

INSTITUTE

FOR

MOLECULAR

SCIENCE

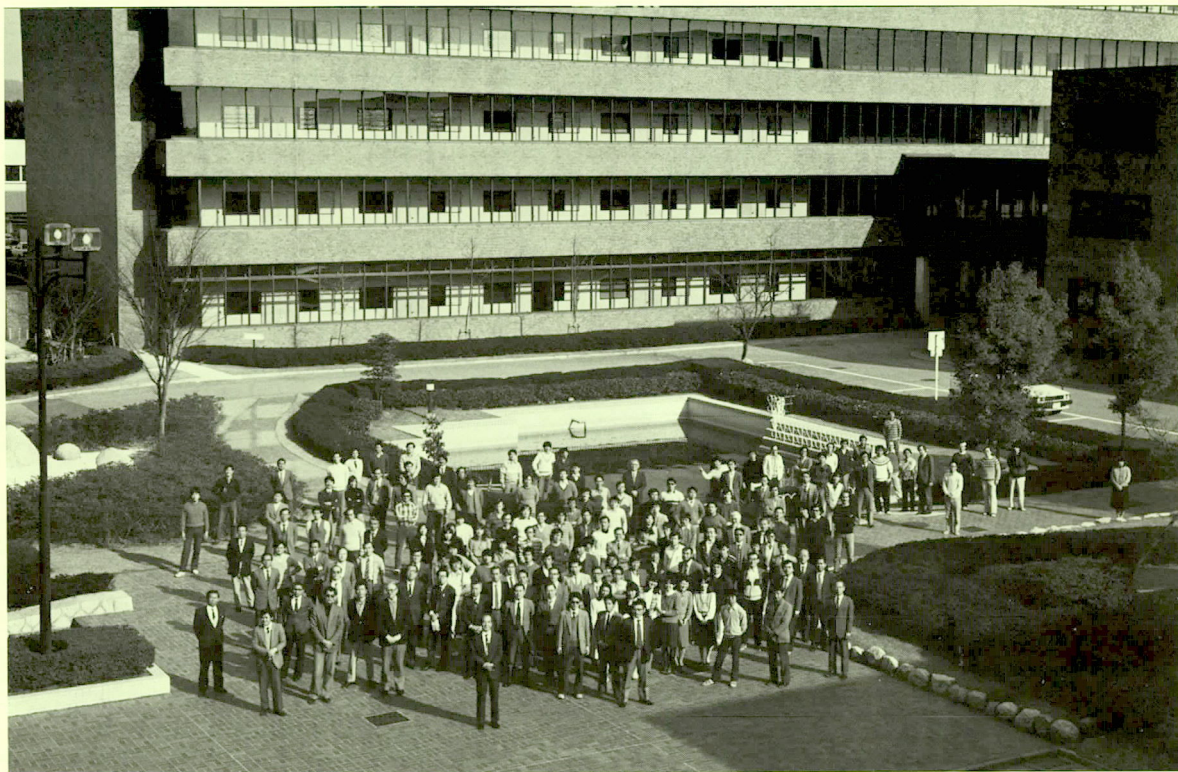
分子科学研究所

分子研

レターズ

昭和61年3月

NO. 14 '86



分子科学研究所創設10周年の記念写真
(昭和60年3月15日撮影)

目 次

| | | | |
|-----|-------|---------------|---|
| 視 点 | 失われた時 | 北大応電研 馬 場 宏 明 | 1 |
|-----|-------|---------------|---|

レ タ ー ズ “分子科学 次の10年に期待する”

| | | |
|-------------------------|--------------|---|
| 1986年 私のメモ | 京大理 志 田 忠 正 | 3 |
| 分子認識の科学の誕生 | 京大工 田 伏 岩 夫 | 4 |
| 温故知新 | 東大教養 土 屋 莊 次 | 6 |
| Born-Oppenheimer 近似を超えて | 東大理 浜 口 宏 夫 | 7 |
| 年々歳々花相似, 歳々年々人不同 | お茶大理 細 矢 治 夫 | 8 |

外国人研究員の印象記

| | | |
|---|----------------------------|----|
| Report on Visiting Professorship at IMS | シカゴ大学 Gerhard L. Closs | 10 |
| Progress and Opportunities | ベルリン工科大学 Ernst Lippert | 13 |
| Sixth Months at IMS | フロリダ大学 Willis B. Person | 15 |
| Impressions of a Visiting Scientist | ワシントン大学 Weston T. Borden | 18 |
| People Make Japan | ニューヨーク州立大学 David M. Hanson | 20 |
| Is There a Japanese Scientific Style? | リエージュ大学 Pierre Laszlo | 21 |

| | | |
|----------------|---------------------|----|
| 10周年記念事業報告について | 分子研 井 口 洋 夫・廣 田 榮 治 | 23 |
|----------------|---------------------|----|

| | | |
|--------------------------------|--|--|
| 分子研創設10周年記念出版物—「十年の歩み」・「分子の世界」 | | |
|--------------------------------|--|--|

| | |
|-------------|----|
| 分子研 木 村 克 美 | 28 |
|-------------|----|

研究室紹介

| | | |
|---------------|------------------|----|
| 分子基礎理論第一部門(Ⅱ) | 大 峯 巖 | 30 |
| 錯体化学実験施設 | | |
| 錯体合成部門(Ⅰ) | 武 居 文 彦 | 32 |
| 錯体合成部門(Ⅱ) | 手 老 省 三 | 34 |
| 機器センター | 山崎 巖・木村 啓作・玉井 尚登 | 36 |

岡崎コンファレンス報告

第22回 岡崎コンファレンス

| | |
|--|--|
| EXAFS and Its Application to Materials Science | |
|--|--|

| | |
|-------------|----|
| 分子研 宇田川 康 夫 | 40 |
|-------------|----|

第23回 岡崎コンファレンス

| | |
|--|--|
| Ten Years in Molecular Science: Progress and Opportunities | |
|--|--|

| | |
|---------------------|----|
| 分子研 廣 田 榮 治・井 口 洋 夫 | 43 |
|---------------------|----|

| | |
|--|--------------------------|
| 第24回 岡崎コンファレンス | |
| Future Prospect in Quasi-One-Dimensional Systems-Charge Transfer and Electron-Phonon Interaction | |
| | 分子研 那 須 奎一郎 47 |
| 第25回 岡崎コンファレンス | |
| Dynamic Processes of Photoisomerization | |
| | 金沢大薬 伊 藤 道 也 52 |
| 日英科学協力事業報告 | |
| 分子計算化学に関する日英シンポジウム | 分子研 諸 熊 奎 治 58 |
| 研究会報告 | |
| (昭和59年度) | |
| 均一系触媒作用の基礎過程とその制御 | 豊橋技科大工 伊 藤 健 児 62 |
| 超微粒子の生成とキャラクタリゼーション | |
| | 名大理 和 田 伸 彦 63 |
| 分子クラスター | 慶大理 茅 幸 二 65 |
| 赤外光パルスレーザー技術の開発と物性への応用 | |
| | 分子研 三 谷 洋 興 68 |
| スーパーコンピュータの効果的・創造的利用のために | |
| | 分子研 柏 木 浩 68 |
| (昭和60年度) | |
| 水素吸着グラファイト-アルカリ金属層間化合物の合成と物性 | |
| | 分子研 榎 敏 明 70 |
| 有機薄膜の分子設計と機能 | 広島大生物生産 岡 田 正 和 73 |
| 分子集合体における構造と光エネルギー緩和 | |
| | 分子研 丸 山 有 成 75 |
| レーザー化学と励起分子の動的過程の新展開 | |
| | 分子研 西 信 之 77 |
| 有機カゴ型化合物のつくる分子場と特異機能の研究 | |
| | 阪大産研 三 角 莊 一 80 |
| 金属多核錯体触媒とクラスター触媒の接点に関する諸問題 | |
| | 分子研 斎 藤 一 夫 82 |
| 昭和60年度 共同研究採択一覧 | 85 |
| 分子研コロキウム | 97 |
| 編 集 後 記 | 101 |

視 点

失 わ れ た 時

北大応電研 馬 場 宏 明

1868年（明治元年）は近代日本の出発点とされている。しかし、この年は戊辰戦争という変革のための内戦に明け暮れ、それにつづく混迷期をへて、文明開化・殖産興業などで表現される日本の近代化が本格的に始まったのは、数年後のことであった。

1868年を科学史から見ることは興味深い。4年前の1864年に **Maxwell** が電磁場理論を大成し、2年前には **Kekulé** がベンゼンの環状構造式を提出し、**Nobel** がダイナマイトを発明している。**Mendeleev** が元素の周期律を発見したのは、翌年の1869年であった。このように明治初年は、近代科学の基礎づくりがほぼ終った時期にあたる。他方、現代の花形である電子はまだ発見されず、光はもっぱら波であり、量子論はその片りんも認められない。いいかえれば、明治のはじめは世界の科学・技術が長い助走の期間を終えて、急速にジャンプ体勢に移ろうとする時期にあった。日本の近代化は絶好のタイミングで始められたといえる。それから100年余りたった最近では、先進国に追いつき追いこす政策が（技術面で）達成されたという認識に立って、基礎研究の強化、原理に立ち返った独創的な科学技術の創出が国の新しい政策として提案されるようになった（1984年11月、科学技術会議答申）。

ところで自然科学が1868年頃の状況になるまでには、ギリシアから錬金術時代までは別として、たとえば **Boyle** の実証的要素観の提唱（1661）や **Newton** の万有引力発見（1665）の年からかぞえて、ほぼ200年を必要とした。**Lavoisier** の質量保存則（1774）、**Dalton** の原子説（1803）、**Avogadro** の分子説（1811）からでも、かなりの年月がたっている。この間、西欧の科学者は真実の自然を知ろうとするさかんな探求心に導かれて、試行錯誤をくり返ししながら、少しずつ科学の基礎原理を明らかにしてきたのである。その頃の研究者は、国家の政策的援助を受けることが少なかった。大学の教職さえ持たない独立の個人や研究を熱愛する素人によってなされた発見も多いと科学史は教えている。

原理に立ち返った独創的科学に必要な個人レベルの創造性は、上に述べたような政策以前の市民的環境において、最もよく育つと期待される。その意味で、**Boyle** や **Newton** から明治初年までの200年の時は、かけがえのない貴重なものであったが、その間の日本はまさに鎖国状態にあった。実際、3代将軍家光が鎖国令を出したのは1635年頃である。一般に科学の研究は

積み上げ式で進歩するので、200年前にもどることはもちろん意味をなさない。しかし今後わが国が科学・技術の研究を進めるさいには、先に述べた200年のいわば“失われた時”を十分に意識して、少なくとも精神として、この時を回復するようにつとめる必要があると思われる。

レターズ

分子科学，次の10年に期待する

1986年 私のメモ

京大理 志 田 忠 正

私は化学科を卒業したが新旧交代期の理研に入り，物理学者の中で唯一人の化学者として放射線照射効果の物理・化学効果の研究をほとんど手探りの状態で始めた。その後，京都に移るまでは研究室に閉じ込もっている時間が長かったため分子科学の将来についての視野には限界があるものと自覚している。表題の期待は誰に対するものかと一瞬迷ったが結局，自分の視野の範囲で自分自身に対する心覚えをノートすることにする。

私自身は実験家の立場からこれまで通り分子およびその集合系の未知の性質を発見し，また分子を記述する理論体系の不完全な部分を浮彫りにする実験データを提示していくつもりであるが現在，意識している二，三の問題はつぎのとおりである。

われわれ化学者が扱っている分子の波動関数がエネルギーについて変分法で求めたものであることに基く当然の結果ではあるがたとえば原子核上の電子スピン密度や分子の重心から少し離れた領域での波動関数の状況といった波動関数の局所的な情報の精度が悪いことには今更ながら驚かされる。スピン密度のようなごく基本的な分子の属性がたとえば Davidson のような腕家ですら “The best current calculations were unable to resolve the discrepancy ...” (D. Feller, E.R. Davidson, *Theor. Chim. Acta* **68**, 57 (1985)) と告白している。上の不一致については私自身ここ数年，気にかかってきたことである。Davidson が引用している実験データや理論が分子研（広田氏ら）や京大（中辻氏ら）の成果であることにも感慨を覚える。

ところでハレー彗星の尻尾についてはかなりのことが分っているとのことであるが分子の波動関数の尻尾については，たとえば Hopfield はつぎのように告白している。 “If one had to rank the danger of the B.O. and F.C. approximations when applied to a Golden Rule formulation of electron transfer theory, one should put the B.O. approximation at the top of the list because of its incorrect functional form at the large electron distance (D.N. Beratan, J.J. Hopfield, *J. Chem. Phys.* **81**, 5753 (1984)).” このことも私のように分子間の電子移動に関心のある実験家にとって大変気になる問題である。電子移動に限らず，摂動論の適用が疑問視さ

れる問題にも黄金則に基く一次摂動論による取扱いが幅を効かしているような気がするのは私の理解不足であろうか。

放射線と分子の相互作用を解き明かそうとすると目に前にたちはだかる問題は気が遠くなるくらい大きい。多中心、多電子系としての分子の励起状態、とくに連続状態について実験家の指標となる理論が熟成され、また逆に実験が理論の不備を明確に指摘するようになるのは何時のことであろうか。液体の放射線励起などで観測される電離現象や溶媒和電子についてはこれまでに膨大な実験データといろいろなモデルが提出されてきたが本質についてどこまで理解できたかと問われると心許ない（この点に関して加藤重樹氏から D. Chandler の論文 "Quantum Theory of Solvation" (*J. Phys. Chem.* 88, 3400 (1984)) を参照するように奨められた）。

かつて地球上にあった未踏の地というものはもはや無いに等しいが分子の世界には底の知れない深淵や雲を突く絶壁にも似た問題が身近かに山積しており、それらは新しい実験事実がつつぎに出されていく中でわれわれにこれまで以上に挑戦的に迫ってくるように思われる。私に関心のある高励起状態の分子や凝縮系での分子動力学などの分野に限っても今後10年の間に実験、理論両面での目覚ましい進展を期待したいし、そのためにはいろいろな役割を分担した研究者の間で赤裸々な告白を含めたコミュニケーションが益々大切になるであろう。分子研が従来にも増してそのような交流の場となることを期待する。

分子認識集団の科学の誕生

京大工 田 伏 岩 夫

昔、分子は孤であった。即ち分子の科学とは理想溶液や理想気体で語られた仮空の物語りであり、真空中に置かれた分子1個、あるいは無作為に近い選択で採った少数複数種の分子1個宛に就いての科学であった。それが「趣味的」と世間から見られたのは、現実には分子の科学が、生命の成り立ち、衣食住、エネルギーすべての根源であるにもかかわらず、その理想状態像があまりにも現実像とかけ離れていて、これをつなぐ論議が強弁と思えたからである。

分子科学、次の10年は疑いもなく、この分子の現実像に向って、真空中に浮ぶ分子像から橋をかけることである。次の10年には、過去生命科学とエレクトロニクスの2領域が急速に進展し、粗放的なこれら科学に対して、初めて精密化の完成した分子科学の光をあてることが可能となるだろう。

そのことは必ずしもバイオエレクトロニクスという、上記2つの成長領域の短絡的な結合を意味しない様に思われる。粗放的な科学の単純結合では粗放科学しか生み得ないからである。従ってバイオエレクトロニクスはある程度の明るい未来を有するものの、その科学としての昇華は極めて限定されたものとなろう。

分子科学の高い精密度はむしろ、直接に生命科学と、また直接にエレクトロニクスと結合する局面を拓いてこそ、極めて明るいといえる。この2つの粗放科学では今一つの共通概念が要求されている。それは高秩序の分子集団の科学である。生命の基本単位は蛋白質や核酸のレベルではあり得ず、細胞である。ここで初めて「生命力」が定義できるからである。一方エレクトロニクスにおいても「素子」を小型化し、高機能化して行くことで、ブレイク・スルーを得るのが将来の発展である。明らかに細胞も素子も共に、高秩序分子集団である。今から1歩でも前進する為には、これら2領域は分子科学の精密さを必要としている。

従って今後10年の分子科学は、真空中に浮かぶ小数分子の物性・化学性の厳密な理解(現状)を踏まえて、経験的ではなく、先験的に、高秩序分子集団の物性・反応性を論じるように変ぼうせねばならない。それが在来の分子科学の応用でまかなえないのは、在来分子科学では共有結合や結晶場のような単純均一力場でしか物を視得ないし、従って電極-素子接合面や、細胞界面・チャネルのような、極めて重要な問題や、分子流束と情報流束の変換に見られるような、新しいヘテロなダイナミックスに立ち向う^{すべ}術を会得していないからである。

古典力場の単純思考を捨てて、分子集団のヘテロな高秩序構造を理解しかつヘテロなダイナミックスの先験解を得る為には、しかし基本的に理解・実証すべき多くの事柄がある。まず無限分子集団でなく、ある程度大きい分子数の限定分子集団について、新しい力場・ダイナミックスを知るべく、綿密で正確な物性の経時変化の測定が必要となる。この分子集団のサイズがミクロンをかなり下回ると、現在の物体に対する測定法の威力は急速に減少する。また100Åを上回り始めると、均一系のスペクトロスコピーが無効になり始める。しかし、細胞内の各種小器官や、超極限素子を攻めるには、まさにこの領域での綿密で正確な物性測定が要求される。

これはほんの一例であって、多くの局面で新しい分子科学の指導原理・理論づけ・精密測定法が要求される。それは一大学でまかないきれものではない。今後10年、分子科学が次第に巨大科学化の途をたどる中で、理論・実験中枢の必要性は増し続けるであろう。その中核センターとしての分子研の重要性は測り知れず大きい。

温 故 知 新

東大教養 土 屋 莊 次

私の学生時代の化学の講義の一つで、最初の時間に温故知新と黒板に書かれた先生があった。先生の講義は、歴史を追う形で進み、生意気盛りの私は何故そんな古いことから話すのだろうかと少々反発を感じたことを記憶している。しかし、分子科学の将来について考えよというテーマを与えられると、やはり、過去と切り離してそれを考えられそうもない。おそらく、この分野では革命的に新しい研究課題が生れる可能性は少ないからであろう。

分子科学の中でも私が関心を持つ反応研究について振り返ってみると、この20年間で反応についての理解はずい分変わったものだと思う。化学反応のかつての標準的な教科書、たとえば、Frost & Pearson とか Laidler といった人の本では、反応を基本的に Arrhenius の速度式で理解しようとしている。もちろん、反応を分子素過程として考えようとした人は多くあった。中でも Michael Polanyi の Na 希薄炎の実験（1920年代初）は注目に値すると考えている。この実験は、反応を原子分子の相互作用として記述する裏付けとなるものであるが、本当の意味でこの研究成果が花を開いたのは1960年以降のように思える。丁度その時期は、Michael の子息 John が赤外化学発光の測定を開始した直後であるし、レーザーの開発が始まった時点でもある。赤外化学発光や当時水準を高め始めた分子線による反応研究は、Michael Polanyi の Na 希薄炎の実験が原点となる流れに沿っていると思う。

1960年少し前に反応研究の転回点があったというのは、私の独断かも知れないが、それは何故であろうか。それは、化学反応論に内在する必然的な方向であったと言えば、確かにそうであるが、それだけではないように思う。この時代は、米国ではスプートニクギャップが叫ばれた頃で宇宙技術のぼっ興期に当る。ロケットや衛星の大気圏再突入に関係して燃焼やプラズマなどの高エネルギー気体の流体力学の研究が盛んに行われた。ここで起こる化学反応は当然 Arrhenius の式で表わされるようなものではない。また、60年代初めはレーザー誕生直後の開発の時代である。化学反応を応用した化学レーザーの可能性や分子緩和を応用した分子レーザーに関心が集っていた。このように、化学反応やエネルギー移動の分子素過程の研究を推進する環境が整っていたように思える。なお、60年代の反応研究の方向は、70年代に入って「レーザー化学」として実を結ぶことになる。

次の10年を考えるのに四半世紀も昔のことばかり書いてしまった。それは、今後のことを避けたい気持ちが働いたためであることは否定できない。しかし、もし、分子科学の分野の中で、

新しい概念をもたらすような発展があるとすれば、昔のことが参考になるのではないかと思う。つまり、その課題がその学問分野の発展の必然的な流れの中にあり、また、その発展を要求するいろいろな周辺分野、たとえば、生命科学、情報科学、エレクトロニクス、エネルギー科学など、がいくつもあることが、その分野の活性化をもたらす必要条件であると考ええる。おそらく、10年後の分子科学は、現在私どもの考えているものと違った部分を持つようになるであろうし、また、そうであらねばならぬと思う。

最後に、目先のことだけしか考えられない様な状況下にある所へ将来のことを考える機会を与えて下さった編集者に感謝します。

— Born-Oppenheimer 近似を超えて —

東大理 浜 口 宏 夫

分子科学の次の10年を考えるにあたって、月並みではあるが前の10年を振り返ってみた。話の展開上、まず私事にわたることをお許しいただきたい。

ちょうど10年前、当時の東大理学部化学教室島内研究室の助手であった私は、大学院時代から続いていた「Kramers 縮重が共鳴ラマン散乱の偏光特性に及ぼす影響」についての仕事にひと区切りつけ、次に何をしようかと模索していた。共鳴ラマン散乱の理論、とくに電子縮重を含む場合の理論との関連から、ラマン散乱が本質的に振電的現象であって、その適用範囲は何も基底電子状態の振動空間に限られないことを強く意識していたので、「振電空間でのラマン分光」を基盤としてやってみようと考えた。1976年に交付していただいた科研費奨励研究Aの題目は、「二波長レーザー同時照射による準安定状態の分子のラマン分光学的研究」で、スチルベンやチオアミドの光異性化過程などを、共鳴ラマン散乱を用いて調べるという計画であった。この計画は、島内先生の御退官とそれにとまなう私の英国留学で中断を余儀なくされた。1979年に帰国後、東大の田隅研究室においていただくようになり、パルスレーザーによるラマン分光に着手した。同時に、「紫外レーザー励起電子ラマン散乱による遷移金属錯体の電子状態の研究」により奨励研究Aを交付していただき、電子ラマン散乱の可能性を追求しようとしていた。その2年後に、田隅教授を代表者とする特別推進研究が採択され、それによってナノ秒時間分解ラマン分光システムを製作することができ、励起電子状態の振動ラマンスペクトルの観測ができるところまでこぎつけて現在に至っている。

さて、このような研究志向を持っていたから、学会に出席したときはかなりの時間をいわゆる「電子状態」関係の発表を聴くことに費した。そこで気がついたのは、「電子状態」の会場と「振動・回転」の会場の両方で同じ人を見かける確率が非常に低いということである。Born-Oppenheimer 近似は、分子科学者について極めてよく成立しているように思われた。両方の会場で顔を合わせるのには、どちらかという私より年輩の方が多く、若い人達に少ないということも大変気になった。自分達のグループの発表が始まる直前に入ってきて、終わるとすぐ金魚のフンのようにくっついて出てゆく学生達を見ると、研究体制の閉鎖性を感じざるを得ないし、そこに B-O 近似の成立する基盤を見る気がした。

B-O 近似は、我々が分子についての描像を得ようとするとき、まず第一に依らざるを得ない指導原理である。それは分子科学者についても同様であって、教育的背景から「電子状態屋」とか「振動屋」という零次の近似が成立することはやむを得ないことだと思う。また分子科学者の場合は、それに加えて「理論屋」と「実験屋」という零次状態のとり方も存在する。

一方、分子についてのより総合的理解を求めてゆくと、B-O 近似を超えて進まなければならないことも明らかである。これは、超音速ジェット中の高分解能振電分光や、時間分解ラマン分光を手法としている研究者に、「電子状態屋」とか「振動屋」という零次状態を適用しにくい現実となって現われてきている。この傾向は今後ますます強まるであろうし、我々はそれに応じて発想の転換や研究体制の組み替えを行ってゆく必要がある（たとえば、「赤外ラマンスペクトル」という術語のぴったりあてはまる使用の頻度は、10年前に比べ現在では極端に少なくなっている）。

分子科学者間の振電相互作用、また「理論—実験相互作用」を正しく取り込むことにより、分子科学の次の10年を、前の10年を上回る実りのあるものにできることを確信する。

年々歳々花相似, 歳々年々人不同

お茶大理 細 矢 治 夫

私は今、分子研ができたときから毎年出ている「分子科学研究所要覧」を並べて見ている。その表紙の写真が、分子研の発展のあとを如実に示している。’77年には実験棟しか写っていない。’78年には研究棟がそれにつながったが、建物以外は何も手がつけられていない。それが一年毎に整備されて行くさまは見ていて楽しい。

しかし'75と'85の比較は最もドラマチックだ。'75では完成予想模型の白黒写真だったものが、'85でほぼ完全にでき上がってカラーの航空写真に収まっている。UVSOR の上のテニスコートのアンツーカーの色も鮮やかだ。

分子研の中身の充実度については、要覧をめくって見れば、組織・予算の一覧表と主だった装置の写真や研究プロジェクトの解説で充分うかがえる。UVSOR に加えてスーパーコンピューターの今年からの稼動もハイライトの一つだ。分子研はあらゆる意味で海外の分子科学研究者からの羨望的になっている。もちろん国内の他の分野からも熱い眼で見られている。

分子研のこの10年間のもう一つの功績は、「分子」という言葉を小学生からお役人にまで植えたことであろう。「分子の世界」の評判と売れ行きがそれを物語っている。しかし中ではたらいっている人達の業績をもっと詳しく紹介しなければ、分子研のこの10年間の成果を正しく評価したことにはならない。

分子研ができてから10年、それを区切りとして次の10年の期待を書けという御注文であるが、分子研ができる10年前から、分子科学研究会や分子科学研究所小委員会などで、今は亡き藤山常毅君等と一緒に大先生達の間でもまれもがいて来た身に免じて、妄言をはくことでそれに代えさせていただきたい。

ノーベル賞級の仕事を、という期待の声はあちこちから聞かれる。その成否はもちろん神のみぞ知る。しかし賞はあくまで賞である。私の期待はやや違う。分子研のこれまでの研究プロジェクトのたて方は、どちらかというと極限にいどむというものが多かった。「高」、「超高」、「極端」という形容詞の多用が目立っている。確かに大艦巨砲がなければ、現代科学の最先端を突き進むことはできないかも知れない。正にそのための「うつわ」であることが分子研の存在意義の中の一つである。

精密化は自然科学の研究の重要な使命だが、ある場合には情報の上塗りに過ぎないことがある。研究のだいご味は、オリンピックなどの競争とは違って、今まで知られていなかった新しい概念の発見ではないだろうか。技術者は新記録に興奮するが科学者は新しいコンセプトに感動する。世の中がせちがらくなってくると、応用研究の方に世間の期待がかたよるが、分子科学者も分子研も新鮮なフィロソフィーを堂々と追求すべきである。生命科学・宇宙科学・新しい素粒子物理学の進歩は、みな人々の夢をかきたてているではないか。分子設計・分子素子・分子進化・分子生物学など、分子科学の新しいフロンティアはいくらでもひろがっている。

分子研がこれらのプロジェクトの中心的な場となることを期待したい。この10年間に分子研という「うつわ」は見事にでき上がった。これから10年の間にも分子研は成長を続けるであろうが、その規模が今の2倍にふくらむことは考えられない。しかし、人は全く入れ替るはずである。現在分子研で働いている教授も助教授も助手も、そのほとんどは10年後には入れ替って

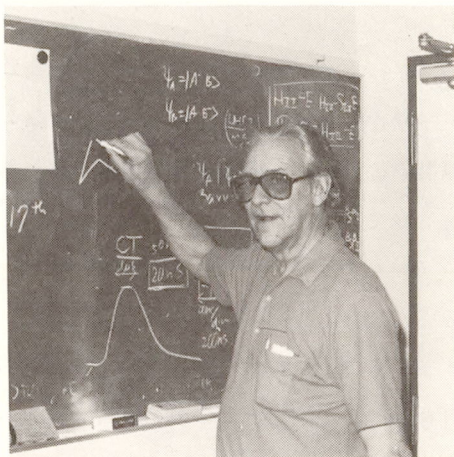
いる。その代り、今動き始めようとしている大学院大学は立派に成長しているはずである。

分子研のこの10年間は、人は変らずいれものが成長した。次の10年間は人が成長する番である。

Report on Visiting Professorship at IMS

シカゴ大学 Gerhard L. Closs

This report concerns my stay in the Institute for Molecular Science during the months of January through June of 1985. I was one of the Visiting Professors financed by the Ministry of Education during this time. It might be appropriate to give first a brief description of my scientific activities while at the Institute and then to discuss my general observations regarding the Institute and the scientific climate in Japan as seen through my admittedly limited experience.



