両親媒性分子の配向集合状態における分子間相互作用機作

東京都立大理 清宮 懋

高分解蛍光励起スペクトルによる光解離反応の研究

日本大工 鈴鹿 敢

ケイ光法によるベンゼン置換体の高振動励起状態の研究

東京大薬 菅原洋子

相関分光法による電解質溶液構造の研究

広島大総合科学 大林康二

H₂NOラジカルの電子スピン共鳴ならびに発光スペクトル

東京工大理 村井久雄

レーザー誘起ケイ光法による準安定励起種の検出	東京工大理	石 渡 孝
多光子吸収を用いた簡単な分子の電子状態の研究	東京工大理工学研究科	松 見 豊
分子の解離励起による高励起原子・分子の生成	国立公害研	福 山 力
ピコ秒レーザーによる光合成モデル系の研究	三 重 大 工	佐 藤 博 保
カルボニル化合物の励起状態における分子内プロトン移動の研究	京 都 大 理	広 田 襄
レーザーを用いた光電気エネルギー変換の基礎過程	豊橋技術科学大	並 木 章
分子内ヘテロエキシマー系の電子移動	京 都 大 工	山 本 雅 英
有機分子の光イオン化機構の研究	名古屋大理	田 仲 二 朗
超高速時間分解スペクトル法による光化学反応初期過程の研究	東京都立大工	井 上 晴 夫
放射線化学の初期過程の研究のため芳香族分子の $S_n \leftarrow S_1$ 吸収の研究	東京大原子力研究総合センター	田 川 精 一
半導体表面に吸着した $\text{Ru}(\text{bipy})_3\text{Cl}_2$ の励起状態の挙動	東 邦 大 理	梶 原 峻
モリブデン錯体の光励起による空中窒素の固定	大 阪 大 理	中 村 晃
酸化物半導体の光触媒に関する研究	東 海 大 工	中 村 賢市郎
固体表面吸着分子の光脱離と化学反応	名古屋大工	伊 藤 憲 昭
固体表面吸着分子の光脱離と化学反応	名古屋大工	谷 村 克 己
固体表面吸着分子の光脱離と化学反応	名古屋大工	中 山 斌 義
高振動レベルへの光励起と特異光化学反応	大阪大基礎工	山 本 直 登
芳香族化合物の多光子吸収過程	三 重 大 工	川 崎 昌 博
有機化合物の陽イオンの光分解スペクトルの研究	北九州大文	竹之下 芳 也
高電導性有機化合物の合成とその物性	大阪大産業科学研	坂 田 祥 光
有機配位子で架橋した多核金属錯体の磁気化学的研究	三 重 大 教 育	芳 賀 正 明
極低温領域における固体誘電体の交流導電率の研究	豊橋技術科学大	小 崎 正 光
極低温領域における固体誘電体の交流導電率の研究	豊橋技術科学大	清 水 秀 己
一次元白金錯体の物性	京 都 大 理	窪 田 亮 三
混み合った構造を含む縮合多環芳香族炭化水素および含窒素同構体の合成と物性	東 邦 大 理	青 木 淳 治
縮合多環芳香族化合物の真空紫外域吸収スペクトル	千 葉 大 工	日 野 照 純
黒リン単結晶の電氣的、光学的性質	東京大物性研	城 谷 一 民