The large interest in kinetic magnetic field effects as presently exhibited in Japan, and specifically at the Institute at Okazaki, was a major driving force for me to arrange an extended visit. Our own research activities in Chicago have been in areas closely related to that subject for a period of more than seventeen years. So after my arrival I began to explore the possibility to do some experimental work in this area, specifically to measure the magnetic field effects of biradical reactions generated by photolytic cleavage of cyclic ketones. These experiments, which proved to be more difficult than initially expected, were carried out with the help of Dr. Nakagaki in the Department of Electronic Structure, who himself has been doing experiments in this field under the leadership of Professor Nagakura. After modification of the available apparatus to allow absorption measurements to be made in a relatively far ultraviolet region, the measurements proceeded smoothly and produced very interesting results. These data were needed to back up a comprehensive nmr study on biradicals conducted in our laboratory in Chicago.

The next project I was interested in and had a chance to solve while in Okazaki involved the interaction between donor and acceptor parts of a molecule undergoing intramolecular electron transfer. Experimental work carried out in Chicago lead us to believe that there might be a stereoelectronic effect in electron transfer which has previously been overlooked. Together with Professor Morokuma we tackled this problem and came up with some exceedingly interesting results. The person who was extremely helpful in both formulating the problem as well as solving it was Dr. Ohta who had some previous experience in this type of Molecular Orbital Calculations. This work is presently in press as a Communication of the Editor in The Journal of the American Chemical Society.

Finally, I spent some time in Professor Iwamura's laboratory preparing some compound to be used in our work on intramolecular electron transfer. The well-equipped laboratory I was assigned space in made it a pleasure to do some "wet" organic chemistry I always enjoy but usually have very little opportunity to do in my own laboratory.

Of course, a large portion of my time was spent in the library and in my office concentrating on work going on and in writing papers. Also, one of my activities involved a seminar series describing our work and the associated theories. There were weekly sessions with a group of scientists from Okazaki where I gave lectures on Electron Transfer, Chemically Induced Magnetic Polarization and General Magnetic Field Effects. These were attended by a small group of people but I had the impression that they were well received and profitable.

Finally, a good deal of my time was spent visiting other Japanese institutions and attending Conferences, which was an important part of my initial goal to learn more about Japanese Science. In this enterprise Professor Iwamura was extremely helpful in setting up visits to other universities and institutes. The travel money provided by the Ministry of Education for this purpose was certainly appreciated.

The universities and institutes I visited were: Tokyo University, Tokyo Institute of Technology, Tohoku University, Kyoto University, Tsukuba University, Hokkaido University, Riken The Institute of Physical and Chemical Research. In each place I gave one or sometimes two lectures reporting on our research in Chicago. I also gave a Plenary Lecture at the annual meeting of the Chemical Society of Japan in Tokyo in April 1985. In addition, I participated in two Okazaki Conferences to give lectures and as Session Chairman.

This completes the report on my activities and the remainder of this report is devoted to experiences and impressions.

First, the living conditions for a foreigner in Okazaki are excellent due to the extremely

well-equipped bungalows at the Mishima Lodge. This facility makes it possible for Westerners to live as comfortable as anywhere without having to worry about experiencing problems due to cultural differences. The planners of the Institute should be commended for including this housing facility as part of the project.

Next, most people from the U.S.A. and Europe will not be able to speak Japanese. This is a handicap in learning to understand the culture of Japan (and makes the visitor sometimes feel stupid) but it does interfere relatively little with the scientific exchange of ideas because of the ability of almost all Japanese scientists to converse in English. So no visitor should be afraid of the language problem, it is an inconvenience but nothing more.

So what is my impression of Japanese Chemistry at this time ? On the whole, extremely favorable. There is an enthusiasm among the researchers which is comparable to that exhibited in the United States twenty years ago. There is technical competence on a level equivalent to the best in the world. Most important, there is hard work as much as we were used to in the 50's and have not seen for a long time. There are laboratories well-equipped by anybody's standards and some of them, such as the ones at the IMS, are equipped better than most places in the world. So all of this should add up to an extremely positive picture, and in most ways it does. Japanese science is on the same level with Western Science in many ways. In some areas it does surpass Western Science. But in some others it is not doing so well. Why ? Far be it from my ambition and ability to give a comprehensive analysis to that question. But perhaps I can point out one factor that is connected to the problem.

The most troublesome observation I made during my stay in Japan was the inferior positions young scientists occupy in this country. By young scientists I mean people who have completed their Ph. D thesis and are now employed by Institutes and Universities as assistant or Associate Professors. I do not mean that they are underpaid and have a difficult time making a living. I believe this is not the case and in any event it is not my business. But what bothers me is that they have few possibilities to show what they could do if left entirely on their own. Often an Assistant Professor in Japan means an assistant to the Professor. They can have great ideas of their own but if the Professor does not like the subject they may not be able to test them. They appear to have very little responsibility for the work they are doing either scientifically or financially.

As with all observations, whether positive or negative, there are always exceptions. Interestingly, it appeared to me that in this regard the Institute for Molecular Science in Okazaki has more exceptions than many other places I visited. It is possible that the Institute may

well fulfill a very valuable function by setting a trend to steer Japanese Science away from the old prewar German model which has been adopted in many ways. Giving young people total independence in choosing research problems and making them totally responsible for the conduct of their research may be one way to increase creativity in Japanese Science. It has been documented many times that the peak of human creativity come early in life before "conventional wisdom" has begun to dominate peoples' thinking. I believe the Institute can play a leadership role in this matter. With the international prestige it has accumulated within only ten years, it will be examined as a role model all the time. Of course with increasing freedom comes increased responsibility and accountability. That is, a mechanism has to be found to remove people from positions in which they have been given a chance to perform but have not done so.

To sum up this report, my time spent at Okazaki was an extremely fruitful and enjoyable experience and I am ready to come back as soon as the opportunity arises. Most important, I wish to express a sincere note of thanks to the people who made it possible, Professor Nagakura and Professor Iwamura. I am equally grateful to the people, too many to list separately here, who helped me scientifically and who made my stay so pleasant. Finally, the Japanese Ministry of Education deserves recognition for its wisdom to finance these Visiting Professorships.

Progress and Opportunities

ベルリン工科大学 Ernst Lippert

The 23rd Okazaki Conference on "Ten Years in Molecular Science: Progress and Opportunities" and other events including on open day as well as official ceremonies and receptions on occasion of the Tenth Anniversary happened to take place just during my six months Foreign Adjunct Professorship for the Study of Molecular Dynamics by Synchrotron Radiation at IMS, and this gives me cause to select that title for my report.



There could be no doubt that during the ten years of its existence IMS became one of the world-wide leading research institutes for molecular science. In the various areas of its activities well-known faculty members and brilliant young co-workers perform clearly defined and sophisticated research problems. The high quality of the scientific staff and its enthusiastic devotion to science allow everyone to concentrate himself on his job and to work hard more or less day and night warranting the strength of the institute. And those experts are developing and operating on first class equipment, in addition to the excellent library, computer, and electron storage ring facilities.

During my stay in Japan I had the chance to give 12 seminars and lectures and had many fruitful discussions. But in all ways I received more than I was able to give. My personal experiences in Japan were uniformly pleasant.

I wonder whether in further times the physics of the liquid state should be added to the activities of IMS, including statistical thermodynamics and quantum statistics for the description of structure, dynamics and dissipation in molecular liquids in their equilibrium and non-equilibrium states, respectively, as revealed from NMR, IR, Raman, LASER and other spectroscopic measurements. Hopefully this would bring nearer together gas phase and solid state researchers with theoreticians, and stimulate, therefore, new ideas in this forefront of molecular science. At present this field is not placed in the major focus of IMS, and even in the library almost all modern books of the referred subjects are not available.

From previous reports I learned in advance that there is a certain shortage of man-power. But I also learned that the foundation of a graduate school is intended and that there is a high amount of collaboration with other universities and research institutes to make it possible for non-members of IMS to use IMS facilities; and guest professors should keep in mind that IMS is only 10 years of age and still in a state of evolution, and make e.g. copies and drawings by their own even if at home some technical staff would do it for them.

It is another question, of course, if it might be reasonable or not for IMS to add, for instance, a half-day English speaking secretary to the two Foreign Adjunct Professorships; this could increase the number of IMS publications and decrease the burden of the appertaining hosts.

This then gives me the opportunity to present my compliments to my host, Professor Katsumi Kimura, head of the Department of Molecular Assemblies, and the members of his photochemistry laboratory. Professor Kimura helped me, most generously with his time, in all my official and personal matters. He shared time of his half-day secretary eventhough

he himself is writing his several publications; his two-colour photoionization photoelectron spectroscopic techniques and results are world-wide unrivalled. And his wife took care of my wife and made her familiar with Japanese style household-keeping, shopping and cooking in our pleasant domicile in a quiet and well-equipped bungalow in well-situated Mishima Lodge. Rellay, the Kimuras never ceased, during our whole stay, to interest themselves in our welfare and activities; they could serve as a model for hospitality.

From a former three months visit to Japan sponsored by the Japan Society for the Promotion of Science we had already learned a little about history, culture, arts, crafts, and beautiful countryside of Japan and experienced the courtesy and friendliness of the thoughtful and gracious people that we met, so that my wife decided at once to join me for all 6 months when the Director General of IMS, Professor Nagakura in 1983 offered the invitation.

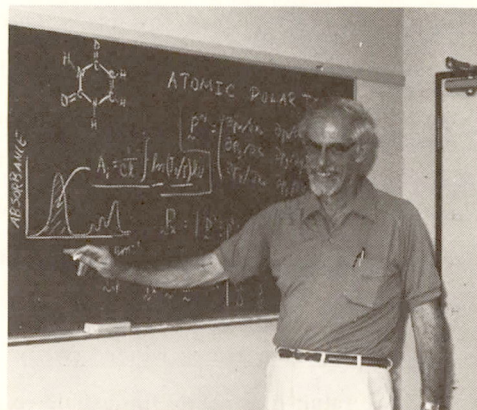
During my stay at Okazaki Professor Nagakura became member of Japan Academy of Science and President of Okazaki Research Institutes and I experienced the impressive celebration of the Tenth Anniversary under his outstanding guidance. I would like to express my sincere gratitude to Professor Nagakura and to thank all members of IMS who assisted to make our stay so exciting and enjoyable, and combine my cordially thanks with my best wishes for IMS future progress and activities, and this especially to Professor Watanabe for further success in constructing the users beamlines of UNSOR including the free electron laser device.

SIX MONTHS AT IMS

フロリダ大学 Willis B. Person

I had a very enjoyable and productive stay for nearly six months last year at IMS (August 3, 1984 to January 15, 1985). My impressions are quite similar to those that have been expressed by a number of other visitors in their "Letters to IMS"; indeed I find it to be interesting that so many different people have such strikingly similar reactions to IMS.

The Institute is certainly unique in the world. One reason for this, no doubt, is that it is located in Japan and so is immediately exotic for all



Western scientists. The Japanese are extremely good hosts to their guest scientists, so that Western scientists (at least this one) are overwhelmed by the hospitality they encounter at the Institute. Furthermore, the Institute is very Japanese, in the sense that it is clear that the founders studied very carefully similar groups in other countries and then combined the best features to produce something much better than had been done elsewhere. Finally, the equipment is superb and the scientific personnel are truly impressive. The Institute is a scientists fantasy come true.

Having said all of this, one must recognize that nothing created by humans can be absolutely perfect. I must emphasize that my view of the Institute is the view of a visiting Western scientist; I expect that it may not look quite so romantic to the host scientists who must live and work there as permanent members of the Institute. I recognize the tremendous dedication and effort that are required from each of them. To me, the administrative effort required from each senior scientist is inconceivable. Not only does he have to plan and direct the research in his group, plan and begin the red tape necessary to make purchases, write papers and often even type them, plan and give invited lectures and scientific papers, and help run the Institute, but he usually also has to spend a great deal of time acting as host for a long-term foreign visitor (me, for example) or for the numerous foreign visitors who come for a few days to visit. It is no wonder that the normal working day is at least 15 hours.

A number of "Letters" have suggested that additional support staff for the Institute might help relieve this burden on the senior scientist. It seems to me that this suggestion has ample justification.

Although my comments above might have implied that I think that the number of foreign visitors should be reduced, the truth is that I think just the opposite. One problem with an "Institute" is a tendency towards isolation. I believe the stimulation provided by outside visitors is an essential part of the atmosphere at IMS and that it should be encouraged and supported to an even greater extent than is now the case.

There is a tremendous pressure at the Institute for the research to be productive. This is another reason, I think, for the very long work days. I think that the policy of not promoting younger scientists may be counter-productive, in that it does not provide them with positive motivation for excellence.

People in Japan worry (unnecessarily, I think) about so-called "lack" of innovative research. I think it is nearly impossible to produce innovative research anywhere, on demand, but it seems to me that it might develop better in an atmosphere with less pressure to produce

results. My suggestion would be to reward better the excellence in research that exists, to encourage more independence in younger workers and to give them plenty of time to develop. I think this policy might encourage them to try new ideas rather than to grind out one more paper on tried and true methods. (However, the latter work is useful and its importance also deserves recognition and encouragement of good science in all its forms). I believe that my own personnel research efforts are more innovative when I am not too tired from too many 15-hour days; for me vacation time and time for relaxation are important for my scientific output, especially taken over a long period of time.

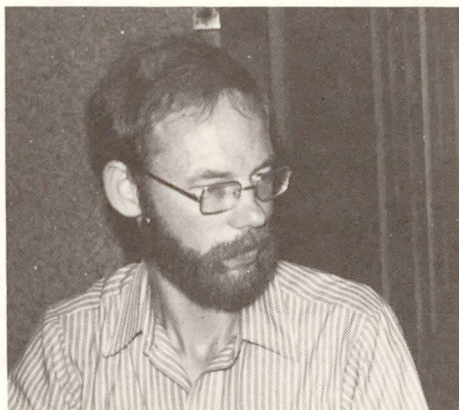
To summarize, my experience at IMS was probably the most interesting and scientifically productive six months I have ever enjoyed. My host there, professor Teizo Kitagawa, was perfect for me, providing both scientific stimulation and social relaxation, with helpful guidance whenever I needed it. My contact with his research group, both social and scientific, was extremely stimulating and gratifying for me. Although I tried to work hard (at least 12 hours, if not 15, each day,) they took care that I also visited other laboratories and also went sight-seeing in Japan, which I thoroughly enjoyed. Furthermore, my accommodations (in Mishima Lodge) were superb, with everything I needed to make me feel at home. I cannot complain that any lack of innovative work on my part while I was at IMS was because I had to work too hard !

My major scientific achievement during my time at IMS was the *ab initio* calculation of the infrared spectrum of guanine, carried out with Zdzislaw Latajka (visiting as a JSPS scholar) in close collaboration with (or, properly speaking, under the supervision of) Professor Keiji Morokuma, using the facilities of the IMS Computing Center. I was very grateful that I was able to do this work at all, and it was very profitable for me scientifically to be able to do it under these circumstances. Thanks to everyone at IMS for their help, support, scientific exchange, and kind hospitality, with special thanks also to Professors E. Hirota and S. Nagakura.

IMPRESSIONS OF A VISITING SCIENTIST

ワシントン大学 Weston T. Borden

I have been a Visiting Scientist at IMS three times. Each visit has been very productive scientifically, thanks to Keiji Morokuma, the very able members of his group who have graciously helped me, and generous gifts of time from the Computer Center. These visits have resulted in the publication of three papers in the general area of computational organic chemistry—one on *m*-quinodimethane, another on exyallyl, and a third on the transition state for the chair Cope rearrangement. A fourth paper on the boat transition state and its relationship to the ring opening of bicyclo [2.2.0] hexane is in preparation.



I could go on at great length about how enjoyable my scientific experiences have been at IMS, the uniformly acclaimed excellence of the facilities, the pleasure that I have had interacting with members of the staff, and the many distinguished foreign visitors with whom I have had the opportunity to spend time at IMS. However, I believe these aspects of IMS have been amply documented by others who have written about their visits. Therefore, I would like to focus in the paragraphs that follow on some other aspects of my experiences at IMS and of the months that I spent living in Japan.

I first visited IMS when I attended an Okazaki Conference during the fall of 1979. Professor Morokuma invited me to return with my family, which I did two years later in the fall of 1981. My son, then three, attended Misonamaria nursery school; my daughter, who was six, went to Tatsumigaoka elementary school; and my wife spent her time becoming friends with many Japanese women. The three months and a half months that we stayed in Okazaki as a family proved an incredibly rich cultural experience for all of us.

Through our children and their schools we felt that we learned a great deal about Japan. We were tremendously impressed by the dedication of the teachers, the skills that they taught the children, and the respect that the teachers were accorded by the community. Both Alice's

and Michael's teachers became our friends, and we were fortunate to be invited to a traditional New Year's meal at the home of Michael's teacher's parents, as well as at the home of the parents of Professor Morokuma's secretary. On New Year's eve we listened to the tolling of the temple bells and then went to a Shinto shrine along with throngs of other Okazaki residents.

Immediately after the New Year celebration we returned to the U.S., but our many memories of Okazaki stayed fresh in our minds. I felt that my next visit would be made even more enjoyable if I learned to speak more than just a few words of Japanese. Therefore, I enrolled, along with some of the same undergraduates to whom I was teaching organic chemistry, in the beginning course in Japanese at the University of Washington. Being in the course proved to be an exercise in humility, since not only am I a poor linguist but many of the students were already quite fluent, having spoken Japanese at home or having lived in Japan. Nevertheless, I persisted in my studies; and my persistence was amply recompensed when, in early summer of 1983, my daughter and I returned for a six weeks stay.

My experience has been that Japanese are generally very supportive of attempts by foreigners to speak their language. My poor efforts were certainly rewarded by the approbation that I received from shopkeepers in Okazaki, from people whom Alice and I encountered on our travels around Japan, and from the audiences that listened to the one minute introduction in Japanese that I gave to my scientific seminars. Being able to speak Japanese, however badly, made possible experiences that I never could have had otherwise.

My third trip to Okazaki took place in the spring of 1985, again in the company of Alice, although this time she returned to the U.S. after two months to finish the academic year, while I stayed on for another month before departing for China. On my own I had learned to read and to write a little Japanese, at least enough to correspond with friends and to write notes to Alice's teacher, albeit with the aid of a dictionary. Because I knew only a few hundred of the several thousand Chinese characters (kanji) in common use, I remained functionally illiterate when it came to reading much of what I saw written. Nevertheless, I had a wonderful time trying.

Highlights of this last trip included being in Japan for cherry blossom season; a growing confidence, thanks to private lessons once a week from Eiko Morokuma, in my ability to carry on conversations in Japanese; and invitations to two elaborate tea ceremonies (chaji) at the home of a woman whom I met at a public tea ceremony near the Okazaki Castle. It is true that on this trip familiarity caused both Alice and I to become a bit jaded about experiences that had once been novel. For instance, eating a box lunch (bento) on the Bullet Train

(shinkansen) was no longer the high adventure that it had once been. However, in compensation for the loss of novelty there was an increased feeling that Okazaki is not just a place that I visit occasionally but my second home.

I would like to take this opportunity to thank all those people who have made my three stays in Okazaki possible. The time that I have spent in Japan has been deeply rewarding, both scientifically and personally.

People Make Japan

ニューヨーク州立大学 David M. Hanson

Yes, even above the spectacular scenery, the fabulous food, the captivating culture, and the terrific trains, the Japanese people are the real attraction of Japan. In stores and on the streets, everyone is friendly and helpful even though the number of common language elements is close to zero. One need not worry about being overcharged or about boarding the wrong train for lack of assistance. My



family and I have many anecdotes about being treated royally by friends, near strangers, and even total strangers. Our reciprocations, e.g. a gift, only increased the stakes, i.e. we were given a gift in return.

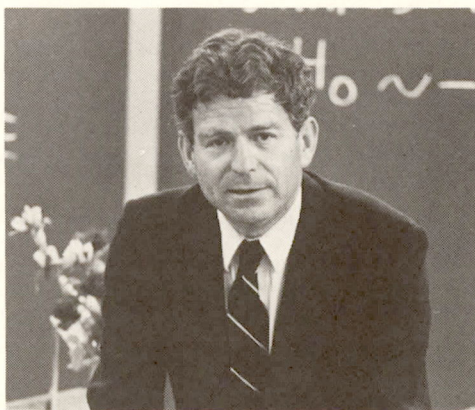
The people that started and are continuing to develop IMS have made it a unique institution in the world. The facilities, both for research and living, are excellent. No where else is there such a concentrated effort in the area of molecular science from the perspective of physical chemistry. It was refreshing to live and work with the dedicated scientists at IMS, to have time only for scientific projects, and to be free of the associated administrative burdens. I very much appreciate the opportunity I had to spend three months at IMS, and I thank all who were instrumental in making the arrangements, and those who worked to make my stay productive and enjoyable.

That this short essay might prove useful and helpful to these scientists, I close with a few comments and suggestions concerning the scientific programs. The number of people at IMS seems small relative to the size and quality of the physical facilities. Programs that bring in outside people, especially graduate students, or involve outside collaboration should be continued and expanded. Many research projects seem to be directed along the same lines, and moving parallel to research in other countries. While this has desirable features, incentives and support should be available to young scientists (between the ages of 30 and 40) who are innovative, have original ideas for research, and are capable of developing an outstanding, and relatively unique, research program.

IS THERE A JAPANESE SCIENTIFIC STYLE ?

リエージュ大学 (ベルギー) Pierre Laszlo

I stayed at IMS in 1985 for a total of three months, split into two six-weeks periods, one in the spring and one in the late summer. I had the good fortune to arrive at the same time as the cherry blossoms. Another piece of good luck was being assigned to the group of Professor Iwamura Hiizu, who was a perfect host and whose work enthused me. The tranquillity; the proximity of the Institute to Mishima Lodge, where I stayed in



one of the units, were other assets: I took full advantage of these to get a lot of work done, mostly running my Liège group efficiently from across the world; writing half-a-dozen primary papers, plus one review article; planning my future research; and preparing the various seminars I gave, in Okazaki and elsewhere in Japan. My only regret is not to have been able to stay longer, in which case I would have assuredly associated myself with one of the on-going research projects, or led one.

As for making suggestions for improvements or changes, secretarial services and the library could be markedly improved—the latter with respect to increasing its holdings of monographs

and serials. Organic chemistry is essential to the development of molecular science. Japanese organic chemists are eminent in world chemistry. Indeed the organic chemistry group at IMS is extremely distinguished and has won many outstanding successes. Hence, in my opinion, it would be very worthwhile to increase further the part taken by organic chemistry in the Institute, in every way: more books and periodicals in the library, more office space, and especially more research scientists. Another point may be worth mentioning: it would be a great help to visiting scientists to organize tutorials for them in the spoken Japanese language, and in Kanji letters.

I took full advantage of my stay, needless to say, to learn as much as I could about Japan: from Nō plays in Kyoto, to hiking on the Nakasendo in Nagano Prefecture. I was especially interested in the characteristics, and in the reasons for the successes, of contemporary Japanese science. It seems to me that the way a group of Japanese scientists goes about science has a lot to do with (of all things) gardening.

In the same manner as a Japanese garden takes nature both as its raw material and as its subject matter, and attempts to build itself into a complete and self-consistent whole (as a sort of microcosm), many a Japanese scientist strives to look at his chosen field of study from all possible angles. This enterprise is often marked by its fierce loyalty to the original subject. This initial topic may sometimes appear to a Western observer as relatively modest and unproblematic. Nevertheless, the Japanese researchers, with extreme thoroughness, with painstaking energy, will make converge upon it all sorts of techniques, they will resort to a variety of experimental and theoretical methods. They will rely upon expertise from every corner. In this manner, they juxtapose all the possible approaches, they play upon such a number of different registers that not only do they gain full mastery of the given scientific niche they have chosen for themselves, but they are often rewarded with unexpected valuable bonuses. This "gardening" approach to science was totally unfamiliar to me, I was used more to a "problem-solving approach", and I was fascinated to witness it from such close quarters. Furthermore, IMS is beautifully set-up for encouraging work of this very nature with interdisciplinary collaborations, where competences of the highest order in many different areas mesh and benefit one another mutually, thus producing work of very high quality.

If I put together such deep-seated professional appreciation, with the personal satisfactions, with the high regard I have for Japanese civilization, for a society where I did not encounter a single instance of anyone not being gentle, courteous, and intelligent, for a culture in which education, science and the arts are deemed important, it should be obvious that I took forward eagerly to renewed encounters in the future with Japanese science and scientists.

分子科学研究所創設10周年 記念行事について

分子研 廣 田 榮 治
井 口 洋 夫

昭和60年5月9日から11日までの3日間、分子科学研究所の創設10周年を記念して、式典、記念講演会、施設披露及び祝賀会、記念出版、更に一般公開を行った。(また10周年記念事業の一環として第23回岡崎コンファレンスも併せて開催したがこれについては別記する)これらのくわしい内容は、「創設10周年記念事業」の冊子にまとめられ印刷発行されているので詳細はそれを参照いただくこととして、ここではインフォーマルな立場での記録としてのこの記念行事をまとめて報告する。

昭和50年4月22日、分子科学研究所は、第5番目の国立大学共同利用機関として呱呱の声をあげ、その記念の祝杯をあげたのは、同年4月30日、旧愛知教育大学図書館一階の一室であった。そして毎年、この創設の日を記念して、4月22日前後の土曜日にスポーツ及びレクリエーション大会を開いて来た。日々急がしくしている研究系、技術系、管理局の一同が、スポーツなどを通じて相互に交流の場をつくり、親睦を深めると共に、「年に一度、記念日をつくって、〈初心忘るべからず〉の機会としよう」との赤松前所長の考え方を反映したものでもある。

そして昭和60年はその10回目となった。この創設期を終えんとしている10年目を記念しての行事を行うにあたっては、長倉所長の指揮のもとで約1ヶ年の準備期間を置いた。他の教育・研究機関の行事日程や分子科学研究所の既に決まった日程との調整、更に週間中で最も適した曜日及び春の天候等も併せ考えて、5月9日(木)～11日(土)を記念日と決め準備を開始した。その基本は、ここまで成長した10年を祝い、感謝し、そして研究所の発展に重要な時期となる次の10年に対する出発点とすることに置いて、立案した。即ち、記念行事を構成する次の3つの行事を各グループにわかれて始めゆつくりと、そして次第に急がしく、その具体案をつめて行った。

- (1) 式典
- (2) 記念講演会

(3) 一般公開

また、研究所が大都会を離れた岡崎の地にあり、この式典にわざわざ参列して下さる方々に、何か記念になるものを考えようとの発想から「分子科学を解り易く解説した本をつくろう」とする計画が決まり所長を始め多くの研究者が参加して作業をすすめることとなった。これに対しては記念誌編集委員会がつくられ、執筆、印刷等の期間が式典までに求められるので、8月から具体的作業に入った。その記録もまた、別に記されると期待しているので、ここではそれに譲ることにする。

さて、記念行事については何回もの会合を重ね、研究所側・管理局あげでの準備態勢を整え、全員が一丸となってこれら三つの行事の準備にあたり、ようやくにして当日を迎えることが出来た。

5月9日(木)

既に述べたように、この記念すべき日を単に記念に終らさず、次の10年の出発点にするとの立場から、世界の分子科学研究推進の指導的立場の方々をお願いして記念講演会を開き、10周年の記念行事を飾ることとした。記念講演会は新築された岡崎ニューグランドホテル「飛龍の間」で午後1時から開催した。

まず、研究所を代表して長倉所長が開会の辞を述べると共に、分子科学研究所10年の歴史と現況について報告された。

次いで、分子分光学の最長老の一人カナダ・ヘルツベルグ天体物理学研究所特別研究員であ



り、ノーベル化学賞受賞者でもあるゲルハルト・ヘルツベルグ博士から “ Molecular Science and Astrophysics (分子科学と天文学物理学)” の表題のもとでその発展の歴史に沿って最近の研究までの解説的な講演をされた。その全く年令を感じさせない話し振りに、ピメンテル教授をして「自分はもう20年研究することが出来る」と言わしめた程であった。

次いで赤松秀雄分子科学研究所名誉教授（前所長）は、化学の基本は分子にありとして、分子概念の形成をその歴史を追って話されたが、その表題は“分子の系譜”であり、コンピュータと電子顕微鏡による“分子”の像を示して、講演を結ばれた。

若干の休憩をとって、現在分子科学研究所の外国人評議員である理論化学者パーオロフ・レヴディン教授（フロリダ大学・ウプサラ大学名誉教授）は、1925年量子力学が誕生しそれが分子の構造の解明にとり入れられて行った発展の過程を Sixty Years of Quantum Molecular Science (量子分子科学60年の歩み) として講演された。

そして最後に、Laser opens New Horizons in Molecular Science （レーザーは分子科学に新領域を拓く）と題して、カリフォルニア大学教授のジョージ・ピメンテル教授が、レーザーの開発によって分子分光学を中心とした分子科学研究の様変りの発展を、巧みに概説された。

この特別講演会の企画の中で、私達が開催する学術講演会としては、比較的稀なケースとして、同時通訳——勿論日本語で講演された赤松先生、及び長倉先生については、それを英語で——を行った事について舞台裏の報告を付記しておこう。

通訳を担当して呉れた人も、いきなり「量子力学や波動関数」の用語がポンポン飛出して来てはすぐには対応し切れないから、事前に若干の準備をと言うことで、講演者及び、その研究内容に近い分野の研究者の協力を得て、「専門用語」を中心に“用語”訳の準備を前日の夜半まで行っただが、正直な所かなりの不安を持って開会した。幸いにも通訳者の努力によって「専門家以外の人々に専門家の話を聞いてもらおう」とする本特別講演会の目的を果し、主催者も講演者もそして参加者も異口同音に通訳者を賞め、そして「さすがはプロ」と感嘆した。参加者約260名。技術系あがての放送、録画収録などいくつもの新しい試みは、今後の事例になるのではなかろうか。

5月10日（金）

この日に、記念式典、施設披露と祝賀会を開催することとして、式典会場を改装なった職員会館地階ホールで行うことに決めて準備を進めて行った。室としては式典に必ずしも適さず、また改修直後の塗装の臭いも心配であったが管理局側でいくつもの工夫をこらすことによって、晴れの式典会場らしく準備することが出来た。

式は岡本総務部長の司会で開かれ、日本各地更に国外からも多くの参列者（合計260名余）を得て10周年記念式典を行い得た。

長倉所長は「10周年を迎え、設立までの経緯と、その後の発展の跡をふり返るとき、誠に感慨無量」と口を切られた。そして、その発展の道程に於いて新しい施策と制度を導入実施出来たことを、多くの研究者、文部省を始め管理局の方々の努力の賜と感謝し、そして「10周年の記念の行事を、単に研究所の過去を振り返り、これまでの発展を喜び合う機会に終らせることなく、研究所の次の発展を展望し、それに挑戦する新たな活力を生み出す機会としたい」と結ばれた。

それにつづいて、文部大臣、福井謙一京都工芸繊維大学長、小田稔宇宙科学研究所長、ジョージ・ポーター英国王立研究所長、中根鎮夫岡崎市長、中野四郎衆議院議員の方々から祝詞をいただいた。福井先生は「10年の間に培われた強大なエネルギーが丁度連鎖反応のように爆発する時期に来ているのではないか」と。

そして、式典後10数組に別れて、研究系助教授の案内で10年間に積上げて来た各設備・施設を見学していただいて再び職員会館に集まって祝宴を開いた。長倉所長が開会され、伏見康治先生、現評議員会議議長植村泰忠先生、韓国科学技術研究所全武植先生、赤松秀雄先生の挨拶があって、小谷正雄先生に乾杯の発声をいただいた後、歓談に移ったが、研究所の過去・現在・将来を話題として関係者の心がひとつとなって熱気に満ちた歓談が続き、午後6時、この日の行事を完了することができた。

5月11日（土）

分子科学研究所は、3年振りの一般公開を10周年記念として行った。美しいポスターと「解



き明かされる分子の世界」と言うスローガンのもとで、朝9時30分より公開を開始した。幸運にも快晴であった。

研究所の様子が事前にテレビ番組でも取上げられていたことも手伝ったのであろうか、出足は非常に良好で、「沢山の参観者がありそうでこれは大変だ」という印象で公開が始まった。とくに、私達主催側を喜ばせて呉れたのは、例年と若干異なって、小学生から一般家庭の方々まで、極めて広範囲に参観者を集められたことであった。

研究所側も、管理局の全員の協力によって「何とか分子科学を知ってもらおう、解ってもらおう」と声をからして解説に当った。そして、恐らく今後半永久的に開くことはないかも知れない UVSOR 施設の非常口も開いて参観者の流れを誘導した。

前回も、前々回もそうであったように、終了近くになって、入場者の流れは激しくなり、ほっとしたのは5時半頃であった。

日の長い5月も、夕焼と共にうす暗くなった各室で一斉に取りはずしが行われ、「今回の参観者は何人だったろう?」「パンフレットが完全になくなったから3,000人位では」「いや、1家族には1部しかパンフレットを渡さなかったから、4,000人以上は」との会話がつついた。

かくして、“10周年記念週間”は終った。そして研究所は、新たな活力を持って次の発展に挑戦するための次の10年“勝負の時期”に入った。

再度、この記念行事を無事完了出来たことを、実行した全員に感謝申上げる。

分子研創設10周年記念出版物— 「10年の歩み」・「分子の世界」

分子研 木 村 克 美

分子科学研究所の創設10周年を迎えるに当って、2種類の記念出版物「10年の歩み」と「分子の世界」が記念事業の一環として発行された。「10年の歩み」は分子研におけるこれまでの研究活動および研究成果を中心に、共同利用研究機関としての種々の活動状況をまとめたものである。「分子の世界」は分子科学について一般社会の理解を深めてもらうために啓蒙書として企画・編集された。いずれも、約一年前から所内に編集委員会が置かれ編集に関して何回も討議が重ねられた。

「10年の歩み」はつぎのような構成になっている。挨拶、祝詞、分子研の沿革、研究活動の推移および成果、特別研究、岡崎コンファレンス、大型研究設備、共同研究、国際協力、大学院教育協力、資料（各種各簿）。これによって分子研の過去10年間の動きが詳しく紹介されている。

「分子の世界」は教科書的な性格をなるべくさけ、気楽に読める本を目ざした。そのため、分子の世界の基本的な事柄や新しい知識などをできるだけ平易に紹介し、大胆なイラストを使用している。多数の執筆者の原稿をもとに、各章ごとにストーリーをつくり、全体の流れを重視し、内容的にバランスをとるよう注意がはられている。

この本の構成はつぎのようである。

序章 自然と分子の世界

1章 分子とその生いたち

2章 分子と光の対話

3章 分子と化学反応

4章 分子の集まりとその機能

5章 新しい物質をつくる—分子の設計

6章 分子で太陽エネルギーをつかまえる

7章 コンピュータで分子の世界を探る

なお、「分子の世界」は、その後、分子科学振興会編で化学同人からも出版され、現在、

すでに第5刷が一般書店で販売されている。

昨年（昭和60年）11月、「分子の世界」は幸い日刊工業新聞社の第1回技術・科学図書文化賞に入賞し、最優秀賞の誉与に浴した。多数の執筆者・編集者の努力が実り、まことに喜ばしい。

今回の記念出版事業に当っては、執筆および編集に多数の方々のご協力が得られ、この機会に編集委員会を代表してお礼申し上げたい。

研究室紹介

分子基礎理論第一部門 (Ⅱ)

分子研 大 峰 巖

昭和57年の末に大峰が慶応大学から着任し、その後約1年半して京都大学より田中秀樹君がリサーチフェローとして参加し今日に至っている。従ってまだ研究室の形をなしていないので、ここでは大峰と田中それぞれの仕事を紹介する。私の現在の研究の中心課題は、光励起された分子の動的過程の理論、溶液内化学反応過程（特に光励起分子のエネルギー緩和過程）の理論、溶液自身の構造と動的挙動の理論であり、田中君は水和構造とその動的性質についての理論研究を行っている。

励起状態の分子過程の解明は、各電子状態のポテンシャル面、ポテンシャル間の無輻射遷移（非断熱項による）やその面上での分子の動的挙動を知る必要があり、それぞれについてポリエンの光異性化過程を中心にして研究を行ってきた。特に電子相関が重要である $2^1A_g^-$ の電子状態は同時二重回転に有利であり、また光吸収の $^1B_u^+$ 状態が一重回転に対して突然極性化することにより様々な分子構造や電子的性質を示すなど、パラエティーに富んでいる。また、 $2^1A_g^-$ の状態はポリアセチレン系でソリトン対の生成とも関係しているのではと考えられ、最近物理サイドからの研究も行われるようになった。状態間の無輻射遷移については、実験によりポリエンの光異性化の全過程が数ピコから数十ピコ秒の程度と非常に早いことが知られているが、何故そのように早いのかという理由がはっきりしていなかった。というのは励起状態から基底状態への無輻射遷移の速度がこの状態間のエネルギー差（C=Cが90°振れた所で20~80kcal/mole位ある）に反比例しており、理論上非常に遅くなってしまっているからである。これは長い間未解決の問題として残っていたが、ポリエンが突然極性化するとCについているH原子が大きく動くことが可能になるが、この運動により状態間のエネルギー差が小さくなり従って遷移がピコ秒以下で起り得ることを最近見つけた。これは比較的大きな分子変形により状態間遷移が促進されていることを示しており、ベンゼンの第三チャネルの問題も同様であると考えられる。以上がポリエンの電子状態とその動的性質についての私の研究であるが、励起状態の分子過程には未解決の問題が多い。特に多原子分子の電子状態間遷移を含めた IVR (internal vibration relaxation) の過程は基本的問題が残っているように思われ、この方向の研究を続けてゆく予定である。

現在の研究の中心は溶液内化学反応の理論で、特にその動的側面を調べている。モデル系として溶媒の中に入れたエチレン分子の励起状態のエネルギー緩和過程を取り上げ、励起分子から溶媒へのエネルギーの流れ方を分子動力学法や種々の近似的方法（流体力学、衝突論）を用いて解析している。この研究を通してわかってきたことは溶媒の化学反応に及ぼす動的影響は摂動的なものではなく、その効果をまともな形で取り入れなければならないことであり、従って反応系としてのミクロな部分と溶媒のマクロな部分を結びつけるには非常に困難な（従っておもしろい）問題が存在していることである。特に水溶液の中でのエネルギー散逸では水は1つのかたまりとして動的な結合を有して働いており、そのポテンシャル（水同士に働く力）も大きく揺れしており、それによりエネルギーの流れを効果的にしていることを見つけた。これは溶媒中（特に水中）での化学反応では揺ぎの効果が本質的であり、従って現在行われている絶対零度近くでのクラスター法による溶媒効果の研究のみでは充分でないことを示していると思われる。この研究を通じて溶媒自身の性質についてもっと調べる必要を感じ、特に水の中での水分子間の相互作用に対する水の集団運動の影響を調べ始めている。水分子の集団が如何に動的に結合しているか、またそれによって如何に大きなポテンシャルの揺ぎが生じているかを見ている。以上が、私がここ分子研に来て三年来行ってきた研究の内容であるが、これ以外にもゲル化に伴うネットワークの生成過程などの一次相転移に伴う動的な諸性質（新しい運動モード）の生成過程なども調べたいと思っている。

田中君は水和の構造とその動的性質に関して研究を進めている。非電解質水溶液には、液体としての水の特異性に密接に関係づけられ、他の溶液にはない異常性が見られる。この水及び水溶液の構造、性質、特に非電解質の水和を溶液の構造とエネルギーゆらぎから明らかにすることを目的として、分布関数論に基づいた RISM 積分方程式と、計算機シミュレーションを用い、無極性分子水溶液の水和、溶質間相互作用に関する研究を行なっている。それにより溶質の性質と水構造の変化との関連性、水の Coulomb 相互作用の水和現象に対する影響を検討している。今後この積分方程式を溶液内化学反応に関する研究に応用する予定である。

化学現象を理解するには電子論、反応動力学、統計力学（溶液論などを含めた）を総合的に駆使すると同時に新しい方法論を使ってゆかねばならない。現在の理論化学の方法論はそれなりの成功を収めてきたが、化学現象の多様性を本質的に理解する為には、さらにその特徴ある多体の効果を取り入れる為の新しい概念の導出を必要としている。それを見つけることは非常にチャレンジングであり、私達の目標である。

錯 体 合 成 部 門

武 居 文 彦

万邦初の流動部門という触れ込みで当部門が発足してから本年3月で任期の2ヶ年を終ろうとしている。二年前、教授：武居（東北大金研より）、助教授：手老（東北大非水研より）、助手：恒川、細谷（いずれも金研より）のスタッフで着任した当時は大いなる希望で胸をふくらませていた。その結果は如何であったか、研究成果に関する限りこれから結実するであろうものが大部分で、結論を出すにはあまりにもまだ時期尚早ではあるが、いくつかの萌芽は見出すことができたように思う。

ここ2年間で我々が手掛けた研究は、手老助教授の分を除けば、次の三つに大別される。第一は希土類シエブレル化合物 ($\text{RE} \cdot \text{Mo}_6\text{S}_8$) の合成・単結晶育成と物性に関するものである。ここでは高温高压下での融液からの析出を利用して単結晶を育成する。ちなみに我々の合成した HoMo_6S_8 では世界で始めて単結晶による強磁性転移が観測された。これらの物質の磁気異方性の測定が進めば磁性と超伝導性との相互作用の理解に役立つものと期待される。現在はシエブレル固溶体の単結晶育成に取り組んでいるが、これは磁場誘起超伝導の研究に大いに役立つものと考えられる。

第二はシエブレル化合物の化学的安定性に関するもので、特に酸素との間にどのような反応があり、その結果構造・物性はどのように変化するかを調べるものである。たとえば $\text{Cu}_2\text{Mo}_6\text{S}_8$ では 300°C 以下のかかなり低い温度から酸化が開始するが、その際銅のみが選択的に酸化されることが、硫黄と酸素の交換反応はほとんど生じないことなどがわかった。

第三は希土類シエブレル化合物の非化学量論比に関するものである。この化合物は希土類および硫黄に非化学量論比が存在するものと考えられていたが、その実証はまだされていなかった。その理由の一つとして化合物の生成温度が高いことと同時に高温での硫黄の飛散が著しいという困難さが存在することである。今回我々はMoコンテナ（ $\sim 5\text{ mm}$ 厚、内容積 $\sim 5\text{ cc}$ ）内に試料を入れプラズマ法で封止した後高温（ $\sim 1600^\circ\text{C}$ ）で焼結する方法を取った。格子定数、超伝導転移温度等から予想通り硫黄位置にかなりの欠損が存在することが明らかになりつつある。

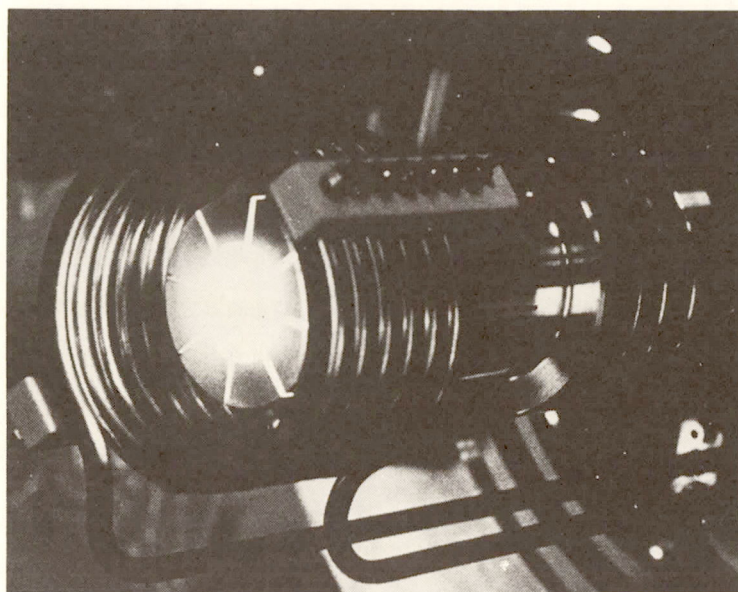
この他水冷るつぼ（スカル）による融解実験も行いつつある（写真参照）。これは高周波誘導をさけるためにあらかじめ割を入れておいた銅製水冷るつぼに原料を入れ、直接高周波をこの原料に誘導することによって加熱する方法である。スカルというのはるつぼの割を入れた状態

が骸骨を連想することから命名されたものといわれ、原理的にはるつぼなしと同じような具合で高融点化合物を融解することができる。我々はこれを高ガス圧下で用いる試みを行っており、もし成功すれば反応性が高く良いるつぼ材料のない、しかも揮発性の高融点物質の融解固化実験が可能となる。

錯体触媒部門との共同研究としては我々のグループで合成した各種の希土類—ロジウム—硼素化合物の不飽和オレフィンに対する水添反応の研究がある。これは当部門客員教授の阪大中村晃先生のヒントから始まったもので、斎藤一夫教授の指導のもとに内モンゴルからの留学生王巴特爾君が精力的に実験を行なった。これらの化合物は大量の水素を吸蔵する性質を持ち、この水素がオレフィンを還元し、しかも著しい基質選択性を示すことがわかった。現在これらはまとめの段階にあるが、共同利用機関における典型的な共同研究の一例といえよう。

以上が我々の実験の進行状況であるが、やはり日暮れて尚途遠しの感はぬぐえない。又、成果も里諺に言う「棒ほど望んで針ほど叶う」といった状態にあり、現在はこの針をせめて木綿針位にはしたいと心を砕いている所である。

ここで流動部門について一言触れておきたい。このことについては内外からのさまざまな意見、批判、はげましを丁載したが、私の全く個人的な感想ではやってみて良かったの一言につきと思う。曲りなりにも無事二年間が過せそうなのは長倉所長や斎藤施設長、事務の方々などの御努力のおかげであると確信している。同時に分子研の方々、就中岩村教授を始めとする



スカル法によるNbOの融解。水冷銅容器（スカル）内で直接試料に高周波を誘導することにより融解する。融点は約 2000°C 。

相関グループの方達の極めて open minded な、暖かいおつき合いによってこの二年間はより楽しいものとなった。色々な議論や話し合いによって私は実に多くのヒントをちゃっかりと只でいただいたが、私の提供したものはお茶飲場の整理位であった。この点は私にとって全く慙愧に堪えない点である。いずれにしてもさまざまな研究分野の人と議論したり一緒に過したりすることは \oplus のことはあっても \ominus のことはない、という私の自論は証明されたように思う。

来年度は九大より木田教授が、東工大より石黒助教授が当部門に来られ、大いに活躍されることが期待されている。益々の発展を念じて止まない。

錯体合成部門（Ⅱ）

分子研 手 老 省 三

「流動部門」という新鮮な名前にひかれて、仙台から岡崎へやって来たのが先日のように感ぜられるが、早くも任期をわずか残すのみとなってしまった。当部門の中で、錯体の磁気共鳴研究を行うのは、手老一人ということで、二年間の任期内にどれだけの成果を挙げられるのか、全く自信のないまま昭和59年5月に着任しました。当初の構想はばく然としたものであったが、錯体化学の分野に対する時間分解 ESR 法の応用をどこまで広げられるかを探り、新しい研究の芽を育てることを念頭においた。時間分解 ESR 法は、レーザー光照射によって誘起される電子スピン分極をサブマイクロ秒 ($> 2 \times 10^{-7}$ 秒) で観測することにより、励起三重項状態やラジカル開裂反応に重要な情報を与えることから、錯体化学の領域に新しい手法を加える可能性をもっと考えた。

幸い、錯体化学実験施設創設費の一部で、電子スピン共鳴装置やボックスカー積分器等の周辺装置を購入でき、予想以上のスピードで研究体制を整えることができた。また、励起光源に用いるレーザーは、機器センター所有の窒素レーザーを借りることができ大変助かった。

次に示す三つの研究テーマが進行中である。

- (1) アルミニウム-アルキル結合をもつテトラアザマクロサイクル錯体の光化学反応機構および励起状態。
- (2) 時間分解 ESR 法による亜鉛シッフ塩基錯体の励起三重項状態の研究。
- (3) 種々の金属-アルキル結合をもつ錯体の光化学的および熱的開裂反応。

第一のテーマは、相関分子科学第一部門の伊藤翼助教授（現東北大学理学部教授）および同

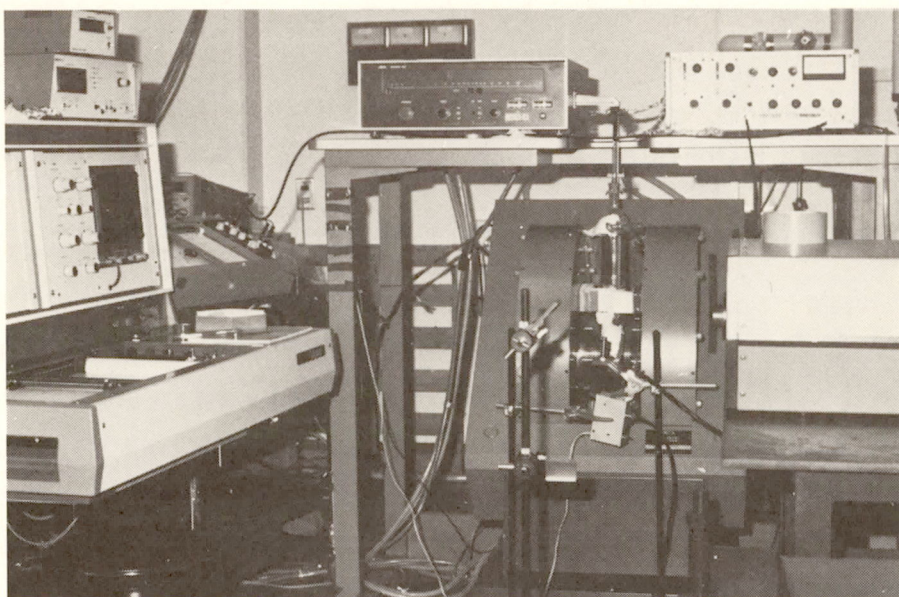
第二部門・大塩寛紀助手との共同研究により進めている。アルミニウムーアルキル結合は、通常、酸素や水に対し高い反応性をもつが、大環状配位子の導入により著しい反応性の変化を示す。テトラフェニルポルフィリナトアルミニウムエチル (TPP AlEt) や合成テトラアザマクロサイクル錯体 ($C_{22}H_{22}N_4$)-(AlEt) は可視光照射により Al-C 結合が開裂し、エチルラジカルおよびこれらテトラアザマクロサイクルアルミニウムラジカルが生ずることを明らかにした。また、窒素レーザー照射により、($C_{22}H_{22}N_4$) AlEt の励起三重項状態に由来する時間分解 ESR スペクトルを観測することができ、リン光状態についての詳しい検討を行っている。この錯体は立体障害により、平面から著しくずれた構造をとり、これが電子構造や Al-C 結合の反応性にも関与していると考えられることから、更に、平面構造をもつ錯体を合成し、研究を進めている。