アザアロマティックスの合成と物性	明星大理工	岩島 聰
ハロゲン化ナフタリンの時間分割発光測定	東京工大理	市村 禎二郎
1,3,5-Tri-tert-Butylpentaleneの励起状態の研究	山梨医科大	神宮 寺守
水素分子クラスターの生成と検出	東京大理工	広岡 知彦
イオン-クラスター分子反応の研究	京都大工	手島 光司
光電子スペクトルの理論的解釈	慶應義塾大理工	岩田 末廣
有機化合物イオンの電子状態の configuration analysis	信州大工	鈴木 哲
クラスター分子内のエネルギー移動に関する研究	富山医科薬科大薬	森 佳洋
〔3 ⁿ 〕シクロファン類の分子内および分子間“サンドイッチ型”金属- π 錯体の合成		
	九州大理工	稲津 孝彦
不飽和三員環化合物の構造と特性	九州大工	谷口 宏
¹⁷ O NMRによる分子間相互作用の研究	静岡薬科大	片山 誠二
歪みの大きな単核および複核銅(Ⅱ)錯体のX線構造解析		
	岩手大教育	村上 祐
キラルなCo(Ⅲ)錯体による α -アミノ酸の不斉合成サイクル		
	東京大工	矢野 重信
コバルト(Ⅲ)ホスフィン錯体の構造に関する研究	名古屋大理学研究科	阿藤 正道
白金一次元化合物の結晶構造解析	京都大理学研究科	田中 昌子
テトラピロール類を配位子とする高位遷移金属錯体の分子構造		
	九州大工	松田 義尚
低スピン鉄(Ⅲ)錯体の常磁性シフト	名古屋市立大薬	後藤 正文
異常原子価錯体の合成と構造	愛知教育大	伊藤 晴子
花色素の分子会合に関する研究	名古屋大農	後藤 俊夫
金属錯体における中心金属の酸化数と結合性	福岡歯科大	三好 永作
光合成初期過程の理論的研究	静岡大教育	広田 文彦
高純度縮合芳香環化合物の合成と物性に関する研究	愛知教育大	小谷野 錦子
新しい不斉ジホスフィンの合成とそれを用いる高選択的不斉触媒反応の研究		
	埼玉大工	野平 博之
アルキル銅・ジメチルスルフィド錯体を用いる有機合成反応の開発と応用		
	豊橋技術科学大	西山 久雄
有機モリブデンおよびタングステン錯体の光反応	横浜国立大工	伊藤 卓
光学活性アルキルジホスフィン-Rh錯体触媒を用いる不斉反応		

	大阪大基礎工	谷 一 英
アザベンゼンにおける光異性化初期過程の研究	北海道大応用電気研	山 崎 トモ子
レーザー装置のためのデータ処理システムの開発	北海道大応用電気研	進 藤 善 雄
パルスレーザー用シャッターシステムの開発	学 習 院 大 理	小 谷 正 博

〔後 期〕

分子軌道法計算による芳香族分子の分子内力場の研究	東 京 大 薬	平 川 暁 子
生体分子の分子内力場	東 京 大 薬	西 村 善 文
イオン分子反応に関するポテンシャル面	東北大科学計測研	楠 勲
固体表面の電子構造の理論的研究	大阪大基礎工	永 吉 秀 夫
アダムスの局在軌道理論によるDV-X α 法の改良	東京大物性研	浜 田 典 昭
ヒドラジンの縮重反転運動の角運動量	東 京 大 薬	坪 井 正 道
赤外分光法によるメチルメルカプタンの内部回転の研究	富 山 大 理	中 川 邦 明
$^{15}\text{NO}_2$ の電子励起状態の研究	東 京 大 薬	浜 田 嘉 昭
星間分子発見の可能性を探る	名 古 屋 大 理	福 井 康 雄
不安定化合物 HSOH , H_2SO , CH_3Si , CH_2SH などのマイクロ波スペクトルの観測	相模中央化学研	谷 本 光 敏
多段階光励起による分子の電子励起状態の研究	東京工大理工学研究科	松 貝 豊
レーザー誘起ケイ光法による NO_3 ラジカルの研究	東 京 工 大 理	石 渡 孝
H_2NO ラジカルの電子スピン共鳴ならびに発光スペクトル	東 京 工 大 理	村 井 久 雄
分子の解離励起による高励起原子分子の生成	国 立 公 害 研	福 山 力
電子衝撃による高励起原子・分子の生成と反応	東京大理学系研究科	大 島 茂
偏光CARS分光法による液体の研究	東京工大資源化学研	広 瀬 千 秋
高分解能赤外分光による分子構造の研究	広 島 大 理	中 川 潤
固定高分子のブリルアン散乱	大 阪 大 理	小 林 雅 通
ミセルを含む液液界面内部構造の研究	東京都立大理	田 嶋 和 夫
反射赤外分光法による吸着化学種からの赤外線発光スペクトルの研究	魔應義塾大理工	伊 藤 正 時
一電子酸化されたフェロセン二核錯体 $[\text{Fe}(\text{II})\text{Fe}(\text{III})]$ の分子内電子移動機構と相転移	東京大物性研	今 野 美智子
クラスター分子の分子構造・電子状態の研究	慶應義塾大理工	茅 幸 二