配位子の構造と励起三重項状態の電子構造との関連を系統的に明らかにすることが(2)の目的である。シッフ塩基錯体は、種々の配位子が合成されているために、この研究目的に合致した錯体である。これら錯体の零磁場分裂定数は配位子の立体的構造および架橋グループによって著しく異なることが明らかにされた。

上記の研究が進行し、成果の一部を研究会や学会で発表するに伴い、金属ーアルキル結合を有する錯体の研究を行っているグループから、協力研究の申し込みがあり、(3)が加わった。大阪大学(基礎工)の齊藤太郎教授との協力研究では、遷移金属クラスターをもつ [(Mo₆Cl₈) Et₂ (PBU₃)₂ Cl₂] は可視光で Moーアルキル結合が開裂することを、ESR 測定から明らかにした。また、大阪市立大(理)中村幸雄助教授および磯辺清助手とは、いくつかの Mo-炭素および Rh-炭素結合を有する錯体の光化学的挙動についての研究を行い、興味ある成果を得つつある。

当初は考えてもいなかった方面にも研究を広げることができたのは、正に、分子研が共同利用研であるおかげと思っている。これは、第一に、創設費に加え、臨時事業費による追加予算を受けることができ、設備を急速に充実できたこと、第二には、国内外の研究者の交流が分子研では盛んであることによると思う。また、活動的な分子研の人達および国内外の多くの研究者から受けた有形無形の刺激は、私にとってはもう一つの大きな収穫でした。このような機会が得られたことに感謝しています。

最後に、研究を進めるにあたり、終始激励と助言を下さいました長倉三郎所長、斎藤一夫施設長、武居文彦教授、お世話になった相關領域研究系、錯体化学実験施設の方々に感謝致すと共に、「流動部門」創設に多大な努力を下さった文部省など事務当局の方々にも深く感謝致します。



時間分解 ESR 装置

機 器 セ ン タ ー

山 崎 巖
木 村 啓 作
玉 井 尚 登

機器センター教官の研究課題には山崎・玉井による「時間分解分光法による光化学の研究」と木村による「超微粒子の研究」がある。山中孝弥，坂東俊治両技官も機器センターの業務を行なうかたわらそれぞれ自分の研究課題をもち実験研究を行っており，アニュアル・レビューにその詳細が記されている。ここでは前二題の研究課題について問題の背景を含めてその内容を紹介したい。

(1) 積層構造分子集合体に関するピコ秒時間分解蛍光分光 (山崎・玉井)

最近ラングミュア・プロジェクト (LB)膜が世間の注目を集め，将来の電子材料のための新素材として研究が盛んである。それらの応用研究のことはひとまず置くとして，この LB 膜は少なくとも分子科学の立場からみても，比較的任意に分子構成を設計することが可能な多層構造

分子集合体という点で極めて魅力的な研究対象であることは確かである。LB膜においてわれわれは、種々異なる発色団を含む単分子膜を何層にもわたって思いのままの順序で積み重ねることができ、しかもある程度秩序ある分子配列の「場」をつくり出すことができる。このようなLB多層膜において励起エネルギー移動、電子移動、会合体形成などの光化学的諸過程を考えると、これまで主として行なわれてきた均一にしてランダムな媒体中とは本質的に異なっており、「場」が支配する新しい型の現象が期待され光物理化学の新しい研究課題として興味が尽きない。例えば西独の H. Kuhn 教授のグループが見出したようなシアニン色素LB膜で形成される2次元J会合体などはその典型的な一例であろうし、また最近われわれが実験を進めているLB膜の層内および層間でつくられるエキシマー形成などもこれまではなかったタイプの光化学過程であり、これらの研究を系統的に進めることによって、分子科学における一つの新しい研究分野の展開さえ期待される。

まえおきが長くなったが、以上のような考えに立ってわれわれは1983年、電総研の杉道夫博士および埼玉大の中原弘雄博士の御指導の下でLB膜作製を開始した。われわれのLB膜研究の目的はそれ以前から行なっていた研究テーマと関係している。話が前後するが、筆者らは1980年12月分子研に着任して以来、らん藻・紅藻光合成色素系の光エネルギー伝達の研究を基生研との共同研究として進めてきた。この種の光合成色素系は図1に示すように色素たんぱく質の積層構造をとっており、外殻色素たんぱく質から内殻反応中心まで高速にして ($0.5 \sim 0.8$ ns) かつ効率の高い (95%) 光エネルギー伝達が行なわれている。筆者らはその様子をピコ秒時間分解蛍光分光法に基づいて蛍光スペクトルの変化として直接的に捉え、藻類光合成アンテナ色素においては光子エネルギーは3ないし4種類の色素たんぱく質の間で定められた順序で受け継がれて、そのエネルギーを失うことなく確実に3次元空間の所定の位置すなわち反応中心へ伝達されていくということが明らかとなった。

LB膜の話に戻るが、図1に示すようにLB膜を一連のエネルギードナー・アクセプターのシーケンスとしてつくるならば、光合成アンテナ色素系に類似したものができよう。人工多層膜の場合には、発色団間の距離、発色団分子間相互作用の大きさなどをわれわれが任意にコントロールできるので、逐次的なエネルギー伝達過程の速度論をより詳細に明らかにできよう。また光エネルギー伝達そのものを時間的・空間的に制御することも可能となるであろう。

このような方針と目標のもとで、1983年以来 膜の作製をはじめ、1年あまりの準備の後ようやくわれわれの手で 膜ができるようになり、これまでに(1)2次元平面におけるエネルギー移動速度論、(2)LB膜における会合体形成、(3)LB膜上の発色団分子の分布におけるフラクタル構造、などの基礎的な問題について手がけてきた。そして現在いよいよ上に述べた問題と取

組む段階にきている。なお、この研究課題は分子研井口教授および丸山教授が主宰する特別研究「分子素子の基礎研究」の中に入れていただいているが、セミナーおよび連絡会等を通じて多くの助言と協力をいただいております、この場を借りてお礼申しあげます。

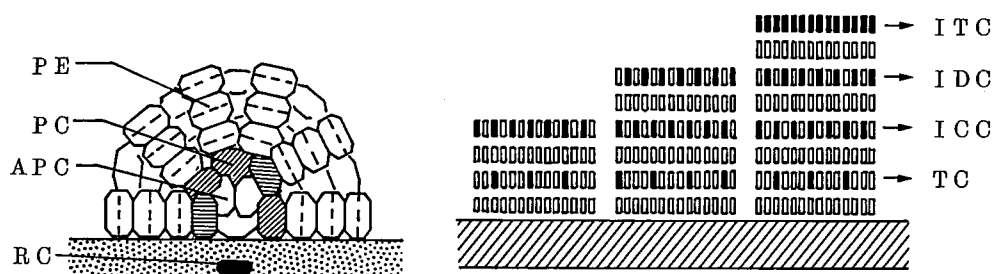


図1 紅藻の光合成色素系フィコビリゾーム (左) とLB多層膜 (右) の構造模式図。

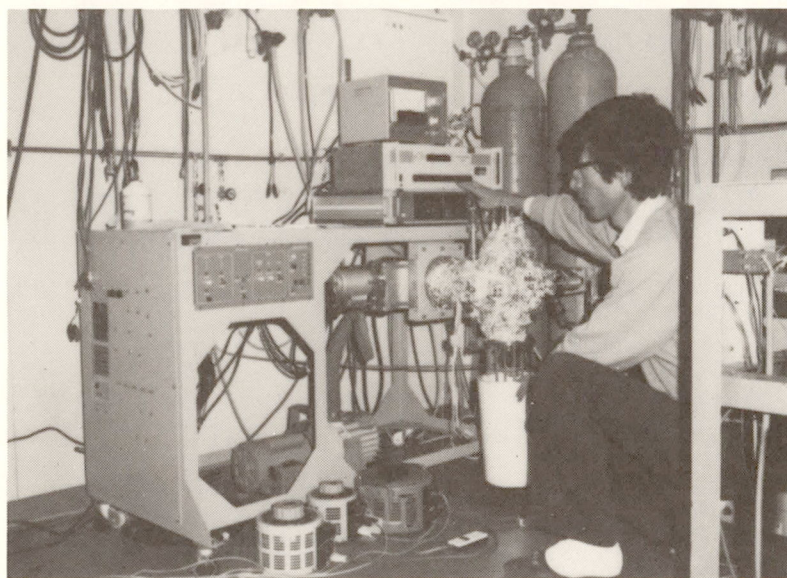
フィコビリゾームでは色素たんぱく質の6量体から成る粒子が積層し、光エネルギーは外殻 LB からチラコイド膜中の反応中心 (RC) へ伝達される。LB 多層膜ではいくつかのシアニン系色素を用いてエネルギードナー・アクセプターのシーケンスとして積層することにより、生体系アンテナ色素と類似の構造をつくり出すことができる。

(2) 化学修飾表面を持つ超伝導微粒子の合成と物質測定 (木村)

この研究課題は1982年からスタートし、当初は先ず自前で超微粒子を作成する事を目標として装置の作成から始めた。有機化学反応を行う微粒子は溶液中に存在する事、各種超伝導金属のコロイドを作成する為作成法は一般性を持つ事の2条件より、ガス中蒸発法と有機溶媒による微粒子のトラップ法を組合せる方式を開発した。この方法により今迄に粒径10 nm以下の10種以上の金属超微粒子を10数種の有機溶媒中に作成することができた。この粒径の微粒子では量子サイズ効果が期待できる事、表面が極めて活性で各種の表面化学種の生成が考えられる事から生成粒子の評価を、吸収スペクトル、磁気共鳴、磁化率の測定により行った。丁度機器センターの高感度帯磁率測定装置の自動化が坂東技官により完成したので、ESRの測定も含めて磁気的な測定に協力してもらった。金属微粒子/有機溶媒の系では表面化学種が現象を複雑にするだけだと見られていたが、ESR信号は比較的単純でこれをプローブとして量子サイズ効果やコロイド粒子の相互作用を見る事が可能となった。金属超微粒子の量子サイズ効果に関しては所外研究者と共同研究を進めている。超伝導に関してはSn微粒子について静磁化率の大きさや、転移点に関しバルクとは顕著な差が検出された。設計通りに表面修飾された超微粒子を作成する事を今後の課題としている。又コロイド化学的な視点から粒子の界面電位や分散安定性を支配する要因が何であるのかミクロな立場からも接近できよう。20年に及ぶ超微粒子研究



ピコ秒時間分解蛍光スペクトロメーター



超高真空超微粒子作製装置

も第3の波を迎えようとしている。物理学会の表面・界面部門にも超微粒子のセクションがもうけられ、化学界でもこの問題に目を向ける研究者が増えつつある。我々も所帯は小さい乍らもこのような波の一しづくになればと考えている。終りにグループ研究というより個人研究に近い色彩を持つ我々の研究立上げに名古屋大学、名城大学の超微粒子グループの研究者からの各種の助言を忘れる事はできない。

岡崎コンフェレンス報告

第22回 岡崎コンフェレンス報告

EXAFS and Its Application to Materials Science

分子研 宇田川 康 夫

Stern, Lytle, Sayers により EXAFS (X線吸収スペクトルに現れる微細構造) の構造決定法としての有効性が明らかにされてから約10年が経過した。この間我国でも研究者がそれぞれに工夫を凝らして機能的な分光装置の開発に努め、また83年度よりは高エネルギー研フotonファクトリーの EXAFS ポートの利用も可能になり、多彩な研究が行われてきた。しかし EXAFS の対象が生体物質からガラス、触媒、更には半導体表面と多岐多様に亘るために、発表、討論はそれぞれの関連学会においてはなされながらも EXAFS に興味を持つ研究者が一堂に会してこの方法が持つ問題点、あるいは将来性等について討論する機会はほとんどなかった。こうした状況の中で昭和59年1月に分子研において「EXAFS —実験と物性研究の現状」と題する研究会が開かれ、多くの参加者により有益な討論がなされた。

その自然の延長として企画されたのが本岡崎コンフェレンスである。当初60年度を予定したが都合により59年度中に開催することとなり、外国人招待者とのコミュニケーションが心配されたが幸い杞憂に終り、E.A. Stern 教授(Univ. Washington), F.W. Lytle 博士(Boeing Aerospace), D.C. Koningsberger 教授(Eindhoven Univ., オランダ) P.H. Citrin 博士(ATT, Bell)の4名の参加を得てこれに国内参加者44名を加えて60年3月18日~20日に行われた。

Stern, Lytle 両氏は言うまでもなく EXAFS の創始者であり、前者は理論的側面と共に非晶質の構造決定に活発に研究を続けており、後者は触媒、近年は特に多元合金触媒の構造を精力的に研究している。Koningsberger 教授も触媒構造、特に吸着による触媒構造の変化に注目すべき成果を挙げており、一方 Citrin 博士は超高真空中での清浄表面への吸着現象を、いわゆる SEXAFS により明らかにしつつある。

長倉所長の Welcome Message により始ったコンフェレンスは下記のプログラム通り、表面、触媒、錯体、非晶体、測定技術の各セッションに分類され、また “Related Topic” として X線異常散乱についての講演、討論も含まれている。

E.A. Stern “Obtaining the Pair Correlation Function from EXAFS Measurement”

P.H. Citrin “New Direction of SEXAFS; Reactive Chemisorption and Clean Surfaces”

太田俊明 (高工研) “Performance and Application of Soft X-Ray Double Crystal Monochro-

mator at PF”

大柳宏之 (電総研) “Fluorescence-detected X-ray Absorption Spectroscopy Applied to Structural Characterization of Very Thin Film”

藤川高志 (横国大) “Theoretical Investigation of SEXAFS and Related Techniques”

小杉信博 (東大) “Many-electron Effects in XANES”

F.W. Lytle “Determination of Catalyst Structure by the EXAFS Techniques”

黒田晴雄 (東大) “EXAFS Study of the Catalysts Derived from Metal Carbonyls”

岩沢康裕 (東大) “Surface Design of Solid Catalysts – EXAFS Studies of Highly Active SiO_2 – attached Mo dimer Catalysts”

D.C. Koningsberger “An EXAFS Structural Study of the Metal-support Interface in Highly Dispersed Metal-on-support Catalysts”

上野晃史 (豊橋技科大) “Catalyst Preparation Procedure Probed by EXAFS Spectroscopy”

宇田川康夫 (分子研) “An *in situ* EXAFS Study of Cu/ZnO Catalyst”

池田重良 (阪大) “Effect of Oxidation State on the local Structure of Metal Compounds in Solution”

山寺秀雄 (名大) “EXAFS Studies of Ammine and Ethylenediamine Complexes of Cu(II) and Ni(II) in Aqueous Solutions”

大滝仁志 (東工大) “An EXAFS Study of Ni(II) – Zn(II) – glycinate Complexes in Aqueous Solution”

鳥海幸四郎 (分子研) “EXAFS Study of One-dimensional Ni(II) – Ni(IV) Mixed Valence Complexes”

早稻田嘉夫 (東北大) “Determination of the Local Chemical Environment around a Specific Atom in Disordered Materials by the Anomalous X-ray Scattering Techniques”

寺内暉 (関学大) “EXAFS Studies on Amorphous Materials and Glasses”

村田隆紀 (京教大) “Local Lattice Relaxation in Alkali Halide Solid Solution”

D.C. Koningsberger “The Eindhoven Laboratory EXAFS Facility”

佐野充 (名大) “Two Laboratory EXAFS System; Advantage and Disadvantage”

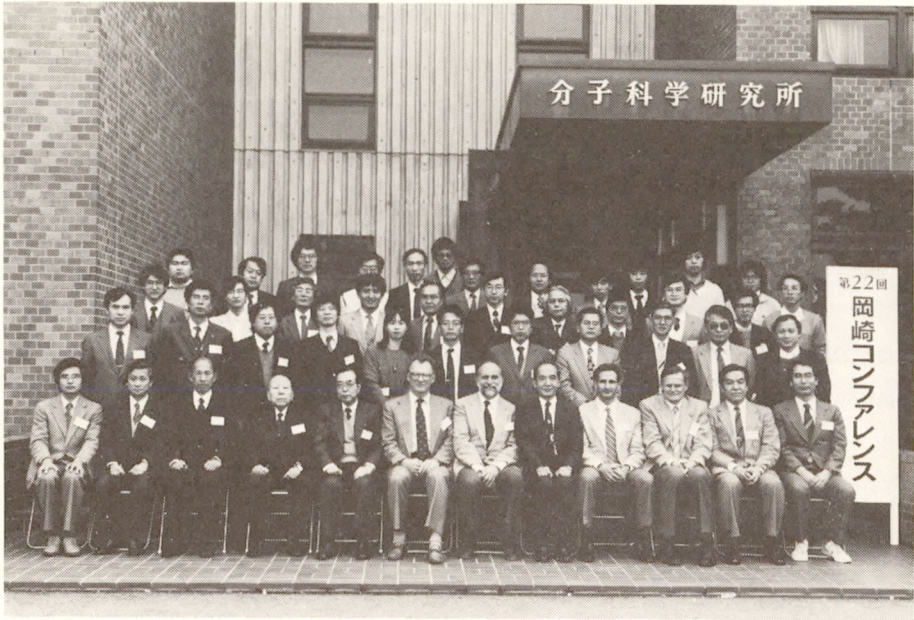
直江俊一 (金沢大) “A System for EXAFS Experiment Constructed of an X-ray Diffractometer and a Curved Crystal Spectrometer”

田路和幸 (分子研) “Laboratory EXAFS Spectrometer with a Bent Crystal, SSD, and Fast Detection System”

谷口一雄 (大阪電通大) “Laboratory EXAFS for Soft X-ray Region”

この他にレセプションの際には“After Dinner Talk”として Stern 教授により“Some Personal Thoughts About EXAFS”と題するフーリエ変換の技法を用いた EXAFS の解析法の発見の経緯についての思い出話があり、出席者に感銘を与えた。

このコンファレンスは恐らく日本における最初の EXAFS を主題とした国際研究集会であり、我国と海外の研究者の交流の場として大きな意義があった。



第23回 岡崎コンフェレンス

Ten Years in Molecular Science: Progress and Opportunities

分子研 廣 田 榮 治

分子研 井 口 洋 夫

分子科学研究所が発足して早くも10年が経過した。この間の進歩は実に目覚しく、研究所創設準備の段階では想像もしなかった画期的な展開も多々見受けられる状態である。この機会に、分子科学の分野で活躍されている国内外の第一線の研究者をお招きし、過去10年の成果をふりかえるとともに、今後の発展を討議するため標記の岡崎コンフェレンス“分子科学10年：進歩と将来動向”を企画した。分子科学研究所創設10周年の記念行事に先立って行ったため、従来の岡崎コンフェレンスでは3日間にわたる会期が、昭和60年5月7日、8日の2日に限定された。講演、討論に十分な時間がとれなかったこと、また予算、場所等の制約のためとはいいながら是非招へい申し上げるべき方々をお誘いできなかったことを世話人として誠に申し訳なく思っている。以下コンフェレンスの概略を紹介する。討議内容が分子科学全般にわたっており、また、全部の講演に出席できなかったため世話人の理解が不充分であることをお断りしておきたい。幸いなことに装置開発室や技術課のスタッフが中心になってビデオを収録しているので、詳細はそれを参照されたい（連絡先：内田章分子研技術課長）。

第1日目、5月7日の午前は長倉所長のあいさつ、Welcome address につづいて

G. Herzberg (NRC, Canada): “Molecular Rydberg Transitions”,

W. Klemperer (Harvard Univ.): Spectroscopy of van der Waals Molecules: Complexes of the First Row Hydrides”,

E. Hirota (IMS): “High Resolution Spectroscopy of Transient Molecules: Past and Future”,

M. Tsuboi (Univ. of Tokyo): “Inversion and Torsion in Primary Amines”

の講演が行われた。Herzberg 博士はリドベルグ遷移の重要性を NH_4 Schuler バンド、Schuster バンドおよび H_2F , D_2F を例によって強調した。Klemperer 教授は分子線中に生成する van der Waals 錯体分子 $(\text{HF})_2$, $\text{C}_2\text{H}_2 \cdots \text{HF}$, $\text{Ar} \cdots \text{HCl}$, $\text{H}_2\text{O} \cdots \text{CO}$, $\text{NH}_3 \cdots \text{HCCH}$, $\text{NH}_3 \cdots \text{H}_2\text{O}$ 等の構造と分子内運動をマイクロ波、ラジオ波、さらに最近では赤外レーザーを用いてしらべた結果について報告した。とくに赤外レーザーを用いてえた振動励起状態の寿命に関する研究は注目を集めた。広田は化学的に活性な分子の高分解能分光研究について分子研での成果を紹介した。

坪井教授はアミン類 NH_2X , $\text{X} = \text{CH}_3, \text{NH}_2, \text{OH}$ の大振幅運動 (反転, 振れ振動) を, 単に電子基底状態だけでなく励起状態についても詳細に論じた。

5月7日午後前半は,

G.C. Pimentel (Univ. of California): "Mode Selective Excitation of Bimolecular Reactions in Cryogenic Solids",

M. Ito (Univ. of Tohoku): "Highly Excited States of NO as Studied by Two-Color Double Resonance Spectroscopy",

H. Baba (Hokkaido Univ.): "Nonradiative Electronic Relaxation in Polyatomic Vapors: Azabenzenes::

の講演が行われた。Pimentel教授はチッ素などの低温マトリックス中でおこる反応, 例えば, $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{F}_2$, $\text{CH}_2\text{CCH}_2 + \text{F}_2$ では振動励起によって異なった経路への分岐重率が変わるといふ興味ある結果を報告した。伊藤光男教授は2つの異なった波長のレーザーを用いて NO 分子の高いドベルグ状態 $np\ n = 7 \sim 8, n \geq 20, nf\ n \geq 8 \sim 9$ を検出し, 角運動量結合様式などを通じて各状態の性格を明らかにした。馬場教授はアザベンゼン類, とくにピリジンをとりあげ, 気相における電子励起状態からの無輻射緩和過程に回転依存性のあることを見出した。

後半は,

S.A. Rice (Univ. of Chicago): "Collision Induced Vibrational Relaxation: An Overview of Experiment and Theory",

N. Mataga (Osaka Univ.): "Picosecond Laser Photolysis Studies of Photochemical Electron Transfer Phenomena in Liquid Solutions",

G.L. Closs (Univ. of Chicago, IMS): "Intramolecular Electron Transfer in Organic Radical Ions",

K. Kuchitsu (Univ. of Tokyo): "Dynamical Processes Initiated by Collision of Excited Atoms"

の講演があった。Rice教授は衝突による振動緩和においては, 振動の対称性が重要であること, また I_2 -グオキサル等の van der Waals 分子の前期解離等を実験および理論の両面から論じた。又賀教授は縮合多環化合物中の電子移動過程をピコ秒レーザー分光法によってしらべた結果について論じた。Closs教授も有機ラジカルイオン中の分子内電子移動過程を紹介した。朽津教授はリドベルグ原子などの励起原子が衝突を通じて誘起した化学反応をふくむ様々な動的過程について興味ある結果を示した。

第2日目, 5月8日午前の前半には,

I. Tanaka (Tokyo Inst. Tech.): "Two Color-Multiphoton Excitation of NO_2 ",

A. Weller (Max Planck Inst. Göttingen): "Intramolecular Photoinduced Electron-Transfer

Processes in Polyethylene-linked Electron-Donor-Acceptor Systems, Nuclear Hyperfine Coupling versus Spin Exchange Interaction”,

S. Nagakura (IMS): “Magnetic Effect in Molecular System”

の講演があった。田中教授は2台の色素レーザーを用いた多光子励起の分光法によるハロゲン分子のイオン対状態の研究、 NO_2 分子については 2^2B_2 からのケイ光をモニターとして、 1^2B_2 の振動状態を明らかにした結果を紹介した。Weller 教授は長いメチレン鎖で隔てられたドナーとアクセプターの間の光誘起電子移動過程をとりあげ、メチレン鎖の長さに対して超微細相互作用、スピン交換相互作用等の役割がどのように変化するかを示した。長倉所長は化学反応の磁場効果が、 g 値の差によるゼーマン効果、超微細構造、以上2つの因子の混合、準位交叉、三重項、緩和等の機によって統一的に分類、説明できることを実例を混じえて示した。

午前後半には、

K. Yoshihara (IMS): “Ultrafast Processes in Molecules”,

H. Tsubomura (Osaka Univ.): “Photoelectrochemistry of Noble Metal Coated Silicon Electrodes”,

Y. Toyozawa (Univ. of Tokyo): “What Governs Localization and Delocalization of Electrons and Excitons?”

の講演があった。吉原教授はナノ秒、ピコ秒レーザーによるベンゼン等の励起状態での動的過程について過去10年の成果を報告した。坪村教授は貴金属で覆われたシリコン電極が極めて高い光電変換効率を示すことを指摘した。豊沢教授は電子や励起子の運動を、電子・電子間のクーロン相互作用、電子・格子緩和等の因子を用いて統一的に論じた。

5月8日午後の前半は、

G.G. Hall (Kyoto Univ.): “Electrostatic Models of Molecules”,

H. Inokuchi (IMS): “Progress in Study of Organic Conductors”,

H.C. Wolf (Univ. Stuttgart): “Structure and Dynamics of Excimers in Organic Crystals. ENDOR and Picosecond Studies”,

H. Iwamura (IMS): “Organic Syntheses Inspired by Theory”

の講演が行われた。Hall 教授は古典的な静電的モデルによって分子の性質を論じた。井口は有機電導体研究の発展の歴史と、その最近の成果の一つである分子ファスナーについて述べた。Wolf 教授はピレンなど多環芳香族化合物結晶のエキシマーの構造、相転移の動力学について最近の研究成果を示した。岩村教授は有機強磁性体へのアプローチとしてのポリカルベンの特性について、実験結果と将来への展望を述べた。

5月8日午後後半は分子理論に関する下記の3講演があり、最近の進歩および将来の見通し

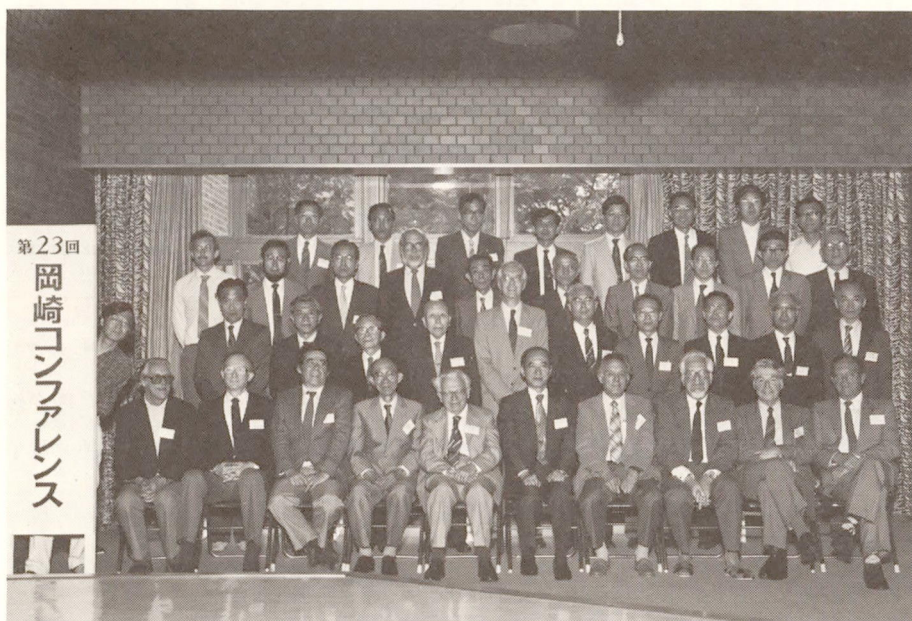
がそれぞれ述べられた。

R.G. Parr (Univ. of North Carolina): “The Past and Future of Calculation and Concept in the Quantum Theory of Electronic Structure of Matter: Density Functional versus Other Approaches”,

K. Morokuma (IMS): “Computational Chemistry-Past, Present, and Future”,

P.-O. Löwdin (Univ. of Florida): “Some New Methods under Development in Quantum Molecular Science”,

最後に井口のまとめで閉会した。招へい者は国内15名、国外11名（分子研に滞在中の Closs, Lippert 両教授、京大の Hall 教授をふくむ）であった。



第24回 岡崎コンフェレンス

Future Prospect in Quasi-One-Dimensional Systems”

—Charge Transfer and Electron-Phonon Interaction—

分子研 那 須 奎一郎

近年、種々な新低次元物質が次々と合成されてきており、その光学的、電気的性質が多くの研究者の興味を集めている。遷移金属錯体が鎖状に連結したハロゲン架橋型混合原子価錯体やフタロシアニン、BEDT-TTF, TTF'・クロルアニル等々の有機電荷移動型錯体、ポリアセチレン、ポリピロール等の有機ポリマー、モリブデン、タングステン、バナジウム等の遷移金属のブロンズ系化合物等が代表的なものである。物性物理学の視点にたったこの種の物質に関する研究の方向は、これら新物質の中に、これまでの伝統的な無機の三次元的物質にはなかった新しい現象を見い出し、できればその中から新しい概念を引き出したいというものである。一方、化学的な視点にたったこの種の物質に関する研究の方向は、これまで蓄積されてきた分子科学の知見を駆使して分子や原子に微視的設計をほどこし、目的とする物性や機能を有する物質を生成しようとするものであろう。これ等の二つの視点はこの分野の研究に於いてあたかも織物の縦糸と横糸のように相互にからみあい相補い乍ら、総体としてこの分野の研究を発展させてきたと言えよう。この結果、日本に於いて有機超伝導体や特異な集団運動を示す電荷密度波状態等が発見され、一つの全盛期をむかえようとしている。

当然の事ながら、この研究分野は分子科学と物性物理学との境界分野の一つであり、分子研もこれまでこの研究に重要な役割をはたしてきた。このような状況を鑑みて、この分野の研究を一層進展させるべく、辻川郁二（京大理）、丸山有成、三谷忠興、那須奎一郎（分子研）が中心になり本会議を開催することになった。会議のプログラムは以下の通りである。

December 12 (Thursday)

13:20 – 13:30 H. Inokuchi (IMS)

“Welcome Message from IMS”

13:30 – 14:00 I. Tsujikawa (Kyoto Univ.)

“Opening Remarks”

“Properties of New Pt Mixed Valence Complexes”

14:00 – 15:00 P. Day (Oxford Univ.)

“Experiments and Theories about Electron-Phonon Coupling in Mixed Valence Com-

pounds”

15:20 – 15:50 M. Yamashita (Kyushu Univ.)

“Synthesis, Structure and X-Ray Photoelectron Spectra of Halogen-Bridged One-Dimensional $M^{II}-M^{IV}$ Mixed-Valence Complexes of Pt, Pd, and Ni”

15:00 – 16:05 K. Toriumi and *T. Ito (IMS, *Tohoku Univ.)

“Few Comments on the Structure of Halogen-Bridged One-Dimensional M (II)-M (IV) Mixed-Valence Compounds”

16:05 – 16:40 K. Nasu (IMS)

“Many-Electron System Strongly Coupled with Phonon in One and Two-Dimensional Crystals, Adiabatic and Inverse Adiabatic Natures”

16:40 – 17:00 H. Tanino (Electrotechnical Laboratory)

“Pressure Effect of the Electron-Phonon System of the Halogen-Bridged Mixed-Valence Metal Complexes”

17:00 – 17:20 Y. Wada (IMS)

“Charge Transfer Exciton in Halogen-Bridged Mixed-Valence Complexes”

17:20 – 17:50 S. Kurita and M. Tanaka (Yokohama National Univ.)

“Electronic Band Structure and Resonance Raman Scattering of Halogen Bridged Platinum Complex”

18:00 – 20:00 Reception

—Second Floor of Cafeteria—

December 13 (Friday)

9:20 – 10:20 T.J. Marks (Northwestern Univ.)

“Conducting Organic Polymers Constructed from Metallomacrocycles”

10:20 – 10:40 T. Inabe (IMS and Northwestern Univ.)

“Charge Transport and Electronic Structure of the One-Dimensional Phthalocyanine, “Molecular Metals” ”

11:00 – 11:30 G. Saito (ISSP of Tokyo Univ.)

“Charge Transfer Complexes of Capped Donors (BEDT-TTF Series), Uncapped Donors (TTC_n-TTF Series), and Others”

11:30 – 12:00 H. Kobayashi, R. Kato and *A. Kobayashi (Toho Univ., *Tokyo Univ.)

“An Approach to the Design of Organic Superconductor—Structure and Conductive Properties of (BMDT-TTF) (TCNQ) and (DSeDTeT)₂ Br—”

13:30 – 14:00 H. Fukuyama (ISSP of Tokyo Univ.)

“Spin-Peierls Transition in Quasi-One-Dimensional Systems”

14:00 – 15:00 M.H. Whangbo (North Carolina Univ.)

“Electronic and Intramolecular Structural Localizations in Conducting Organic Salts”

15:20 – 15:50 T. Mitani (IMS)

“Neutral-Ionic Transition”

15:50 – 16:20 N. Nagaosa and *J. Takimoto (ISSP of Tokyo Univ., *IMS)

“Theory of Neutral-Ionic Transition in Mixed-Stack Compounds”

16:20 – 16:50 Y. Tokura (Tokyo Univ.)

“Phase Transitions of Electronic Structure in Polydiacetylenes”

16:50 – 17:20 Y. Nozue and T. Goto (Tohoku Univ.)

“Exciton Luminescence in Poly (N-vinylcarbazole)”

December 14 (Saturday)

9:20 – 10:20 A.J. Heeger (California Univ., S.B.)

“Semiconducting and Metallic Polymers, New Materials, New Concepts and New Phenomena”

10:20 – 10:50 K. Yoshino and K. Kaneto (Osaka Univ.)

“Properties of Electrochemical Prepared Poly-p-phenylene and Heterocyclic Conducting Polymer Films”

11:00 – 11:30 T. Yamabe (Kyoto Univ. and I.F.C.)

“Theory of Electron-Phonon Interaction in Conducting Conjugated Polymers”

11:30 – 12:00 R. Aoki (Kyushu Univ.)

“Superconducting Character in Molecular Intercalated Layer Compounds”

13:00 – 14:00 B.K. Chakraverty (CNRS, Grenoble)

“Bipolarons and Superconductivity”

14:00 – 14:30 H. Nagasawa (Tsukuba Univ.)

“Polaron and Bipolaron in Quasi-1-D-Conductor Vanadium Bronze System”

14:30 – 15:00 M. Sato, Y. Matsuda and M. Onoda (IMS)

“Superconductivity and CDW in Molybdenum Oxides and Bronzes: Search of Polaronic Properties”

15:00 – 15:10 K. Kobayashi (Toyama Univ.)

“Concluding Remarks”

会議では、まず井口教授により岡崎コンフェレンスの歴史と主旨に関する説明があり、ついで辻川教授は本第24回の会議に関する総合的報告を行い、次に辻川研で最近発見されたハロゲン架橋型混合原子価錯体に於ける負の膨張係数に関する興味ある実験結果を報告し、それが混合原子価に由来する事を述べた。Day 教授はこれを受けてウォルフラムズ赤色塩、 Cs_2SbCl_6 、 CsAuCl_3 等に於いて実現されている混合原子価状態が電子格子相互作用を通して、光吸収帯に如何なる形状となって現われるかを局在電子モデルによって示した。この種の物質の光物性と電子格子相互作用との関連は日本で現在きわめて精力的に研究されている問題の一つであるが Day 教授の後を受けて、山下博士はウォルフラムズ赤色塩型類似結晶の合成、鳥海博士は結晶構造解析、那須はその光物性の理論、谷野博士はその圧力効果、和田博士は電荷移動型励起子、栗田教授は共鳴ラマンと紫外スペクトルに関して、各々最新の研究結果を報告し、会議の一つのピークを作り出した。

第2日目は Marks 教授と稲辺博士によるフタロシアニンを基礎にした伝導性固体の設計に関する報告ではじまった。この種の物質では錯体の配位子と金属との双方が電気伝導に寄与すると思われており有機と無機の間間的性質をもつものである。この物質では伝導性は一次元性が強いにもかかわらず、パイエルス転移は存在せず、しかも電気抵抗が低温で増加するという興味ある性質が発表され、アンダーソン局在との関連が福山教授によってコメントされた。以後話題は日本で現在進展している有機電荷移動型錯体を基礎にした伝導性物質の設計に移り、斎藤助教授は BEDT-TTF Series の設計と超伝導につき、又、小林(速男)教授は (BMDT-TTF) (TCNQ) と $(\text{DSeDTeT})_2\text{Br}$ に関して報告した。一方、福山教授はスピンの起すパイエルス転移であるスピン・パイエルス転移に関する研究を報告し、特に揺ぎの果たす役割の重要性について強調した。次に Whangbo 助教授は同助教授がここ数年間やってきた Hückel 理論に基づく低次元物質のエネルギー・バンド計算について報告したが、この報告は金属錯体、有機電荷移動型錯体、ブロンズ系化合物等多様にわたり、本会議に登場する物質の大半を包含するものであった。以後、三谷助教授と滝本・永長両博士による中性・イオン性転移の報告、十倉講師によるポリダイアセチレンの相転移、後藤教授によるポリビニール・カルバゾールの励起子に関する報告が続いて行われた。

第3日目は Heeger 教授の有機ポリマーに関する総合報告ではじまった。ポリアセチレンに於けるソリトンの話にはじまり、光励起状態からソリトン対が生成するピコ秒分光の問題が、この分野の最先端のテーマであり、更に、これは三次の非線型分光の問題へと発展しつつある事が示された。これを受けて吉野助教授は種々なポリマーの伝導性に関して報告し、又、山辺教授は短いポリエチンに於いては格子振動を介した電子間引力がポリエチンの長さに依存して変化する事を報告し、一方、青木助教授は NbSe_2 における層間への有機分子のインターカレーション

ンと超伝導との相関について発表した。

さて、この会議の主テーマの一つは電子格子相互作用であるが、超伝導の分野での最近の話題の一つに **Bipolaron-superconductivity** という問題がある。電子格子結合が **Migdal** 近似で扱えるような弱い場合の超伝導体ではなく、**Migdal** の近似が破綻する程に強い場合、超伝導体は如何なる物性を示すかという問題である。これに関連し、**Chakraverty** 教授はポーラロン描像に基づく理論を展開し、電子間クーロン斥力が電子格子相互作用と同程度に強い場合は **BCS** 型というよりは超流動型の伝導が起る事を示唆した。これを受け長沢教授はバナジウム・ブロンズに於けるバイポーラロンの存在とその集団運動につき報告し、又、佐藤助教授はモリブデン・ブロンズに於ける **CDW** のすべり運動に関して報告した。

以上の議論は小林（浩一）教授により系統的に **Concluding Remark** としてまとめられ、**Future Prospect** とは結局新物質の合成と新しい概念の創造とを車の両輪として発展させていく事に他ならない事が提案され、参加者一同はその重要性を一層強く認識したと言えよう。



第25回 岡崎コンフェレンス

Dynamic Processes of Photoisomerizations

金沢大薬 伊藤 道也

光化学反応なかでも光異性化反応は、光励起状態の研究とともに古くよりフラッシュフォトリシスの研究対象であった。1960年代末よりレーザー分光の発達とともに、フラッシュフォトリシスによる研究が主として3重項状態の関与する反応であったのに対して、レーザーフォトリシスによる研究は、1重項状態にかかわるナノ秒ピコ秒の時間領域での研究を可能にした。これによりカルベン、ナイトレンや各種のラジカル類の反応の機構が明らかとなり、またシストランス異性化反応や励起状態プロトン移動とその緩和過程などが再検討されるようになった。この数年間は、サブピコ秒やフェムト秒の超高速反応の研究、2波長2段階励起による中間体の捕捉、時間分解共鳴ラマン分光などの新しい研究法の開発による光異性化反応の研究や、超音速分子流による研究などが著しく発展して来た。一方、光化学の応用面では、光化学的ホールバーニンングや光スイッチング、あるいは固体表面の光化学処理などが注目されるようになっている。かかる状況にあって広義の光異性化に対する基礎的研究、特にその動的過程の研究の発展が期待されている。この分野における国内の研究者による研究のレベルは高く、ある分野では世界をリードする研究も散見される。以上のような状況のもとで、筆者らは京大理、広田襄教授や群馬大工、閑春夫教授の協力を得て本コンフェレンスを計画した。

計画にあたって、「シストランス異性化とその関連の現象」「プロトンまたは水素原子移動反応」および「カルベン、ナイトレン、ラジカルなどの光化学反応中間体の捕捉とその機構」に重点を置いた。また国外からの招待講演者は過去の岡崎コンフェレンスの招待講演者と重複しないこと、研究分野のバランスをとることなどを考慮し後述の5氏となった。

カリフォルニア大（ロサンゼルス）のEl-Sayed教授には J. Phys. Chem. の Editor として、また同大学の化学科の主任として大変忙しい中を特にご参加をお願いした。国内研究者については、出来るだけ新しい研究、レーザー分光に関するものを中心とした。またこれらの研究の理論的基礎として、ご活躍の著しい大阪市大理の西本吉助教授と分子研の大峰巖助教授にご講演をお願いした。

The 25th Okazaki Conference on Dynamic Processes of Photoisomerizations

January 16 (Thursday) – 18 (Saturday), 1986

January 16th (Thursday)

13:20 – Welcome Address from IMS S. Nagakura
Opening Remarks M. Itoh

Plenary Lecture

13:30 – 14:30 M.A. El-Sayed (University of California, Los Angeles) M. Ito Presiding
Energy Distribution, Dissociation and Ionization Studies by Two-Color Picosecond
Laser Mass Spectrometry

Excited-State Proton of Hydrogen Atom Transfer. I.

14:30 – 15:00 M. Itoh (Kanazawa University) P.F. Barbara Presiding
Two-Step Laser Excitation Fluorescence Studies of the Excited-State Proton Transfer
in Solution

15:00 – 15:30 Coffee Break

15:30 – 16:00 K. Fuke and K. Kaya (Keio University) P.F. Barbara Presiding
Excited State Double Proton Transfer Reaction of 7-Azaindole and 1-Azacarbazole Dimer
Studied in a Supersonic Jet

16:00 – 16:30 H. Shizuka (Gunma University) J.C. Scaiano Presiding
Laser Flash Photolysis Study on the Hydrogen-Atom Transfer Reaction from Triplet
1-Naphthol to Ground Benzophenone

16:30 – 17:00 H. Inoue (Tokyo Metropolitan University) J.C. Scaiano Presiding
Proton Transfer Induced Tautomerization in the Excited State and Radiationless Deacti-
vation through Hydrogen Bonds

17:00 – 17:30 K. Nishimoto (Osaka City University) I. Ohmine Presiding
ab initio MO Study of the Mechanism of Some Photochemical Reaction.

18:00 – 20:30 Reception.

January 17th (Friday)

Excited-State Proton of Hydrogen Atom Transfer, II.

9:00 – 10:00 H.P. Trommsdorff (Univ. Scien. et Med. Grenoble) N. Hirota Presiding
Photoinduced Tautomerization and Hydrogen Atom Transfer Reactions in Carboxylic
Acid Crystals at Low Temperature

10:00 – 10:30 N. Hirota (Kyoto University) R. Mathies Presiding
Spectroscopy and Dynamics of the Excited States of o-Hydroxyacetophenone and Related Molecules

10:30 – 11:00 Coffee Break

11:00 – 11:30 T. Kitagawa, T. Ogura and A. Maeda* R. Mathies Presiding
(IMS and Kyoto Univ.*)

Resonance Raman Study on Proton Dissociated State of Bacteriorhodopsin: Stabilization on L-like Intermediate Having the all-trans Chromophore

cis-trans Photoisomerization and Related Phenomena.

11:30 – 12:00 I. Ohmine (IMS) K. Nishimoto Presiding
A Theoretical Study for Photoisomerization Dynamics of π -Conjugated Molecules in Gas and Solution Phase

12:00 – 13:30 Lunch

13:30 – 14:30 R. Mathies (University of California, Berkeley) S. Tasumi Presiding
Femtosecond Isomerization Dynamics from Resonance Raman Intensities and Picosecond Dynamics from Time-Resolved Raman

14:30 – 15:00 H. Hamaguchi (University of Tokyo and IMS) S. Tasumi Presiding
Transient Raman Band Shapes and Vibrational Dynamics of S₁ trans-Stilbene in Solution

15:00 – 15:30 Coffee Break

15:30 – 16:30 P.F. Barbara (University of Minnesota) K. Yoshihara Presiding
Small Barrier Isomerizations in Solution and the Gas Phase

16:30 – 17:00 K. Tokumaru (Tsukuba University) K. Yoshihara Presiding
New and More General Aspects of Cis-trans Isomerization on Triplet Energy Surface

17:00 – 17:30 M. Irie (Osaka University) K. Yoshihara Presiding
Photoisomerization as a Tool for Controlling Molecular Functions

January 18 (Saturday)

Detection and Reaction of Photochemical Transient Species.

9:00 – 10:00 J.C. Scaiano (NRC, Canada) K. Maruyama Presiding
Photochemistry of Organic Reaction Intermediates

10:00 – 10:30 T. Shida (Kyoto University) K. Obi Presiding
Photoisomerization of Radical Ions as Studied by Optical and ESR Spectroscopy

10:30 – 11:00 Coffee Break

11:00 – 11:30 K. Hamanoue (Kyoto Institute of Technology) H. Hayashi Presiding
Time-Dependent T^*-T_1 Absorption Spectra of 2,4,6-Triisopropylbenzophenones in Solutions.

11:30 – 12:00 Y. Kajii, K. Obi, H. Kobayashi, and I. Tanaka H. Hayashi Presiding
Photophysics of Porphyrin Free Bases

12:00 – 12:20 T. Sugawara (IMS) K. Tokumaru Presiding
Photochemistry of 1-Azatriptycene

12:20 – 12:40 R. Nakagaki (IMS) K. Tokumaru Presiding
Photorearrangement and Photoredox Reaction of Bichromophoric Chain Molecules Containing Electron Donor and Acceptor Moieties

12:40 – Closing Remarks K. Yoshihara

岡崎コンフェレンスは、ゴードンコンフェレンスにならって講演要旨を作らない、記録をとらないのが主旨であるが、簡単にコンフェレンスの内容を紹介する。先ず長倉所長による歓迎の辞のあと El-Sayed 教授による特別講演からはじまった。内容は 2 波長の 2 つのピコ秒パルス励起による多光子イオン化－イオン解離を質量分析の時間分解的測定により、種々のイオンの振動緩和、再分配などの動的機構についてであった。その内容はもとより、同教授の手なれた語りと、明解さはコンフェレンス参加者に十分な満足感を与えるものであった。つづいて励起状態プロトン移動、水素原子移動のセッションとなり、まず筆者により、2 台のパルスレーザーを逐使した 2 段階励起蛍光分光法が励起状態プロトン移動とその緩和過程の動的機構の研究にいかにも有効であるかが、いくつかの例について示された。さらにコーヒーブレイクののち、茅教授による超音速ジェット中での 7-アザインドル 2 量体での 2 光子励起によるプロトン移動が述べられ、ジェット流中での励起状態プロトン移動として興味をもたれた。そのあと閑教授によって 3 重項状態における水素原子移動について詳細な研究が紹介され、さらに井上博士によりアントラキノン類に対する水素結合を通しての新しい選択的光増感反応と無輻射過程について興味ある結果が述べられた。1 日目の最後の講演者としての西本教授は、プロトン移動やシーストランス異性化についての *ab initio* 分子軌道計算による結果を述べられ、実験家にとって大いに示唆に富んだものであった。講演後も伊藤光男教授との間で議論がつづいたようであった。この日の最後は昨春増築が完成した職員会館の 2 階で所長招待のレセプションが開かれた。長倉所長の Welcome talk, 出席者を代表しての El-Sayed 教授のスピーチのあと 80 名近い出席者の

間で談笑がつづき快適な夕べであった。

2 日目は Trommsdorff 教授の講演よりはじまった。すなわち、2 量体型安息香酸結晶中のチオインジゴは R-site と B-site として存在し、この site interconversion は、近傍の安息香酸 2 量体におけるプロトンのトンネル効果により生成するタウトマー構造の変化を通して起るという。そしてこれらの系についてのホーバーニングの問題について述べられた。つづいて広田教授の講演では、*o*-hydroxy-acetophenone 類における分子内プロトン移動とその緩和過程のダイナミックスについて、電子構造との関連について述べられた。プロトン移動のセッションの最後は、他の講演と趣きを異にする北川教授のバクテリオロドプシンに関するものである。 H^+ ポンプタンパクで、クロモファーからタンパクへの H^+ の移動の時間分解共鳴ラマンによる研究で大変ユニークなものであった。

ここでシストランス異性化反応のセッションとなり、最初は大峰助教授のシストランス異性化の理論的研究であり、シストランス異性化において torsional な運動と vibrational な運動の減衰が異なるなど、大変興味あるものであった。2 日目午後は Mathies 教授の共鳴ラマン分光法によるシストランス異性化の動的挙動に関する講演で始まった。共鳴ラマン散乱強度を Heller の時間に依存した光学理論で解釈することによりフェムト秒領域での動的挙動に関する知見の得られること、またこの様な研究に於いては絶対散乱強度の測定によって均一幅と不均一幅を分離することが肝要であることが述べられた。実験・理論の両面に通じた Mathies 教授の持ち味が存分に発揮された研究で大変興味深かった。つづいて浜口助教授によるトランススチルベンの共鳴ラマンでは、プローブレーザー強度の増大によるラマンバンド巾の増大すること、これが S_1 状態にある分子の振動緩和していないホットな分子の割合の増加によるものであることが示された。これが他の S_1 状態でも見られる一般的現象とすると興味あるものである。さらに Barbara 教授の講演では、いくつかのテーマについて述べられたが、主なものとして化学反応速度における遷移状態理論に対する溶媒の動的な役割を実験・理論の両面から再検討しようとするものであった。今後の発展を期待したい。さらに徳丸教授の講演では、主として、 $\text{T}_n \leftarrow \text{T}_1$ 吸収によるスチルベン誘導体の異性化の研究が述べられたが、その豊富な例に圧倒された。さらに 2 日目の最後である入江助教授の講演は、シストランス異性化反応を主として高分子機能に応用したもので、構造化学的にも機能性分子の設計からも大変興味あるものであった。その上エクサイティングなスライドとともに出席者一同を驚嘆させるもので、本コンフェレンスの講演の中で異彩をはなつものであった。2 日目の講演はここで終ったが、その後は会場をはなれた各所でアルコールの入った第 2、第 3 のコンフェレンスが開かれたようであった。

第 3 日目の冒頭の Scainano 博士の講演では、第 1 のパルスレーザー励起により、芳香族カルボニルやハロゲン化物よりラジカルなどの中間体を生成し、その $\text{S}_n \leftarrow \text{S}_{11}$ 吸収を第 2 のレーザ