相関分光法による電解質溶液構造の研究	広島大総合科学部	大 林 康 二
フォトンエコーによる分子緩和の研究	京 都 大 理	松 岡 正 浩
フォトンエコーによる分子緩和の研究	京 都 大 理	藤 田 雅 幸
フォトンエコーによる分子緩和の研究	京都大理学研究科	浅 香 修 治
ピコ秒レーザーフォトリシスによる電子伝達型分子集合体中の光誘起電荷分離過程の研究	九 州 大 工	長 村 利 彦
有機分子の光イオン化機構の研究	名古屋大理	田 仲 二 朗
超高速時間分割スペクトロスコープによる光化学反応初期過程に関する研究	東京都立大工	井 上 晴 夫
酸化物半導体の光触媒に関する研究	東 海 大 工	中 村 賢市郎
金属酸化物固体表面からの粒子の光誘起脱離	名古屋大工	中 山 斌 義
光触媒反応による炭酸ガスの還元	東 邦 大 理	梶 原 峻
モリブデン錯体の光励起による窒素の固定	大 阪 大 理	中 村 晃
メロシアン被覆電極の光電極反応	東京慈恵会医科大	入 山 啓 治
気相反応の外部磁場効果	理 化 研	林 久 治
孤立分子状態での分子内EDAにおける励起錯体及びエネルギー移動の動力学的研究	金 沢 大 薬	伊 藤 道 也
分子線による有機分子の解離反応の研究	富山医科薬科大薬	北 川 泰 司
有機分子の真空紫外分解過程	三 重 大 工	川 崎 昌 博
ハロゲン化オキサリルの真空紫外吸収スペクトル及び電子励起に伴うハロゲン原子離脱過程	九 州 大 理	島 田 良 一
多光子励起による高励起状態の反応の研究	京 都 大 理	広 田 襄
分子陽イオンの生成及び分解過程の研究：(IV) トルエン、エチルベンゼン及びスチレンの多光子イオンと光分解	北 九 州 大 文	竹之下 芳 也
機能界面の物理化学的研究	大阪大基礎工	山 本 直 登
半導体電極の電解発光と光電極反応の機構	大阪大基礎工	中 戸 義 禮
高電導性有機化合物の固体物性	大阪大産業科学研	坂 田 祥 光
$n-C_{44}H_{90}$ 及びポリエチレンの固相及び液相光電子スペクトル	千 葉 大 工	上 野 信 雄
極低温領域における固体誘電体の交流電導率の研究	豊橋技術科学大	小 崎 正 光
混み合った構造を含む縮合多環芳香族炭化水素および含窒素同機体の合成と物性	東 邦 大 理	青 木 淳 治

アザアロマティックスの合成と精製	明星大理工	岩 島 聰
一次元白金錯体の物性	京 都 大 理	窪 田 亮 三
1-アザアズレンおよび1,3-ジアザアズレンの励起状態の研究		
	山 梨 医 科 大	神 宮 寺 守
イオンクラスター分子反応の研究	京 都 大 工	手 島 光 司
水素分子クラスターの生成と検出	東 京 大 理	広 岡 知 彦
イオン分子反応による星間雲分子生成のシュミレーション		
	東京工業大理	山 崎 秀 郎
塩素置換芳香族化合物の三重項状態	東京工業大理	市 村 禎二郎
有機化合物のイオン化状態のConfiguration Analysis.	信 州 大 工	鈴 木 哲
クラスター分子内のエネルギー移動に関する研究	富山医科薬科大薬	森 佳 洋
^{17}O -NMR を用いた溶解ヘテロポリ酸の動的構造の研究	名 古 屋 大 工	ト 部 和 夫
CIDNP法によるミセル中のベンゾフェノン類の光化学反応の研究		
	理 化 研	坂 口 喜 生
多座配位子を含む遷移金属錯体の構造	金 沢 大 教 養	関 崎 正 夫
キラルな大環状テトラミンCo(Ⅲ)錯体の立体化学と不斉反応への利用		
	東 京 大 工	矢 野 重 信
白金一次元化合物の構造解析	京都大理学研究科	田 中 昌 子
金属錯体の電子状態	名古屋大教養部	佐 野 充
有用な特性をもつ金属錯体の開発— α ・ジイミン骨格をもつ金属錯体		
	愛 知 教 育 大	伊 藤 晴 子
核磁気共鳴法によるイオン対の動的構造の研究	名古屋大理学研究科	益 田 祐 一
金属錯体における中心金属の酸化数と結合性Ⅱ	福 岡 歯 科 大	三 好 永 作
光合成初期過程の研究	静 岡 大 教 育	広 田 文 彦
メタンのハロゲン置換体の分子構造の理論的研究	北 海 道 大 理	竹 下 幸 一
アザベンゼンにおける分子内電子緩和の研究	北海道大応用電気研	藤 田 昌 久
Edge Excitation Red Shiftと溶媒の再配向緩和過程	東 北 大 理	安 積 徹
ピコ秒分光測定による外部重原子効果の機構	東北大理学研究科	清 水 裕 子
シアニン色素分子における分子会合に関する電子スペクトルの研究		
	名 古 屋 大 理	山 崎 トモ子
遷移金属錯体の特性を生かした有機反応の開発	名 古 屋 大 理	渡 辺 祐 一
液体クロマトグラフィーによる光学分割に関する研究	大阪大基礎工	岡 本 佳 男