一励起により測定する先端的研究法を用いた多彩な研究が述べられた。これは有機光化学の動的機構の研究のトップに相応しいものであった。次の志田教授による『ラジカルイオンの異性化反応』では、主として $C_{10}H_{12}^+$ からの種々の異性化反応を ESR, 電子スペクトル, 光電子分光などで追跡した研究が報告された。さらに浜ノ上助教授は、芳香族カルボニル類の 状態からの水素引き抜き反応についてのピコ秒分光による研究を述べられた。最後の 2 人は分子研の若い研究者によるもので、菅原博士はアザトリプチセンから生成するナイトレンの構造と、その異性化反応に関する完成度の高い報告をした。最後の中垣博士による講演では、電子供与基受容基を両端にもつ長鎖化合物における異性化反応で、鎖の長さにより異なる反応が起るという興味ある研究結果が述べられた。

以上は紙面の関係上全くの概要を記したものに過ぎないが、3 日間を通じて国内参加者からの質問や討論も極めて盛んで、岡崎コンフェレンス発足当時からの成長のほどが伺えた。これは二つの分野における国内研究者のレベルの高さに負うところがあると思われるが、さらにこのコンフェレンスを通じて内外の研究者間に、幾分専門外の研究者間の交流が盛んになり、益々研究の発展することを祈りたい。



日英協力事業報告

分子計算化学に関する日英シンポジウム

分子研 諸 熊 奎 治

1981年より、日英科学協力事業「分子科学」が実施され、(1)分子計算化学、(2)高分解能分光化学、(3)電子構造動力学、(4)放射光利用化学、(5)物質化学の分野において研究協力が行われ、現在までに50名余りの研究者が両国に派遣されていることは衆知のとおりである。この研究者交流の一環として、両国より各5名程度の研究者が参加する“5+5ミーティング”の別名のあつた小シンポジウムがあり、1984年4月には分子研において「物質化学」に関して、また1984年11月には英国ダースベリー研究所において「放射光利用化学」についてのシンポジウムが開催された。

1985年9月17日から19日まで分子研にて開催された「分子計算化学に関する日英シンポジウム」は丁度第3回“5+5ミーティング”に当たっている。英国では、ダースベリー研究所が中心となつて、計算科学に関するいくつかの共同研究グループが組織され、共同研究に成果をあげているが、今回は「分子の電子状態」グループからSaunders博士(ダースベリー研)、Handy博士(ケンブリッジ大)、Robb博士(クイーンエリザベス大)、Gerratt博士(ブリストル大、個人参加)、「原子・分子衝突」グループからConnor博士(マンチェスター大)、Clary博士(ケンブリッジ大)、「溶液・液体」グループからSinger教授(ローヤルホロウェイ大)、Fincham博士(ヨーク大)の精鋭をむかえ、小さいながら親密で且つ内容の濃いシンポジウムを行うことが出来た。日本側出席者は、所外4名、所内6名(内客員1名)、および所内の若手研究者数名であつた。

シンポジウムのプログラムは次の通りである。

September 17, Tuesday

13:00 Introduction of Participants

K. Morokuma

13:10 K. Morokuma (IMS)

Theoretical Studies of Molecular Electronic Structure in Japan and Some Recent Progress
at IMS

13:55 V. Saunders (Daresbury)

Parallel and Vector Processing in Quantum Chemistry

14:40 Coffee Break

15:10 N.C. Handy (Cambridge)

Theoretical Chemistry at Cambridge

15:55 K. Hirao (Nagoya)

Cluster Expansion of the Wave Function

16:40 M.A. Robb (Queen Elizabeth College)

A Computational Strategy for the Calculation of Transition Structures of Organic Reactions

17:25 J. Gerratt (Bristol)

Spin Coupled Valence Bond Theory

18:10 Reception

September 18, Wednesday

9:00 H. Kashiwagi (IMS)

New Supercomputer System at the IMS Computer Center and an initio MO Computations on Large Molecules

9:45 H. Nakamura (IMS)

Theoretical Studies of Molecular Collisions and Reaction Dynamics in Japan, and Recent Activities at IMS

10:30 Coffee Break

11:00 J.N.L. Connor (Manchester)

Distorted Wave Theory of Chemical Reaction

11:45 I. Shimamura (Inst. Phys. Chem. Res. & IMS)

Electron Transfer in Low-Energy Ion-Atom Collisions

12:30 Lunch

13:30 D.C. Clary (Cambridge)

Collisions and Photochemistry of Polyatomic Molecules

14:15 K. Sakimoto (Int. Space Science)

Influence of the Long-range Interaction of the Ion Molecule Reactions

15:00 Coffee Break

15:30 K. Nakanishi (Kyoto)

Theoretical Studies of Statistics of Solutions and Macromolecules in Japan, and Computer Simulation of Liquid Mixtures

16:15 Tour of IMS

September 19, Thursday

9:00 K. Singer (Royal Holloway College)

Semi-Classical Many-Particle Dynamics with Gaussian Wave Packets

9:45 Y. Kataoka (Kyoto)

Computer Experiments on Liquid Water and Aqueous Solutions by Simple Models

10:30 Coffee Break

11:00 D. Fincham (York)

Molecular Dynamics Applied to Molecular Liquid Mixtures and Plastic Crystals

11:45 I. Ohmine (IMS)

Photoisomerization Dynamics in Gas and Solution

12:30 Lunch

13:30 K. Nasu (IMS)

Periodic Kondo Hubbard Model for Quasi-One-Dimensional Organic Polymer m-Polydiphenylcarbene

14:15 General Discussions on Future Collaboration

15:00 Closing

日英の理論研究者がそろって一堂に会するのははじめてということもあって、各セッションは、まずそれぞれの国における研究の概況、共同研究の現状などについての紹介、また、大型計算機の設置状況についての説明があった。英国ではロンドン大学に CRAY-1S、マンチェスター大学に Cyber 205 があり、それぞれ全国の大学関係の研究や教育の共同利用に供しているが、1987年に研究専用のスーパーコンピュータを導入する計画が進行しているとのことである。また、計算科学プロジェクトでは、夫々の分野の汎用的なプログラムの開発と高速化が多数の協力によって進んでおり、プログラムのベクトル化においては今後日本が学ぶところが沢山あると思われる。英国側は、日本のスーパーコンピュータの発達に大きな期待をもっており、分子研に1986年1月導入予定の新システムの説明に熱心に耳をかたむけた。(本シンポジウムの前後に、英国側参加者の多くは、東大および京大大型計算機センターを訪問し、スーパーコンピュータの運用を直接目にする事ができた。)

それぞれの研究者の最近の研究結果の発表に対しては、熱の入った、つつこんだ議論がインフォーマルな、なごやかな雰囲気の中で行われた。シンポジウム最終日の午後には、将来の研究協力についての意見交換が行われ、「分子計算化学」の分野での一層の協力がのぞまれること、二国間協定その他現存する可能な方法によって特に若手の研究者の交流をはかるべきことなど意見が一致した。

研究会報告(昭和59年度)

均一系触媒作用の基礎過程とその制御

豊橋技科大工 伊 藤 健 児

錯体触媒を用いる均一系プロセスは多数の素反応が巧みに組み合わせられたシステムである。それらの基礎過程に影響する多様な支配因子を解明し、素反応を的確に制御することが新しいプロセスを生み出すうえでも、現在稼動している方法論を改良するためにも重要な課題と考えられる。本研究会では有機遷移金属化学で第一線の研究者を招き、下に示す三つのトピックスに焦点を絞って有機金属反応の制御に関連する問題点を明らかにすることを目的とした。研究会は昭和60年1月17日・18日の両日にわたり下記のプログラムにしたがって開催した。

〔1〕 酸化的付加と還元的脱離 (司会：小宮三四郎・東京農工大)

π -アリル Pd・Ru 錯体を形成する酸化的付加反応 山本隆一 (東工大資源研)

Ru 錯体へのアリル化合物の酸化的付加 伊藤健児・永島英夫 (豊橋技科大)

アリルパラジウム錯体の還元脱離 黒沢英夫 (阪大工)

trans および cis-ジアルキルパラジウム(II)錯体の立体配置と反応性の関係 山本明夫
・小沢文幸 (東工大資源研)

五配位ニッケルよりの還元的脱離機構 中村 晃 (阪大理)

〈速報〉カルボニル挿入反応の理論的研究 古賀伸明・諸熊奎治 (分子研)

〔2〕 メタラカルベン・メタラサイクルの生成と反応 (司会：鈴木寛治・東工大資源研)

コバルトメタラサイクルを経由する触媒反応 若槻康雄・山崎博史 (理研)

IVB族メタラサイクル化合物の合成・構造・反応 高谷秀正・真島和志 (分子研)

Rh(IV), Ir(IV)の μ -メチレン錯体の生成と反応 磯辺 清 (阪市大理)

遷移金属カルベン錯体を用いるメタラサイクル錯体の合成と反応制御 宮下 晃 (埼玉大・工)

〔3〕 小分子の活性化 (司会：村井真二・阪大工)

活性酸素種の反応性一均一・不均一系の接点 諸岡良彦 (東工大資源研)

オキシゲナーゼにおける金属イオンの役割 竜野睦宣 (阪大基礎工)

N₂を用いた触媒反応の開発に向けて 干鯛真信 (東工大)

酸化的付加機構におけるイオン機構とラジカル反応の寄与 (山本・永島), 還元的脱離におけ

る解離機構 (Pd; 小沢) と会合機構 (Ni; 中村) の相異, π -アリル・アリール錯体からの脱離が π -アリル保持で進行する (黒沢) など実り多い討論が行われた。ここで諸熊グループからの挿入反応の速報が入り、注目された。触媒反応の中間体として重要なメタラサイクル錯体については若槻らの理論と実験との対比は感銘深く、また高谷らのオキサおよびスピロメタラサイクルに関する斬新な成果は注目された。さらに F-T 合成やメタセシス中間体で重要なカルベン錯体について宮下のメタセシスとの関連性は多くの議論の対象となり、磯辺らの我国では珍しい複核カルベンについてその高い骨格安定性に議論が集った。第3部では不均一系と均一系における酸素原子の移行について諸岡により豊富な内容が提供され、竜野は生体内酸化との関連で興味ある内容の紹介を行った。最後に長い N_2 固定と触媒反応化の研究をもとに、干鯛により現状における問題点が指摘された。

本研究会では持時間の半分を討論にあてて全ての話題について活潑な討論が行われ有益な二日間であった。研究会開催の機会をお与え頂いた分子研の方々、およびお世話頂いた高谷氏はじめ化学試料室の皆様には厚くお礼申し上げる。

「超微粒子の生成とキャラクタリゼーション」

名大理学部 和田 伸彦

1985年2月16日、17日に表記研究会が行われた。金属微粒子の量子効果の検証を目標にして20年前に始まった超微粒子研究は、実験用試料としての“よい”超微粒子の作成を通じて“超微粉”としての応用面へも広がった。研究者も物理の分野から化学の分野へと広がって来た。物理の分野ではこれまで塵芥 (ちりあくた) として取り残されて来た超微粒子も、化学の分野では、コロイド、或いは錯体として古くから取り扱われて来ている。超微粒子の研究には先ずその実体がいかなるものか、よく握まえることが必要である。物理・化学両分野の研究者がそれぞれの立場から、その生成法や特性を通じて、超微粒子を論ずることを目的として開かれたものである。会を開くことが突然に決ったために、物理からは筆者の外八谷繁樹 (名大) 斎藤弥八 (豊橋技科大)、化学からは、丸山有成、木村啓作、榎敏明 (分子研) の諸氏が世話人となり急いで取りまとめたこともあって、お誘いした範囲やお願いした講演者の方々の選定も行き届きの点が多々あったにもかかわらず、100名近い出席者を得て有意義な会を過すことが出来たことは幸いであった。別表のプログラムにあるように講演の数がかなりもりだくさんで、

焦点がぼけているとの御指摘もあったが、両分野から、なるべく多く研究者が、それぞれの立場から超微粒子について自由に話していただくことを意図したものである。

大別して、溶液反応、気相反応、ノズル、ビーム法、による微粒子又はクラスターの生成法について興味ある話が多くあったが、キャラクタリゼーションに関してはまだ数が少かった。しかし、これから色々な方法で作られた試料について、箇々の特性が測定されることによって超微粒子の実体がだんだんわかって来ることであろう。その頃に又このような会が持てることを期待したい。

分子研研究会「超微粒子の生成とキャラクタリゼーション」プログラム

場所 分子科学研究所 101号室

2月16日 13時～18時30分

| | |
|------------------|--------------------------------|
| 和田 伸彦 (名大理) | はじめに |
| 上田 良二 (名城大理工) | 超微粒子研究の過去と現在 |
| 里子 允敏 (分子研) | 超微粒子の理論と実験との接点 一電子状態と構造について一 |
| 今野紀二郎 (東京理科大工) | W/Oマイクロエマルジョンを利用する超微粒子ゾルの調製。 |
| 杉本 忠夫 (富士写真フィルム) | 単分散コロイドの生成と粒径制御 |
| 砂本 順三 (長崎大工) | 脂質の化学構造と形成されるリポソームの溶液挙動 |
| 小林 俊一 (東大理) | 物性実験用金属微粒子の作成の問題点 |
| 佐光三四郎 (三重大教育) | Be, Mg, Ca 微粒子の伝導電子スピン共鳴 |
| 宇田 雅広 (金材技研) | 反応性プラズマガスによる金属及びセラミックスの超微粒子化技術 |
| 八谷 繁樹 (名大工) | 液体面上真空蒸着による超微粒子の作製 |
| 木村 啓作 (分子研) | 溶媒分散法による超微粒子の作成とそのコロイド化学 |

2月17日 9時～16時

| | |
|------------------|---|
| 斎藤 弥八 (豊橋技科大) | ノズルビーム法による金属クラスターの作成 |
| 篠原 久典 (分子研) | ノズルビーム法による分子クラスターの作成 |
| 友田 真二 (阪大理) | 分子クラスターのイオン化エネルギー: $(\text{H}_2\text{O})_n$ |
| 市橋 鋭也 (新技術開発事業団) | 微粒子の実験 |
| 吉沢 昭宣 (東大工) | 気相化学反応法による超微粒子の生成 |
| 岡本 祥一 (長岡技科大電気) | 低温分解法による超微粒子の合成と磁性 |

— 非晶質新種酸化鉄の生成 —

| | |
|------------------|-------------|
| 田崎 明 (筑波大物工) | 窒化物超微粒子 |
| 新井 敏弘 (筑波大物工) | 超微粒子の光学的性質 |
| 堀内 千尋 (京都工繊大工芸) | 酸化物微粒子の結晶構造 |
| 飯島 澄男 (新技術開発事業団) | 超微粒子の微細構造 |
| 井口 洋夫 (分子研) | おわりに |

「分子クラスター」

慶大理工 茅 幸 二

3月11日午後より12日夕刻までの1日半、分子科学研究所第一会議室に於て、分子クラスターに関する研究会が開催された。

原子・分子の塊状集団と定義されるクラスターは、孤立原子・分子（気体）と、そのアボガドロ数程度の凝集した液体・固体とを結ぶ興味ある集合系と言える。分子線技術の向上などにより、近年クラスター生成が比較的容易になった事、又微粒子などに代表される新素材としての有用性などから、クラスターに関する応用・基礎の研究が盛んに行われるようになった。クラスターは会合数 $n=2$ から ∞ まで多岐にわたり、そのため種々な興味と応用が考えられている。本研究会では、比較的小さなクラスターに焦点を絞り、分子科学から眺めた気相クラスターの分子構造、励起状態の動的挙動、反応性などについて論議を行った。末尾に当日のプログラムを記載するが、ここで各講演のあらましについて触れる。

第1日はほぼクラスターの構造についての研究発表で占められた。東大物性研の菅野教授は球状 Jellium モデルを用いアルカリ金属原子などのクラスターの構造・電子状態に関し、自らの研究共々最近の興味ある研究結果を講演され、クラスターがその結晶にない対称性の構造を持ちうる事など示唆された。又、名大教養の平尾氏による分子クラスター構造の理論研究に関するコメントがあった。分子研の長島・篠原氏等は、アンモニア・アンモニア水のクラスターイオンの安定構造を分子線での実験とモンテカルロ法での理論計算で対応させつつ報告を行った。東大（理）の近藤・見附氏は、高励起原子とクラスターの衝突によって生ずるクラスターの負イオンの生成過程、イオンの構造について CO_2 、 NO クラスターなどを例にとり興味ある報告を行った。続いて東北大金研の仁科氏が、レーザーを固体表面に照射して得られた Si 、 Ge

などの4属元素クラスターに関し、2価イオンの生成過程を含めて報告を行った。平岡氏（山梨大工）は、高圧質量分析法を用い、 CO_2 を溶媒和させたいいくつかのクラスターイオンについて、その熱力学的安定性を論じた。

このあと懇親会が行われ、参加者一同夜遅くまで、クラスター研究の将来などに論議の花を咲せた。

第2日は国立公害研の福山・尾崎氏によるクラスター生成に関する講演から始った。両氏は、 Ar_n などのクラスターの生成機構と、それらのクラスターと例えば CO_2 , N_2 分子との反応性についての研究成果を包括して報告した。

第2日はそれ以降クラスターのレーザー分光及び、動的挙動の研究に関する発表がなされた。伊藤（光）氏（東北大理）らは、有機分子のイオン化ポテンシャルの溶媒和による低下を二波長イオン化分光法により研究した例を報告し、慶大理工の富宅氏は、有機分子の異性化反応の溶媒効果をジェット分光法で検出した例を述べた。理研から参加した高見氏は赤外レーザーを分子線に用い、クラスターの赤外吸収を直接測定する可能性に示唆を与えた。

第2日の午後は、分子研の木村教授によるレーザー光電子分光法でのクラスター研究について、分子研グループのこれまでのさまざまな研究例についての講演で始まり、続いて伊藤（道也）氏（金沢大薬）らによる有機vdW錯体が励起電子状態でエキサイプレックスを形成する過程についてのレーザー分光法での詳細な研究報告がなされた。又、土屋・山内（東大教養）氏らはアニリン- Ar vdW 錯体などの高分解能レーザー分光による分子構造決定について、梶本氏、（東大教養）は、 $(\text{NO})_2$ vdW 分子を例として、vdW 錯体特有の化学反応の可能性について、研究例をまじえつつ討論を行った。最後に朽津耕三教授（東大）のまとめがあり、盛会裡に研究会を終えた。この研究会のお世話を載いた分子研木村克美教授、旅費等の御心配をお掛けした吉原教授に深く感謝する。所外世話人慶大理工 茅幸二、東大教養 土屋莊次、東大理 近藤保。

分子クラスター研究会講演プログラム

3月11日～3月12日（岡崎、分子研）

3月11日

| | | |
|-------------|----------------|-----------------|
| 13:30～13:40 | 茅幸二（慶大理工） | 序 |
| 13:40～14:30 | 菅野暁（東大物性研） | クラスターの構造と電子状態 |
| 14:40～14:50 | 平尾公彦（名大教養） | 分子クラスターの構造（理論） |
| 14:50～15:20 | | 休憩 |
| 15:20～15:50 | 長島雲平、篠原久典（分子研） | 分子クラスターの安定性について |

(分子線実験と理論計算によるアプローチ)

- 15:50~16:00 友田真二 (阪大) コメント
- 16:00~16:30 近藤保, 見附孝一郎 (東大理) Rydberg 原子によるクラスター分子のイオン化
- 16:30~17:00 仁科雄一郎 (東北大金研) 4 属元素分子クラスターと励起状態
- 17:00~17:30 平岡賢三 (山梨大工) CO_2 を溶媒とするクラスターイオンの構造と反応性
- 18:00~ 懇親会

3月12日

- 9:00~9:50 福山力 (国立公害研) クラスターの生成と反応
- 9:50~10:00 山下雅道 (宇宙研) コメント
- 10:00~10:30 休憩
- 10:30~11:00 五戸成史, 三上直彦, 伊藤光男 (東大理) イオン化ポテンシャルに及ぼす分子間相互作用の影響
- 11:00~11:20 富宅喜代一 (慶大理工) 溶媒和分子のジェット分光
- 11:20~11:35 高見道生 (理研) 分子クラスターの赤外分光
- 11:35~12:30 昼食
- 12:30~13:00 SOR 見学
- 13:00~13:50 木村克美 (分子研) レーザー光電子分光のクラスターへの応用
- 13:50~14:20 伊藤道也, 三枝洋之 (金沢大薬) vdW 錯体の励起状態からエキサイプレックス生成とその動的挙動
- 14:20~14:30 増原宏 (京工繊大) コメント
- 14:30~15:00 休憩
- 15:00~15:20 土屋荘次 (東大教養) アニリン分子 vdW 錯体における分子間力
- 15:20~15:50 梶本興亜 (東大教養) クラスター分子内反応と遷移状態
- 15:50~16:00 朽津耕三 (東大理) まとめ

“赤外光パルスレーザー技術の開発と物性への応用”

— 昭和60年 3 月23(日)開催 —

分子研 三 谷 洋 興

この研究会は、これまでに分子科学研究所で聞かれた研究会とは趣きを異にして、“技術開発”を主題とするものであった。次年度において、分子研装置開発室では赤外光超短パルスレーザーの製作を企画していたが、この光領域のレーザー技術は可視・紫外光領域と比べて極端に立遅れているのが現状である。そこで、赤外レーザー関連技術の問題点を明らかにすると同時に、この技術の将来の展望と物性研究への応用の意義について具体的に検討するためにこの研究会が開かれた。一日間だけの小規模な研究会であったが、対象を限定したものであっただけに多くの実質的な成果を得ることができた。大塚頼三教授（阪大）から遠赤外レーザーを用いた過渡現象に関する一般的な講演の後、瀬川勇三郎氏（理研）、黒田寛人助教授（物性研）、木下實助教授（物性研）、櫛田孝司教授（阪大）、田久保嘉隆助教授（農工大）、江良浩氏（無機材研）等および分子研メンバーによって赤外領域での物性研究におけるレーザーの有用性について議論がなされ、さらにレーザー開発に必要な多くの貴重な資料が提供された。最後に、高木芳宏氏（装置開発室）から、実際に試作する装置について詳しい説明がなされ、これについて細部に渡る検討が加えられた。現在、この装置は製作中であり、近い将来に研究所内外の方々によって利用され優れた研究成果が得られれば、この研究会は一層有意義となるであろう。

スーパーコンピュータの効果的・創造的利用のために

分子研 柏 木 浩

スーパーコンピュータを中心とする新システムの火入式は昭和61年1月4日に行われ、ユーザの利用も6日から始められ、システムはほぼ順調に稼動している。これもいろいろな方々の支援のお陰である。表題の研究会は一年前予算の内示があり、スーパーコンピュータの導入が確定してから開かれたスーパーコンピュータの利用についての最初の集会であり、第5回のスーパーコンピュータ・ワークショップを兼ねている。

スーパーコンピュータはプログラムのベクトル化によって高速性能を発揮するので、効果的に利用するためにはアルゴリズムやコーディングの見直しが必要になっている。また高速性を使って従来にはない創造的な研究が行われることが期待される。表題の効果的・創造的利用のためにという語句が研究会の目的をよく表している。

研究会は昭和60年3月26～27日に、次のようなプログラムに従って開催された。

3月26日 午後

| | | |
|-------------------------------|---------|---------|
| はじめに | 分子研センター | 諸 熊 奎 治 |
| スーパーコンピュータにいただく夢 | 分子研研究顧問 | 小 谷 正 雄 |
| 新システムのデザイン | 分子研センター | 柏 木 浩 |
| スーパーコンピュータによる大規模な計算機実験への期待 | 京大工 | 中 西 浩一郎 |
| 私達の研究の経験からの期待 | 京大工 | 中 辻 博 |
| 固体物理におけるスーパーコンピュータ利用 | 東大物性研 | 寺 倉 清 之 |
| Gaussian 80 の VP-100におけるベクトル化 | 山口大教養 | 堀 憲 次 |
| 酵素反応の解明に向って | 北里大薬 | 梅 山 秀 明 |

3月27日 午前

| | | |
|----------------------------|-----|---------|
| 励起分子の溶液内化学反応の問題点 | 分子研 | 大 峰 巖 |
| 二電子積分ベクトル化の試みと遭遇した困難 | 京大理 | 小 原 繁 |
| 分子軌道計算と拡張記憶 | 東大理 | 小 杉 信 博 |
| 水溶液における輸送係数の異常性とベクトル化の工夫 | 京大理 | 片 岡 洋 右 |
| 物性理論における経路積分法・量子モンテカルロ法の効用 | 分子研 | 那 須 奎一郎 |

3月27日 午後

| | | |
|--------------------------------------|----------|---------|
| Formula tape on direct CI | 北大理 | 田 中 皓 |
| ユニバーサルモレキュラーメカニックス力場の作成計画とスーパーコンピュータ | 北大理 | 大 沢 映 二 |
| 化学反応の微細機構の解析に向けて | 阪大基礎工 | 笛 野 高 之 |
| スーパーコンピュータの現状と将来 | 東大大型センター | 唐 木 幸比古 |
| ワークショップ打ち合わせ 新システムへの要望 | | |

研究会は小谷正雄先生の「スーパーコンピュータにいだく夢」という講演から始まり、他大学のスーパーコンピュータの使用経験に基づくベクトル化の効果や問題点の話、超高速計算から生まれる様々な可能性への期待などが熱意をもって語られ、最後に東大大型センターの唐木幸比古氏（現在専修大助教授）からスーパーコンピュータの今後の発展の見通しについての講演が行われた。これらの講演の一部は **Supercomputer Workshop Report 4 (1986)** に掲載してあるので御覧いただきたい。

初めにも述べたようにスーパーコンピュータの導入は実現した。この研究会で語られた夢や期待の実現がいよいよ始められる。

研究会報告(昭和60年度)

水素吸着グラファイト・アルカリ 金属層間化合物の合成と物性

分子研 榎 敏 明

グラファイト・アルカリ金属層間化合物はグラファイト層間にアルカリ金属原子の挿入された構造を有する電荷移動錯体であり、オルト・パラ水素転換反応、H-D 交換反応等の水素触媒活性を持つ。この水素活性は低温では物理吸着として発現し、大量の水素分子をグラファイト層間に吸蔵し、大きな同位体効果を持つ。一方、室温近傍においては、化学吸着を通して水素分子は解離し、グラファイト層間に安定化される。Pd, V 等の遷移金属、希土類金属の水素吸蔵が近年水素貯蔵の問題として興味を持たれ、体系的な研究がなされているが、これと関連してグラファイト層間化合物についての水素吸収の問題への興味も最近高まりつつある。この分野の研究は、日本およびフランスを中心に進展し、構造、超伝導等の電子的性質、吸着反応性、同位体効果等の研究がなされ、アメリカ等においても中性子線回析等いくつかのグループで興味を持たれている。一方、60年5月末筑波大学においてグラファイト層間化合物についての国際シンポジウムが開催された。本研究会は、このシンポジウムに参加した国内外の研究者を中心に、グラファイト・アルカリ金属層間化合物の水素吸収の研究についての議論を深め、研究の一層の進展を計ることを目的とし、筆者の他、井口洋夫、田沼静一教授を研究会提案者として開催された。以下に研究会のプログラムを掲げる。

昭和60年 6 月 3 日

H. Inokuchi (Institute for Molecular Science) and S. Tanuma (Gunma Univ.):

Opening talk

A. Hérold (Univ. Nancy):

Comment (10 min)

D. Guérard (Univ. Nancy):

Comment (20 min)

M.S. Dresselhaus (MIT):

Electronic Properties of KH_x -GIC

T. Enoki (Institute for Molecular Science):

Solid State Properties of Hydrogen-Chemisorbed Graphite-Alkali Metal Intercalation Compounds

I. Kanazawa (Tokyo Gakugei Univ.):

Positron Annihilation in Graphite-Alkali Metal-Hydrogen-Ternary Systems

P. Eklund (Oak Ridge Nat. Lab.):

Optical Study of the Charge Transfer in Stage 1 and 2 Potassium Graphite Hydrides

M. Tsukada (Univ. Tokyo):

Electronic State and Dissociation Mechanism of Hydrogen in Metals and Graphite/Alkali Intercalation Compounds

W.A. Kamitakahara (Iowa State Univ.):

Lattice Vibrations and Intercalate Ordering in KHg -and KH -Graphite Intercalation Compounds

Y. Takahashi (Univ. Tokyo):

Hydrogen Absorption Behavior of Alkali Metal GICs at Low Temperatures

T. Kondow (Univ. Tokyo):

ESR of $\text{C}_{24}\text{K}(\text{H}_2)_2$ and $\text{C}_{24}\text{K}(\text{D}_2)_2$

U. Mizutani (Nagoya Univ.):

Low Temperature Specific Heats of Physisorbed $(\text{C}_{24}\text{K})(\text{H}_2)_x$

H. Zabel (Univ. Illinois):

Low Temperature Structure of D_2 in RbC_{24}

K. Amaya (Osaka Univ.):

Specific Heat Measurement of Hydrogen-Molecule Adsorbed in Montmorillonite Inter-

calation (20 min)

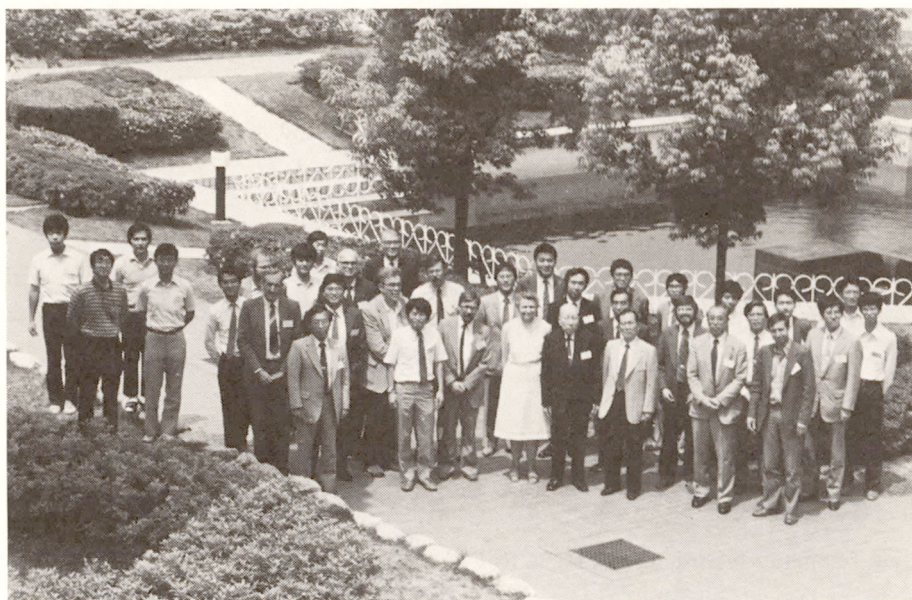
H. Akamatu:

Closing talk

研究会は外国人参加者10名を含め約40人の参加のもとに、物理吸着及び化学吸着水素系の問題について13件の報告が行なわれた。この分野の研究は、1965年以来、Héroltら、井口らの研究に端を発するものであるが、これらの研究者を含め、世界的にみてこの分野の研究者のほとんどがこの研究会に参加したことは、研究会を成功させる上で意味のあることであったと思われる。

化学吸着の問題に関しては、その電子状態及び水素吸蔵化合物の構造等について種々の問題が提起された。特に吸着水素のもつ電子状態の局在性については2, 3の興味ある報告が行なわれた。物理吸着に関しては H, D の同位体効果の報告、モンモリロナイト層間等に吸蔵された水素の二次元凝縮状態での量子効果の問題等、興味あるものであった。この分野の研究は現象的には約20年前に見出されているにもかかわらず、体系的な研究は、ここ数年に於て積上げられて来ている。

ゼオライト、遷移金属等への水素吸蔵の問題とも関連し、この分野の発展にとって、この研究会は有意義なものであった。特に研究課題目を絞り、前記したように、その分野の専門家を網羅しての小規模研究会の価値を示すことの出来た点からもまた有意義であった。



有機薄膜の分子設計と機能

広島大生物生産 岡 田 正 和

有機分子を薄膜構造にして、その膜にユニークな機能をもたせることを目標にした研究領域に対する関心が最近急激に高まっている。なかでもポストシリコンデバイスの候補として、分子デバイスが提案されるというのは、有機分子のもつ特性が見なおされているためといえよう。

このような状況のなかで、物理学・化学・工学・生物学などの異った分野における、有機薄膜の機能設計と機能評価を研究課題としている研究者が一堂に会して、研究の現状を報告し、専門分野の異なる立場から問題を討論し、今後の具体的展望を見いだすことを目的としたのが本研究会である。

本研究会は昭和60年6月4日13時30分から6月5日17時まで、以下のようなプログラムで行われた。参加者は100名以上で、その所属は大学、試験研究機関、会社関係などであった。

昭和60年6月4日(火)

- | | |
|----------------------------------|-----------------|
| ○有機薄膜の分子設計 | 広島大生物生産 岡 田 正 和 |
| ○マイクロエレクトロニクスと分子素子 | 東大工 菅 野 卓 雄 |
| ○合成の観点から | 理 研 山 田 瑛 |
| ○配向の観点から | 慈恵医大 入 山 啓 治 |
| ○デバイスの観点から | 東芝総研 水 島 公 一 |
| ○真空蒸着法による膜形成と分光法による構造解析 | 日立基礎研 谷 口 彬 雄 |
| ○紫外光電子分光法による直鎖化合物蒸着膜のキャラクタリゼーション | 分子研 関 一 彦 |
| ○クラスター・ビーム蒸着法による有機薄膜の形成 | 京大工 高 木 俊 宣 |
| ○プラズマ蒸着—金属粒子を含んだ高分子薄膜 | 東洋大工 村 山 洋 一 |
| ○メロシアニン色素含有 LB 膜の二次処理効果 | 電総研 杉 道 夫 |
| ○ポリジアセチレン LB 膜の機能と評価 | 東大工 国府田 隆 夫 |

6月5日(水)

- | | |
|------------------------|----------------------|
| ○金属と半導体の側からの考察 | 神戸大工 金 持 徹・浦 野 俊 夫 |
| ○ベンゼン単分子膜・クラスター結晶成長素過程 | 千大薬 津 田 稯 筵 川 節 子 |

| | | |
|---------------------|----------|-------------|
| ○選択配向させた直鎖分子薄膜の形成機構 | 広島大生物生産 | 稲岡紀子生 |
| | | 八瀬清志 |
| | | 佐藤清隆 |
| ○直鎖状分子薄膜のマイクロ構造 | 神戸大工 | 芦田道夫 |
| ○電荷移動型錯体薄膜の生成と構造不整 | 京大化研 | 小林隆史 |
| ○電子物性からみた有機薄膜 | 九州大・総合理工 | 斎藤省吾 |
| ○有機薄膜 / 金属界面での電子物性 | 電総研 | 伊東宇一 |
| ○有機薄膜の作成と諸特性 | 名大工 | 高井吉明 |
| | | 家田正之 |
| | | 水谷照吉 |
| ○ハイブリッド薄膜の電子移動過程 | 早大理工 | 大野弘幸 |
| | | 土田英俊 |
| ○機能材料としてのポリジアセチレン | 織高研 | 加藤政雄 |
| ○シリコン含有レジスト | NEC基礎研 | 斎郷和秀 |
| ○基板による液晶の分子配列 | 電総研 | 横山浩 |
| ○フォトクロミック・スピロピラン | ソニー中研 | 瀬戸順悦 |
| ○総合討論 | 司会 | 九大総合理工 斎藤省吾 |
| | パネラー | 日本真空 伊藤昭夫 |
| | | 京大化研 榎田夏 |
| | | 東大工 国府田隆夫 |
| | | 東洋大工 村山洋一 |
| | | 東大工 河津璋 |
| ○まとめ | 分子研 | 井口洋夫 |

本研究会の課題の一つになっていた「分子素子の可能性」について、薄膜作製と膜機能の2つの立場から楽観論と悲観論がだされ、ホットな議論がくり広げられ、予定時間がオーバーしてスケジュールが遅れがちであった。

ホットな議論もふくめ、特に気がついた問題点を列記しまとめにかえたいと思う。

- (1) 有機薄膜の形成過程とその構造に関する基礎的研究が不十分である。
- (2) 有機薄膜の形成法には真空蒸着法と LB 法があるが、高品質の機能薄膜を形成するという観点で、2つの方法におけるそれぞれの特質が明確にならなかった。
- (3) 有機薄膜の評価法が確立していない。
- (4) 分子素子材料に関するコンセンサスが得られなかった。

最後に本研究会の開催にあたり種々な御助言と御尽力をいただいた分子研 井口洋夫教授と

井口研究室の方々に深く感謝の意を表したい。

“分子集合体における構造と 光エネルギー緩和”

分子研 丸 山 有 成

上記研究会が昭和60年7月16, 17日に50余名の出席者を得て分子研において開催された。

本研究会の主題は、個有の機能を持った分子がさまざまな集合状態において示す特異な振舞を特にその励起状態の動的過程において捉えようとするものである。その意味から、種々の型の新しい分子集合体の創造に携わる研究者（特に高分子合成化学の研究者を中心に）と分子集合体における電子励起状態ダイナミックスに携わる研究者とが一同に会し、分子集合体を核とする分子科学の新しい分野の展開を計ることを目的とした。従来は、このような両分野の研究者の交流はあまり行われておらず、高分子合成から固体物理学までにわたる互いに未知の広い領域での今回の交流は大変有意義であった。

プログラムは次の通りであった。

昭和60年7月16日(火) (第一日)

- | | |
|-----------------------------------|------------------|
| 1. 分子集合体における励起エネルギー移動と光 電子移動現象 | 阪大基礎工 又 賀 昇 |
| 2. 有機結晶における局在, 非局在励起子の共存と 緩和 | 甲南大理 松 井 敦 男 |
| 3. 励起錯体生成に対する高分子場の効果 | 東工大資源研 田 附 重 夫 |
| 4. ダイマーモデル化合物の電子状態と幾何学構造 | 京都工繊大繊維 増 原 宏 |
| 5. 芳香族環を側鎖に含む高分子の光物理過程 | 阪大工 城 田 靖 彦 |
| 6. 一次元発色団集合体としての芳香族ポリペプチ ド | 京大医用高分子研 矢 戸 昌 彦 |
| 7. 累積分子膜中における光励起エネルギー移動と 化学反応性 | 埼玉大理 中 原 弘 雄 |
| 8. LB膜ヘテロ接合の光電特性 | 電総研 杉 道 夫 |

7月17日(水) (第二日)

- | | |
|---|------------------------------|
| 9. 構造の制御された高分子合成 | 阪大基礎工 岡 本 佳 男 |
| 10. 固定化二分子膜の構造と光物性 | 東農工大工 下 村 政 嗣 九大工 国 武 豊 喜 |
| 11. 極性基を含む液晶物質の分子配列 | 阪大工 艸 林 成 和 |
| 12. 有機非晶体におけるエキシマー——薄膜と液体 | 分子研 丸 山 有 成 |
| 13. ピレン結晶におけるエネルギー移動と不純物 濃度依存 | 愛工大工 高 橋 欣 弘 |
| 14. 分子性結晶における電荷移動と電子状態 —— 中性・イオン性相転移 —— | 分子研 三 谷 忠 興 |
| 15. 有機結晶中での電導キャリア生成 | 学習院大理 小 谷 正 博 |
| 16. テトラベンゾペタンセンのフォトクロミズム と物性 | 熊本大理 佐 藤 直 樹 |
| 17. 二分子膜および LB 膜におけるフォトクロミ ズム | 阪大産研 入 江 正 浩 |
| 18. 紫外光電子分光法で見た有機薄膜の電子構造 | 分子研 関 一 彦 |
| 19. 蒸着法による配向性有機薄膜の形成とけい光 分光法による解析 | 日立基礎研 谷 口 彬 雄 |
| 20. LB 膜における励起エネルギー移動と会合体 形成 —— ピコ秒蛍光分光法による解析 —— | 分子研 山崎 巖・玉井 尚登 |

1, 2 が Plenary Lecture で、又賀氏は剛体溶媒系、高分子電解質溶液・ベシクル系等の溶液系から純液体にわたる広い系での光励起後の超高速現象を分光法によって解析する手法及び最新の結果について説明され、松井氏はピレン、アントラセン等の単結晶を例にとり励起子の局在・非局在の問題点を一般的立場から考察する方法論を述べられた。

全体的には、最近の高分子合成技術の目ざましい進歩の成果として、興味ある構造・機能を持った高分子が数多く登場した。また一方では、LB 法や蒸着法での薄膜形成によるアプローチも重要であり相補的であった。いずれにしても、これらの多種多様な系においても実際に見えてくる現象としては共通点が多く、従ってこれらの系での基本的物理過程はおそらくかなり統一的に理解され得るであろうという印象を持った。そのためには、不規則系でのミクロ構造をある程度評価できる手法の確立と、集合体としての集団運動を常に意識した解析がやはり重要であろうと感ぜられた。

レーザー化学と励起分子の動的過程の新展開

分子研 西 信 之

今日では、様々なレーザーが化学の分野に導入され、物理化学・有機化学・無機化学・工業化学にとってレーザーが果している役割は大変大きい。このレーザーを用いて化学反応を起したり、あるいは化学反応の動的過程をさぐろうとする試みは、中でも飛躍的な進歩をとげたといえる。今回の研究会は、様々な事情により、世界のトップレベルの研究者を一同に集めることができ、質の高い発表と討論がなされた。

冒頭講演は Letokhov 教授の「Two-Step Picosecond Laser Excitation of Biomolecules and Following Processes」であった。講演では、核酸塩基、（あるいは DNA ヘリックス）を含む水溶液に強力なピコ秒レーザーを照射した場合、塩基のもつ高い二段励起効率とその後のエネルギー移動によって水の解離が起ることを報告した。

次に英国のDixon 教授は、 ND_3 の 2 光子 $\tilde{A} \leftarrow \tilde{X}$ 遷移の解析から、D 原子の解離が障壁より下でもトンネル効果によって起り、振動・回転準位依存性が高いことを示した。続いて、Donovan 教授は、ハロゲン 2 原子分子のイオン対状態への励起に伴う光解離は、発光によって落ちた先の低い電子状態からの解離であることを示し、同じエネルギーで励起しても IBr の場合は、これとは反対に励起状態からの前期解離であると報告した。レーザーとシンクロトロンを用いて、高い励起状態からの反応過程が明らかにされたよい例といえる。

1 日目の午後には、分子研の研究会としては最初のポスターによる討論が行なわれた。このポスターセッションには、外国から 4 件、国内から 12 件の発表があった。発表数が少ない割に議論は、活発に交され、予定の 2 時間を過ぎても終わらないグループが多く、次の口頭発表の時間にもかなりの人が、ポスター会場で討論を行っていた。

午後の後半は、小さな分子の光解離のダイナミックスが集中的に討議された。岡部教授は、アセチレン及び二硫化炭素の 193 nm 光分解の研究に、伝統的な手法も重要な情報を与えることを示され、続いて、Jackson 教授は、BrCN の光解離では、生じた CN ラジカルの振動はほとんど励起されておらず、逆に回転励起が著しいことをレーザー誘起蛍光法によって見出した。一方、米国NRLのButler博士は、生成物の状態分析に、赤外ダイオードレーザーを用い、 SO_2 から生じる SO の振動、回転分布を報告した。更に、この赤外ダイオードレーザー分光法

が、金属表面に吸着した分子の吸着状態を知る上に威力を発揮することを示した。

紫外レーザーを用いてラジカルを高密度に生成させ、その反応速度を精度よく求めることができるという例が、西ドイツのBecker教授によってOHラジカルについて示された。このOHの反応においては、直接の付加や引き抜きの他に、寿命の長いR-OHという錯合体を生成し反応に至るものがあると報告された。同じく西ドイツのStuhlは、アンモニアのArFレーザー照射によって生じる励起NHラジカルは、集光しない条件下では一段目で生じたNH₂ラジカルが再び193 nm光を吸収し、NHとHに解離するという2段階励起によることを2台のArFレーザーの照射タイミングに遅延をかけ、発光の動的過程を観測することによって見事に証明した。

2日目は、バークレーのMoore教授の講演から始まり、最初にホルムアルデヒドのS₁寿命の電場強度依存性「スペクトル」が詳しく紹介された。これは、S₁状態の振動回転準位のエネルギーが電場の変化によって変わるため、S₀状態との相互作用が大きくなって信号の振幅も大きく現れるというもので、スペクトルの幅は直接相互作用しているS₀の高振動励起状態の寿命を与え、高さはS₁-S₀相互作用の強さを与える。この方法によって、エネルギーの高い領域での状態密度を知ることができる。同じホルムアルデヒドのS₁の振動回転準位の寿命に関する詳しい報告が、カリフォルニア大のLee教授によってなされた。これは、コリオリ相互作用で振動回転準位が混ざり合うことを考慮すると、面外あるいは面内振動状態の異なったふるまいが説明でき、コリオリ相互作用の選択則を考慮することによってサブバンドの消滅という実験結果も理解できるというものである。



一方、ミュンヘン工科大学のSchlag教授は、ベンゼンの第3チャンネル問題が振動回数の相互作用を考慮することによってうまく説明でき、ドップラーフリーの高分解能分光を行なうと、余剰エネルギー 3000 cm^{-1} 付近の線幅と準位の帰属から、第3チャンネルの急激な立ち上りと

S₁の状態密度がよい対応を示すと主張した。実験結果はよいとして、この解釈は、分子研の吉原グループによってなされてきた詳細な研究による解釈と対立するもので、教授の説明は必ずしも満足のいくものではなかった。

東北大学の伊藤教授は、2色レーザー多光子イオン化スペクトル、及び、同多光子蛍光ディープ（強度落ち込み）スペクトルを比較することによって、イオン化ポテンシャルよりも高い高励起リドベルグ状態からの無輻射遷移が、自動イオン化の速度より非常に速いことを DABCO という分子について示した。このような方法によってイオン化ポテンシャルより高い状態からの動的過程がかなり明確にわかるようになったのは大きな進歩といえ、高く評価されるであろう。

2日目の午後のはじめは、英国の Phillips 教授によってジェット分光法を用いた電荷移動錯体及びファンデアバルス錯体の励起状態の動的過程の研究が報告され、特に溶媒分子がいくつか付加することによってどのように励起状態が緩和されるのかが示された。続いて分子研の花崎教授はベンゼン二量体の振動前期解離について講演した。CO₂ レーザー照射による実験から、解離に関与する吸収線は数 cm^{-1} の幅をもつローレンツ型であること、およびフラグメントの並進エネルギー分布が統計的であること、そしてこのことから、解離に際しエネルギーがファンデアバルスモードに無秩序に分配される過程の機構が提示された。

研究会最後のセッションは、三つのトピックスが話された。そのはじめは、南カリフォルニア大学のWittig教授による、ファンデアバルス錯体の解離を利用した、化学（半）反応過程の研究結果が報告された。用いられたのは、HBr・CO₂ 錯体で、光解離によって H と Br の結合を切り、H と CO₂ の反応を追うというもので、生成した OH の回転エネルギー分布が統計的に予想される分布からずれることが示されたが、Br 原子がどのような作用をしているかについて質問が集中した。続いて、分子研の木村教授は、多光子イオン化による光電子分光と、従来の共鳴線による1光子イオン化とがどのように違っているかを紹介し、前者が、選択的な励起状態を経てイオン化されるためこの励起状態の情報を含んでいることを強調した。更に、NO の自動イオン化状態や鉄錯体の光解離過程に関する実験が紹介された。

最後のトピックは、ピコ秒 pump and probe 法による光異性化過程についての研究で、スウェーデンの Sundström 博士によって、C₁₂ ~ C₁₆ の種々の溶媒中でのスチルベン、トリフェニルメタン、シアニンの各分子の異性化速度の温度依存性が報告され、溶質-溶媒相互作用に拡散



会場は終始熱気に満ちていた。

モデルを用いると、この速度が溶媒の粘性率との間にある関係が成立することが示された。

会を終って、多くの参加者から、大変質の高い充実した会であったとの感想が寄せられたのは、主催者として、大変嬉しいことであった。

有機カゴ型化合物のつくる 分子場と特異機能の研究

阪大産研 三角 荘一

カゴ型化合物の魅力の一つは、キュバンやテトラヘドランのように硬直で高歪み、かつ対称性の高い美しい構造にある。以前は、主に構造に注目されていたが、近年、高歪み結合の変換反応、小員環の光増感反応などが明白になるにつれ、この特性を利用した研究が活発に行なわれている。クワドリシクランなどのフォトクロミズムを利用した光エネルギー変換材料の開発とか極限状態におけるモデルとしての研究がその例である。一方、ヘテロ原子を含むカゴ型化合物はイオンあるいは有機分子を識別するという注目すべき第二の分子場としての特性を示す。例えば、選択的金属イオン捕捉とか疎水的有機分子包接機能である。

本研究会は、上記カゴ型化合物類に関する我国の代表的研究者を講演者に招き、さらに第一線若手研究者を加えて開催されたもので、プログラムは以下の通りである。

日時 昭和60年12月2日(月), 3日(火)

場所 分子科学研究所 研究棟301号室

プログラム

| | |
|--|-----------------|
| はじめに | 三 角 莊 一 (阪大産所) |
| 積層型ジフェニルカルベンにおける磁氣的相互作用 | 泉 岡 明 (分子研) |
| 隣接する反応種に対するシクロファン分子の反応挙動 | 西 村 淳 (京工大工) |
| 擬整カゴ型分子構造の探索 | 飯 塚 健 (群馬大教育) |
| 馬肝臓アルコール脱水素酵素によるカゴ型メソ化合物の不斉還元。光学活性 D ₃ -トリスホモ キュバンおよびノーマチル誘導体の簡便な合成 | 苗 村 浩一郎 (阪大基礎工) |
| Kosowerの安定ラジカルを組み込んだシクロファンの合成を目指した〔3・3〕ピリジノファン誘導体の合成 | 稲 津 孝 彦 (九大理) |
| 大環状ヘテロシクロファンの分子包接結晶 | 山 村 和 夫 (京大工) |
| ジエステル置換基を有する短架橋パラシクロファン類の合成 | 戸 部 義 人 (阪大工) |
| 〔4〕スーパーフェロセノファンと関連する多橋かけフェロセノファン類の分子構造 | 久 留 正 雄 (東理大薬) |
| 高歪みカゴ型化合物の合成と反応：カルボニル鉄を用いた高歪み化合物の α -ジカルボニル化反応 | 山 口 良 平 (京大工) |
| 酵素雰囲気下における歪三員環化合物と CNE 錯体の光励起および暗反応 | 宮 仕 勉 (東北大理) |
| 含硫黄中員環化合物におけるイプソ中間体を経る転位反応 | 秋 葉 欣 哉 (広島大理) |

(1) Synthesis and Photoreaction of 2,3,5-Tri-*t*-butylisobenzofurane.