光学活性ホスフィン類の合成とその不斉触媒反応への応用

	埼玉大工	野平博之
興味ある物性をもつ高純度縮合芳香環化合物の合成	愛知教育大	小谷野 錦 子
ハロアリルシランを用いる有機合成反応の開発と応用	豊橋技術科学大	西山 久 雄
Rh (I) - ジオスフィン錯体触媒を用いる 1,3 - 水素移動反応に関する研究		
	大阪大基礎工	谷 一 英
ピレン結晶の相転移	大阪市立大	戸村 正 夫
分子化合物結晶の電荷移動型励起子の研究	東京大工	十倉 好 紀

招へい協力研究

〔前 期〕

有機金属化合物の安定性と反応性	東京工業大資源化学研	山 本 明 夫
遷移金属錯体の構造, 安定性, 反応性	大阪大基礎工	大 塚 齊之助
短寿命分子の高分解能分光に対する分子線技術の応用	東京大教養	桜 井 捷 海
高感度半導体ポロメーター検出器の開発	電気通信大	伊 理 武 男
セレノキサンテン誘導体の構造と ^{77}Se NMR	岐阜薬科大	堀 幹 夫
光励起した金属錯体の酸化還元挙動	東 北 大 理	佐々木 陽 一
NMRシフト試薬を用いる軸性キラリティをもつ化合物の光学純度及び絶対構造の決定		
	東 北 大 教 養	山 口 勝 三

〔後 期〕

分光用新型レーザーの開発	電気通信大	宅 間 宏
半導体の光触媒作用と有機合成	奈良工業高等専門学校	泉 生 一 郎
光音響法を用いた高励起振動状態に関する研究	東京大教養	片 山 幹 郎
化学反応によって生成した分子の内部エネルギー分布に関する研究		
	大阪大理	桑 田 敬 治
光化学反応におよぼすクラウンエーテルの錯形成効果	早稲田大理工	多 田 愈
光励起した金属錯体の酸化還元挙動	東 北 大 理	佐々木 陽 一

研 究 会

〔前 期〕

光エネルギーの化学的変換における高効率光電荷分離を探索研究会

東 京 大 工 藤 嶋 昭

化学反応への衝突論的アプローチ

北 海 道 大 理 大 野 公 男

液体及び溶液における動的構造

東 京 都 立 大 理 土 井 正 男

〔後 期〕

高機能性遷移金属錯体の合成と反応

分 子 研 高 谷 秀 正

金属錯体における分子内および分子間相互作用

東 北 大 理 佐々木 陽 一

UVSORーストレージリングと観測システムの設計

分 子 研 木 村 克 美

分子科学の理論における化学と物理の接点

分 子 研 中 村 宏 樹

バイブロニック系における緩和および共鳴二次光放出過程

東 北 大 理 安 積 徹

ヘテロ原子と有機金属錯体の反応の接点の探究

広 島 大 理 秋 葉 欣 哉

スーパーコンピューターとその分子科学への応用

分 子 研 柏 木 浩

分子研コロキウム

第 141 回 2 月 19 日

Prediction of Electronic Spectra of Small Molecules by ab initio Calculations.
(S. D. Peyerimhoff; Univ. of Bonn)

第 142 回 2 月 26 日

分子間エネルギー移動について (森 雄次)

第 143 回 3 月 4 日

The Photodissociation of Anthracene Photodimer
(K. Grellmann; Max Plank Institute, Goettingen)

第 144 回 3 月 11 日

メチルラジカルの半導体レーザー赤外高分解能分光 (広田 栄治)

第 145 回 3 月 18 日

私の「部分と全体」—分子研への長い道 (赤松 秀雄)

第 146 回 3 月 25 日

環状ポリキノン合成の試みと中間体の二、三の性質 (西沢 義則)

第 147 回 4 月 8 日

Photoselective Chemistry
(R. D. Levine; Hebrew Univ., Jerusalem)

第 148 回 4 月 15 日

シンクロトロン放射 (SOR) の利用 (三谷 洋興)

第 149 回 4 月 22 日

N₄-Chelates as Sensitizer and Catalysts for H₂-Evolution through Water
Photolysis
(D. Wohrle; Univ. Bremen)

第 150 回 5 月 16 日

Local Modes: A Description of Highly Vibrationally Excited Molecules and a
Probe of Molecular Conformations
(B. R. Henry; Univ. Manitoba)

- 第 151 回 5 月 13 日
励起子相互作用円二色性と分子の絶対構造 (原田 宣之)
- 第 152 回 5 月 20 日
光触媒を用いた水からの水素発生 (可視光化を中心として) (橋本 和仁)
- 第 153 回 5 月 27 日
多環式芳香族炭化水素—アルカリ金属錯体の水素吸蔵と物性 (榎 敏明)
- 第 154 回 6 月 3 日
ゼーマン効果を用いた原子分子の分光分析 (小泉 英明; 日立 那河)
- 第 155 回 6 月 10 日
磁気共鳴によって見える励起三重項状態の分子は? (馬場 正昭)
- 第 156 回 6 月 17 日 (1981)
 π -Bonding in Organosilicon Compounds
(T. J. Barton; Iowa State Univ.)
- 第 157 回 6 月 24 日
He(I) 光電子スペクトルとその帰属の編集をふりかえて (木村 克美)
- 第 158 回 7 月 1 日
CARS 及び CSRS における共鳴効果 (五十嵐良作)
- 第 159 回 7 月 8 日
多光子イオン化光電子分光 — 光電子エネルギー分布から何がわかるか
(阿知波洋次)
- 第 160 回 7 月 15 日
スチルベン of 光異性化反応 — ピコ秒領域における研究 (住谷 実)
- 第 161 回 7 月 22 日
フリーラジカルの高分解能分光 — マイクロ波分光を中心として (遠藤 泰樹)
- 第 162 回 9 月 2 日
Internal Rotation in Ethylamine and Allylcyamide
(I. Botskor; Univ. Ulm)
- 第 163 回 9 月 9 日
Hydrogen Bonding Effects on Carbazole Photolysis in Solution
(M. M. Martin; Univ. Paris-Sud)
- 第 164 回 9 月 30 日
内部状態を選別したイオン—分子反応 (田中健一郎)

- 第 165 回 10月 7 日
時間分解ラマン分光学の最近の進歩 (J. A. Koningstein; Carleton Univ.)
- 第 166 回 10月14 日
Relativity and the Chemical Bond – A Semi-Empirical Approach
(L. L. Lohr; Univ. Michigan)
- 第 167 回 10月28 日
分子内回転はどこまで相関を持ち得るか (岩村 秀)
- 第 168 回 11月 4 日
高励起二原子分子の動的過程 (中村 宏樹)
- 第 169 回 11月11 日
加速器内ビームの不安定性とランダウ減衰の話 (春日 俊夫)
- 第 170 回 11月18 日
光散乱スペクトルと非電解質水溶液の部分構造 (加藤 直)
- 第 171 回 12月 9 日
融解状態におけるポリエチレン及びそのモデル化合物の電子物性 (関 一彦)
- 第 172 回 12月16 日
Kinetic Processes at Solid Surfaces
(W. Brenig; Technical Univ. Munich)
- 第 173 回 12月23 日
Dissociative Channels in Photoionization
(P. M. Guyon; Univ. Paris-Sud)

所 内 ニ ュ ー ス

○ 人事異動（56. 4. 2～57. 2）分子研関係 リサーチ・フェローを除く

昭和56年5月16日	採用	加 藤 眞 治	技術課装置開発技術係
昭和56年8月16日	転任	中 村 宏 樹	分子基礎理論第二部門教授 (東京農工大・工学部・助教授から)
昭和56年9月1日	採用	田 路 和 幸	技術課分子構造研究系技術係
昭和56年9月16日	転任	春 日 俊 夫	装置開発室 助教授 (高エネ研・助手から)
昭和56年9月30日	辞職	北 浦 和 夫	分子基礎理論第三部門助手 (大阪市立大・理学部・助手へ)
昭和56年11月18日	死亡	藤 山 常 毅	分子動力学部門 教授
昭和56年11月30日	辞職	市 村 憲 司	物性化学部門 非常勤の講師 (富山大学・トリチウム科学センター・助手へ)
昭和57年1月1日	転任	早 坂 啓 一	技術課 第三技術班長 (東大・物性研・助手から)
昭和57年1月16日	転任	塚 田 捷	分子基礎理論第一部門 助教授 (東大・理学部・助教授へ)
昭和57年1月16日	採用	高 塚 和 夫	分子基礎理論第二部門 助手

編集後記

本号から分子研レダーズの編集は、4名の編集委員が担当することになりました。本年度（昭和56年度）はNo. 10として出版します。

本号の冒頭の「視点」には新所長の長倉三郎先生に抱負を述べて頂きました。

今年度は、福井謙一先生のノーベル化学賞受賞と文化勲章受賞が発表され、広く日本中がわきましたし、さらに森野米三先生が文化功労者の顕賞を受けられ、わが国の分子科学は2重の大きな喜びに接することができました。これらの朗報が編集委員の直前に入りましたので、本号に早速お祝いの記事を掲載致しました。当編集委員会といたしましても、心よりお慶び申し上げたいと存じます。

昭和56年11月19日、藤山常毅教授（分子研）が不幸にも突然逝去された。ここに重ねて同氏の御冥福をお祈り申し上げたい。

編集委員 木村 克美（代表）
岩村 秀
齋藤 修二
花崎 一郎

分子研レターズ No. 10

発行年月	昭和57年3月
印刷年月	昭和57年3月
発 行	岡崎国立共同研究機構 分 子 科 学 研 究 所
編 集	分子科学研究所共同研究専門委員会
印 刷	(有) 第 一 プ リ ン ト 社

◎ 交 通 機 関

東京方面より

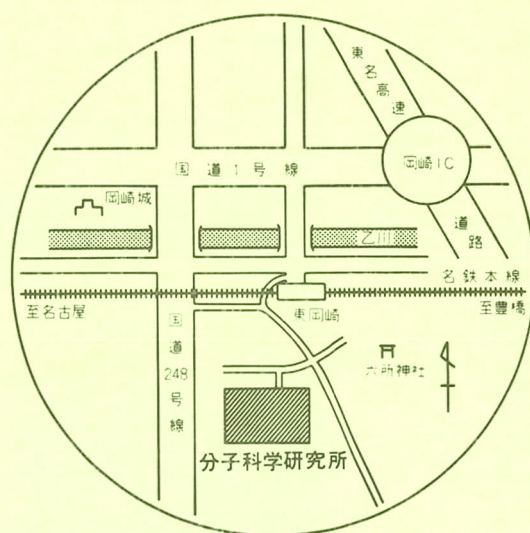
新 幹 線 豊橋駅下車

名鉄本線 - 豊橋 東岡崎 (所要時間25分)

大阪方面より

新 幹 線 名古屋駅下車

名鉄本線 - 名古屋 東岡崎 (所要時間35分)



岡崎国立共同研究機構

分子科学研究所

〒444 岡崎市明大寺町西郷中38

代表電話番号〈0564〉54-1111

《時間外直通電話番号》

理 論 研 究 系 (53) 4 6 6 0
 分 子 構 造 研 究 系 (53) 7 3 2 2
 電 子 構 造 研 究 系 (53) 7 3 2 4
 分 子 集 団 研 究 系 (53) 7 3 2 6
 相 関 領 域 研 究 系 (53) 5 7 2 1
 電 子 計 算 機 セ ン タ ー (53) 5 7 2 2
 極 低 温 セ ン タ ー (53) 5 7 2 0
 機 器 セ ン タ ー (53) 5 7 2 7
 化 学 試 料 室 (53) 5 7 2 8
 装 置 開 発 室 (53) 5 7 2 9