(2) TPPCo^{II} Catalyzed Cycloreversion of Quadricyclanes. 三 木 定 雄 (京大工)

多環式非共役ジエンの分子内〔2+2〕シクロ付加反応に伴うひずみエネルギー変化——MM2'計算による検討

大 沢 映 二 (北大理)

まとめ

岩 村 秀 (分子研)

その他討論参加者：大木道則(東大理)，江口昇次，大野正富(名工大)，河西三省(京大工)，



米光宰，平尾健一(北大理)，山本陽介(広大理)，兼田隆弘(阪大産研)，高谷秀正，真島和志，菅原正，古賀登，村田滋(分子研)

本研究会は，カゴ型化合物研究の現況および研究の流れを知るよい機会であった。最後に，本研究会をサポートしていただいた長倉所長，研究会開催に当り協力を賜わった岩村秀，古賀登両氏に深く感謝の意を表したい。

金属多核錯体触媒とクラスター触媒 の接点に関する諸問題

分子研 齋 藤 一 夫

触媒に関する研究は化学の重要な領域の一つとして古くから進められており，今日でも千の単位で数える研究者が大学，国公立研究所，企業の関連研究所などで活発に取組んでいる。その活動には2つの大きな潮流が認められる。一つは比較的近年—1950年代—に始まった均一液相における錯体触媒に関するもので，チーグラー・ナッタ触媒をはじめ人間生活の姿を大きく変えたものも含まれている。この研究を担ったのは有機合成を志向した錯体化学，有機金属化

学者達である。一方不均一相触媒の研究は長い伝統に支えられて発達して来たが、近年は固体表面や微粒子、あるいは担持された微粒子のキャラクタリゼーションの発展とあいまって著しい進歩をみせている。

この2つの流れの間の交わりは、しかしながら、これまでのところきわめて不十分であった。今回の企画はこれらの分野で活発な研究を続けている研究者の密度の濃い交流を意図したもので、昭和59年度に発足した錯体化学実験施設の錯体触媒部門（中村晃 客員教授）と、北海道大学触媒研究所（豊島勇教授）が中心になり、次のようなメンバーを集めて開いたものである。

昭和61年1月10日午後

- | | | |
|--|-------------|--------------------|
| ○触媒反応と反応の場——均一系触媒の立場から | (阪大理) | 中 村 晃 |
| ○触媒反応と反応の場 | (東大物性研) | 田 中 虔 一 |
| ○固体触媒表面の分子デザインと反応サイトの動的挙動 | (東大理) | 岩 沢 康 裕 |
| ○クラスター——アルキル錯体の反応 | (阪大基礎工・分子研) | 斎 藤 太 郎 手 老 省 三 |
| ○ヘテロポリ酸触媒——Oxide Cluster anion の機能—— | (名大工) | 泉 有 亮 |
| ○Triphenylphosphine並びに Ylide を配位子とした 錯体の均一系触媒作用とその問題点 | (東日本学園大薬) | 山 本 芳 久 |
| ○ジオキソゲナーゼモデルとしての鉄錯体の芳香環酸素 化開裂機能 | (京大工) | 船 引 卓 三 |

昭和61年1月11日午前

- | | | |
|--|----------|--|
| ○微粒子金属触媒のキャラクタリゼーション | (北大触媒研) | 豊 島 勇 |
| ○電子分光法による触媒表面のキャラクタリゼーション | (阪大基礎工) | 今 中 利 信 |
| ○作用条件下における超微粒子の構造変化——in -situ EXAFSによる測定例を中心として—— | (豊橋技科大) | 上 野 晃 史 |
| ○二三の酸化物表面におけるO ²⁻ の反応性 | (東工大資源研) | 秋 鹿 研 一 |
| ○ロジウム IV のμ-メチレン錯体 | (阪市大理) | 磯 部 清 |
| ○ロジウム-ホウ素クラスター錯体の不均一相触媒作用 | (分子研錯体) | 中 村 晃 武 居 文 彦 斎 藤 一 夫 王 バ ー ト ル |

昭和61年1月11日午後

- | | | |
|--------------------------------|---------|-------|
| ○有機金属クラスター錯体を利用する触媒表面の分子 設計 | (北大触媒研) | 市 川 勝 |
|--------------------------------|---------|-------|

○金属表面および金属酸化物表面の電子状態と吸着
分子との相互作用

(京都府大生活科学) 小林 久 芳

○中間体と反応機構—オレフィンメタセシス反応—

(北大触媒研) 田 中 勝 己

○触媒設計の立場から見た錯体溶液と固体表面

(東大生産研) 斎 藤 泰 和

第1日目はおもに均一相触媒の研究を、触媒機能を担う活性サイトという立場から討論した。とくに微粒子や担持触媒の研究にたずさわっている人々からの討論が盛んで、構造のアイデンティファイされた多核錯体、金属クラスター錯体と、微粒子との間はかなりつまってきていることが触媒活性という立場から明確にされたといえよう。

第2日目、とくに午前触媒表面および微粒子のキャラクタリゼーションを、EXAFS, ESCAなどの手段で進める研究と、触媒機能をそれらの成果と結びつける点についての議論が主となった。そしてそれを受けて午後には「欲する触媒を設計する」方向に討論が発展した。

これまでディスクリートの錯イオンや多核錯体分子を扱って来た人々からみると、微粒子や固体表面のキャラクタリゼーションは予期していた以上に精度よく、かつ広汎に進められていることが感じられた。また逆の方向では、錯体触媒もかなり複核な化合物を扱うようになったものだという認識が深まった。これらのことは裏返えせばこれまでこれらの研究グループ相互間の情報交換が不十分であったことを示しているともいえる。

本会の計画した参加者は17名であったが、そのほかに26名の参加者があり、その中には東京、大阪などから14名の自発的な参加があったことは注目に値する。72ページに及ぶ充実した講演要旨を2週間前に配布し、講演時間を短くして討論時間を長く（最低10分）とったためもあって、質疑応答はきわめて活発で、各個別の話合いも盛んに行われ、新しい共同研究の計画が成立したのも2～3件に止まらない。

これまでかなりコミュニケーションの乏しかったグループの集りとして成果が注目されたが、内容の深まりも、参加範囲の広がりもきわめて実り多い研究会だったといえる。

昭和60年度共同研究採択一覧

課 題 研 究

◎高圧下における有機物質の電子状態の研究

分子研

中 垣 良 一

| | |
|-------|---------|
| ○東大・工 | 国府田 隆 夫 |
| 東大・工 | 十 倉 好 紀 |
| 東大・工 | 金 子 良 夫 |
| 室蘭工大 | 城 谷 一 民 |
| 学習院・理 | 高 橋 和 宏 |
| 学習院・理 | 真 庭 豊 |
| 静岡薬大 | 風 間 舜 介 |
| 静岡薬大 | 吉 岡 寿 |
| 分子研 | 三 谷 忠 興 |
| 甲南大・理 | 松 井 敦 男 |
| 甲南大・理 | 水 野 健 一 |
| 阪市大・工 | 西 村 仁 |
| 東北大・理 | 伊 藤 翼 |

◎高スピン有機分子の設計構築およびその物性

| | |
|--------|---------|
| ○阪市大・理 | 伊 藤 公 一 |
| 阪市大・理 | 工 位 武 治 |
| 阪市大・理 | 八 木 宏 文 |
| 分子研 | 岩 村 秀 |
| 分子研 | 菅 原 正 |
| 分子研 | 村 田 滋 |
| 分子研 | 泉 岡 明 |
| 東大・教養 | 塚 田 秀 行 |
| 東北大・理 | 伊 藤 翼 |

◎励起化学種の動的挙動に対する磁場効果の研究

| | |
|---------|---------|
| ○分子研(額) | 林 久 治 |
| 分子研(額) | 桜 木 宏 親 |
| 神戸大・理 | 加 藤 肇 |
| 金沢大・薬 | 谷 本 能 文 |
| 理研 | 阿 部 晴 雄 |
| 分子研 | 山 埜 巖 |

◎準安定原子の衝突励起による気体分子の動力学的研究

| | |
|-------|---------|
| ○東大・理 | 朽 津 耕 三 |
| 分子研 | 広 田 栄 治 |
| 分子研 | 正 富 宏 祐 |
| 東大・理 | 近 藤 保 |
| 東大・理 | 鈴 木 薫 |
| 東大・理 | 永 田 敬 |
| 城西大・理 | 上 原 博 通 |
| 分子研 | 中 村 宏 樹 |

協 力 研 究

[前 期]

イオン分子反応の理論的研究

東北大科計研

楠

勲

| | | |
|--|----------|---------|
| ポテンシャルエネルギー面と反応動力学に関する理論的研究 | 東大・工 | 神 谷 健 秀 |
| 二原子分子流体混合物の構造と動的性質 | 京大・工 | 中 西 浩一郎 |
| 原子・分子と固体表面との衝突過程 | 阪大・基礎工 | 馬 越 健 次 |
| 二自由度および三自由度系の核の運動の波動関数 | 慶大・理工 | 佐 藤 信 行 |
| 量子力学的カオフーの準古典近似 | 東工大・理 | 北 原 和 夫 |
| 簡単な二原子分子の解離性再結合研究のためのポテンシャル曲線の計算 | 東大・理 | 小 杉 信 博 |
| ポリアセンの凝縮相 | 金沢工大 | 三 嶋 昭 臣 |
| F 中心における共鳴光散乱の時間分解偏光相関 | 山口大・教養 | 相 原 正 樹 |
| 高分解能分光法による分子イオンの検出 | 九大・理 | 田 中 桂 一 |
| 不安定分子の高分解能分光 | 東大・薬 | 浜 田 嘉 昭 |
| 赤外ダイオードレーザー分光法によるNO ₃ ラジカルの電子状態の研究 | 東工大・理 | 石 渡 孝 |
| 反応中間体のレーザー分光 | 東大・教養 | 土 屋 莊 次 |
| C ₄ H, C ₅ H, C ₆ H, C ₄ O, C ₅ O分子の分子構造の決定 | 北大・理 | 村 上 明 徳 |
| 不安定化合物 BO ラジカルなどのマイクロ波スペクトルの観測 | 相模中研 | 谷 本 光 敏 |
| 暗黒星雲における未同定線 U46755 の同定 | 東大・理 | 大 石 雅 寿 |
| 暗黒星雲における未同定線の同定 | 東大・天文台 | 浜 田 博 子 |
| ピコ秒時間分解共鳴ラマン分光法によるビフェニルの光イオン化過程の研究 | 東大・理 | 加 藤 千 尋 |
| バクテリオロドプシンの光反応中間体の構造解析 | 京大・理 | 前 田 章 夫 |
| チトクロム酸化酵素による酵素活性化機構の共鳴ラマン分光法による研究 | 甲南大・理 | 吉 川 信 也 |
| 自己拡散係数の測定による界面活性剤水溶液の相分離の研究 | 都立大・理 | 加 藤 直 |
| 塩化コバルト-アルコール系のサーモクロシズムに関するEXAFS | 東工大・総合理工 | 山 口 敏 男 |
| カチオン性高分子電解質アィオーネンの自己拡散係数 | 名大・工 | 香 田 忍 |

| | | |
|--|--------|---------|
| ピコ秒レーザー分光法による励起状態プロトン移動反応の直接測定 | 群大・工 | 関 春 夫 |
| 励起状態における分子内プロトン移動の研究 | 京大・理 | 広 田 襄 |
| 超高速時間分割スペクトロスコピーによる光化学反応初期過程に関する研究 | 都立大・工 | 井 上 晴 夫 |
| 固体表面における色素の励起状態の緩和過程 | 東邦大・理 | 梶 原 峻 |
| 半導体光触媒による有機化合物の分解 | 明星大・理工 | 原 田 久 志 |
| 半導体粉末表面での色素増感の速度 | 東工大・工 | 藤 平 正 道 |
| 気相における分子間エキサイプレックス生成の機構 | 金沢大・薬 | 三 枝 洋 之 |
| クラスター内イオンー分子反応 (II) 異分子クラスターの生成とそのイオン化 | 北九州大 | 竹之下 芳 也 |
| 表面吸着分子の光化学 | 三重大・工 | 川 崎 昌 博 |
| マトリックス単離法による水素結合会合体 | 京大・理 | 西 谷 昭 彦 |
| 芳香族塩素誘導体の光分解初期過程 | 東工大・理 | 市 村 禎二郎 |
| 超電導性有機及び黒鉛物質の構築 | 熊大・理 | 佐 野 瑞 香 |
| 機能性原子団を含む長鎖化合物の累積分子膜における光電気物性 | 埼玉大・理 | 中 原 弘 雄 |
| 新しい分子性導体の設計 | 阪大・理 | 村 田 一 郎 |
| 色素の紫外光電子分光 | 阪大・工 | 城 田 靖 彦 |
| 振動状態を選別したイオンー分子反応 $C_2D_2^+ + H_2$ | 東大・教養 | 本 間 健 二 |
| イオンー分子反応による星間雲分子生成のシュミレーション | 東工大・理 | 山 崎 秀 郎 |
| アセチレンー酸素錯合体の検出 | 東工大・理 | 正 田 巧 |
| 分子の多光子イオン化と分子内緩和過程 | 三重大・工 | 佐 藤 博 保 |
| 水素結合クラスターの光イオン化 | 阪大・理 | 友 田 真 二 |
| アントラセン誘導体一極性分子クラスターの蛍光寿命測定 | 京都工繊・織 | 平 山 鋭 |
| 黒リンのintercalation Compocendの合成と物性 | 室蘭工大 | 城 谷 一 民 |
| 新しい電荷受容体の合成と物性研究 | 東大・理 | 三津橋 務 |
| 有機金属錯体における超伝導性液晶の合成と物性 | 信大・織 | 太 田 和 親 |
| 黒リンの高圧下トンネル分光 | 東大・物性研 | 岩 崎 紀 子 |

| | | |
|--|------------|--------------|
| テルロキサントンのハロゲン付加体の構造と ^{125}Te NMR | 和歌山大・教育 | 中西和郎 |
| 二次元型有機多重項分子の安定性と分子構造 | 大阪市大・理 | 手木芳男 |
| 一次元白金混合原子価錯体の構造 | 京大・理 | 田中昌子 |
| 平面型亜鉛錯体の物性 | 静大・教育 | 広田文彦 |
| 遷移金属原子の励起エネルギーとイオン化エネルギー | 北大・理 | 関谷雅弘 |
| 鉄ポルフィリン錯体の電子状態及び分子構造に関する理論的研究 | 名大・理 | 斉藤稔 |
| アセチルアセトン金属錯体の構造 | 静大・理 | 柴田周三 |
| アルカリ金属と水素を含むグラファイト層間化合物のNMR | 日大・文理 | 宮島清一 |
| らせん構造を有する高分子の発光挙動 | 京都工繊大・繊維生研 | 板谷明 山崎トモ子 |
| 多層構造分子集合体の光物理化学 | 東工大・資源研 | 田附重夫 |
| 高分子系における励起状態相互作用の動的測定 | 金城学院大 | 山川仁 |
| 環状ヘテロ有機金属化合物の反応性に関する研究 ^{14}N NMR による脂質膜物性の研究 | 九大・薬 | 亀井洋子 |
| 新しいキラル二座配位ホスフィンを用いる不斉接触反応の研究 | 愛知学泉短大 | 小谷野錦子 |
| 軸性光学活性ジホスフィン類の合成とその機能開発 | 埼玉大・工 | 宮下晃 |
| 新しいハロゲン架橋一次元鎖状混合原子価錯体の物性 | 九大・教養 | 山下正広 |
| $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ の超伝導性と半導性に対する圧力効果 | 東大・工 | 北沢宏一 |
| 光応答機能高分子の分光研究 | 阪大・産研 | 入江正浩 |
| 芳香族ポリペプチドの光化学挙動に関する研究 | 京大・医用高分研 | 穴戸昌彦 |
| 鉄錯体の酸化還元反応における短寿命中間体の構造と電子状態 | 山口大・教育 | 右田耕人 |
| Mo (IV) 多核錯体の電子状態に関する研究 | 岡山理大 | 柴原隆志 |
| 遷移金属クラスター錯体の単結晶 X線解析 | 阪市大・理 | 大井俊一郎 |

| | | |
|--|----------------|--------------------|
| ヘテロ金属間結合を有する二核錯体の電子スピン共鳴スペクトル | 阪市大・理 | 中 村 幸 雄 |
| ピリジニルラジカルと無機塩との相互作用 | 東北大・非水研 | 秋 山 公 男 |
| 金属カルボニル錯体を含む有機金属錯体の時間分解ESRおよびNMRによる光化学反応の研究 | 東北大・非水研 | 岩 泉 正 基 |
| Xylylene 架橋二核 Mo (II) 錯体のアシル化反応 配位高分子の光物性と光化学 | 阪市大・理 徳島大・工 | 磯 辺 清 神 田 精 一 |
| Mo ^{II} 六核クラスターの基底および光励起状態の反応性 | 東北大・理 | 佐々木 陽 一 |
| 有機タantal化合物の触媒作用 | 阪大・理 | 安 田 源 |
| 立体障害を持つベンゼンセレナート Mo (N) 錯体の合成 | 阪大・理 | 上 山 憲 一 |
| 低原子価遷移金属クラウンチオエーテル錯体の合成と反応性 | 阪府大・総合 | 吉 田 寿 勝 |
| 光学活性な多座ホスフィン配位子を含むCo (III) 錯体の構造 | 名大・理 | 阿 藤 正 道 |
| モリブデン(VI)および(V) アクアイオンとアクレオチド類の溶液内相互作用 | 東北大・理 | 永 沢 明 |
| 二酸化炭素の光電気化学的還元 担持金属触媒構造の研究 | 東北大・理 豊橋技大 | 木 戸 寛 明 上 野 晃 史 |

〔後 期〕

| | | |
|-----------------------------|--------|---------|
| 金属錯体の電子移動反応に関する量子化学反応 | 広大・理 | 諫 田 克 哉 |
| ポテンシャルエネルギー面と反応動力学に関する理論的研究 | 東大・工 | 神 谷 健 秀 |
| 不斉誘導における電子的効果についての理論的研究 | 名大・農 | 磯 部 稔 |
| ピリジンの低位三重項状態の ab initio 計算 | 北大・応電研 | 長 岡 伸 一 |
| 液相における電子移動反応に関する理論的研究 | 名大・教養 | 加 藤 重 樹 |
| 化学反応の理論的研究 | 大阪学院大 | 酒 井 章 吾 |
| 原子・分子と金属表面との衝突過程 | 阪大・基礎工 | 馬 越 健 次 |
| 二自由度及び三自由度系の核の運動の波動関数 | 慶大・理工 | 佐 藤 信 行 |

| | | |
|---|--------|---------|
| 既一次ハロゲン架橋型白金族錯体の電子状態の研究 | 横浜国大・工 | 田 中 正 俊 |
| 有機結晶における中性ーイオン性転移の理論的研究 | 東大・物性研 | 永 長 直 人 |
| 一次元電子系の相転移 | 金沢工大 | 三 嶋 昭 臣 |
| 励起状態におけるプロトン移動に関する理論的研究 | 大阪工大 | 田 中 英 次 |
| 単分子反応のab initio MOCI 計算 | 慶大・理工 | 長 村 吉 洋 |
| 酸素原子とオレフィン類の反応中間体の分光と反応動力学的研究 | 東大・工 | 幸 田 清一郎 |
| アセチレンの放電生成物の高分解能分光 | 西南学院大 | 松 村 敬 治 |
| Dsoラジカルのレーザー励起スペクトル | 金沢大・理 | 大 橋 信喜美 |
| 赤外ダイオードレーザー分光法によるNO ₃ ラジカルの電子状態の研究 | 東工大・理 | 石 渡 孝 |
| 不安定化合物 Si F ₃ ラジカル等のマイクロ波スペクトルの観測 | 相模中研 | 谷 本 光 敏 |
| ケイ素を含む星間分子のマイクロ波分光 | 名大・理 | 山 本 智 |
| C ₄ H, C ₅ H, C ₆ H, C ₄ O, C ₅ O 分子の MCSCF 計算による分子構造の決定 | 北大・理 | 村 上 明 徳 |
| 好気性光合成細菌における色素間エネルギー移動 | 東大・理 | 林 秀 則 |
| 電子励起状態での分子内振動の理論的計算 | 東大・理 | 中 田 宗 隆 |
| 金属置換ハイブリッドヘモグロビンのラマン分光による研究 | 阪大・基礎工 | 森 本 英 樹 |
| 共鳴ラマン分光法によるチトクロム酸化酵素の活性中心の立体構造 | 甲南大・理 | 吉 川 信 也 |
| シトクロム P-450 電子伝達系フラビン結合領域の構造と機能 | 阪大・医 | 杉 山 俊 博 |
| 時間分割共鳴ラマン分光法によるポルフィリンの光還元過程の研究 | 慈恵医大 | 尾 崎 幸 洋 |
| 自己拡散係数の測定による界面活性剤のミセル形成の研究 | 都立大・理 | 加 藤 直 |
| 不安定有機ゲルミレンの構造研究 | 学習院・理 | 持 田 邦 夫 |

| | | | |
|--|--------|---------|---|
| 担持金属粒子の EXAFS による研究 | 東大・工 | 御園生 | 誠 |
| フェニルラジカルの水素引き抜き反応に関する研究 | 東京造形大 | 岡 村 | 忠 |
| 光励起ビピラジンビスビピリジンルテニウム錯体とプロトンとの反応 | 東工大・理 | 小 林 | 宏 |
| 超高速時間分割スペクトロスコピーによる光化学反応初期過程に関する研究 | 都立大・工 | 井 上 晴 夫 | |
| 半導体の表面順位の化学反応性に関する研究 | 阪大・工 | 柳 田 祥 三 | |
| 半導体粉末上での電子移動消光 | 東工大・工 | 菅 耕 作 | |
| 各種光応答半導体電極及び光触媒によって有機化学反応 | 明星大・理工 | 原 田 久 志 | |
| 固体表面における色素の励起状態の緩和 | 東邦大・理 | 梶 原 峻 | |
| 塩素置換ベンゼン分子線の光解離 | 東工大・理 | 市 村 禎二郎 | |
| 表面光化学 | 三重大・工 | 川 崎 昌 博 | |
| 分子内光反応のメチレン鎖長と磁場による制御 | 東大・教養 | 務 台 潔 | |
| グラファイト層間化合物の核磁気共鳴吸収 | 日大・理 | 宮 島 清 一 | |
| 黒鉛相関化合物の電子構造と物性 | 熊大・理 | 佐 野 瑞 香 | |
| ドーブされた有機光電導体薄膜の紫外光電子分光 | 阪大・工 | 城 田 靖 彦 | |
| 内部状態を選別したイオンの分解反応 $C_2H_2D_2^+$ | 東大・教養 | 本 間 健 二 | |
| アセチレンと酸素の反応 | 東工大・理 | 疋 田 巧 | |
| 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 | 東工大・理 | 山 崎 秀 郎 | |
| 分子の多光子イオン化と前期解離 | 三重大・工 | 佐 藤 博 保 | |
| かご型アミンの高励起状態のイオン化により生成する光電子スペクトル測定 | 東北大・理 | 藤 井 正 明 | |
| 遷移金属錯体の多光子イオン化 | 阪大・理 | 長 野 八 久 | |
| 有機金属錯体における超伝導性液晶の合成と物性 | 信州大・織 | 太 田 和 親 | |
| 新しい電荷受容体の合成と物性研究 | 東大・理 | 三 津 橋 務 | |
| 黒リンの intercalation compound の合成と電子物性 | 空蘭工大 | 城 谷 一 民 | |
| 超伝導体 $Li_{0.9}MO_6O_{17}$ 及び $BaBi_{1-x}Pb_xO_3$ のバンドギャップの測定 | 青学大・理工 | 秋 光 純 | |

| | | |
|--|---------|---------|
| CO ₂ の取込みにより生成する(モノアルキルカルボナト)(テトラアザシクロアルカン) 金属(III)錯体 | 京大・理 | 加 藤 昌 子 |
| 安定なチオアルデヒドの反応性の研究 | 東大・理 | 石 井 昭 彦 |
| チオニトロン化合物の研究 | 東大・理 | 高 橋 昌 己 |
| 遷移金属原子の励起エネルギーとイオン化エネルギー | 北大・理 | 関 谷 雅 弘 |
| 鉄ボルフィン錯体の電子状態及び分子構造に関する理論的研究 | 名大・理 | 斎 藤 稔 |
| 花卉中のアントシアニンの状態について | 名古屋自由短大 | 那 須 佳 子 |
| 新しい不斉反応プロセスを用いる生理活性物質の合成 | 愛工大 | 井 上 真 一 |
| 新しい Heterobimetallic 錯体の合成と反応 | 熊大・工 | 大 吉 昭 |
| 不斉異性化の反応機構に関する研究 | 阪大・基礎工 | 谷 一 英 |
| 新しいキラル二座配位金属配位子を用いる不斉接触反応の研究 | 愛知学泉短大 | 小谷野 錦 子 |
| 電子格子相互作用から見た水素結合系 | 富山大・教養 | 小 林 浩 一 |
| 新しいハロゲン架橋一次元鎖状混合原子価錯体の合成と物性 | 九大・教養 | 山 下 正 広 |
| 四座配位シッフ塩基鉄(III)錯体の磁気化学的研究 | 山口大・教育 | 右 田 耕 人 |
| クラスターアルキル錯体の分解機構 | 阪大・基礎工 | 斎 藤 太 郎 |
| 金属カルボニル錯体を含む有機金属錯体の時間分解ESRによる光化学反応の研究 | 東北大・非水研 | 岩 泉 正 基 |
| モリブデン(IV)アクァイオンとヌクレオチドとの錯体の溶存状態 | 東北大・理 | 永 沢 明 |
| 配位高分子の光物性と光化学 | 徳大・工 | 神 田 精 一 |
| Mo 六核クラスターの基底及び光励起状態の反応性 | 東北大・理 | 佐々木 陽 一 |
| 5族遷移金属錯体の触媒作用 | 阪大・理 | 安 田 源 |
| 第5金属ジチオラート錯体の合成と性質 | 阪大・理 | 巽 和 行 |
| S ₂ , Se ₂ が配位した金属錯体の電子構造 | 名大・理 | 喜 多 雅 一 |
| 光学活性な多座ホスフィン配位子を含む Co (III) 錯体の構造 | 名大・理 | 阿 藤 正 道 |

ソフトな配位子を持つ低酸化数モリブデン錯体の
光化学

岡山理大

柴 原 隆 志

招へい協力研究

〔前 期〕

高分解能高感度分光法による HNO , HCF , HCCl の
準安定状態の検出

富山大・理

高 木 光司郎

シアノアセチレン類の光反応

東大・物性研

木 下 實

遷移金属クラスター錯体の合成，構造，反応

京大・工

川 村 尚

ポテンシャルエネルギー面と反応動力学に関する
理論的研究

東大・工

松 為 宏 幸

ドーピングしたポリアセチレンの構造の研究

名大・理

田 仲 二 朗

遷移金属錯体の反応性

埼玉大・工

宮 下 晃

気相反応のポテンシャルエネルギー面と反応動力
学

東大・工

松 為 宏 幸

内部回転異性と分子機能：遺伝情報におけるその
重要性

東大・理

宮 沢 辰 雄

酸素分子の1光子禁制遷移の励起状態の研究

北大・応電研

勝 又 春 次

溶媒和分子の電荷移動状態の寿命測定

東大・教養

梶 本 興 亜

新しい機能をもつ前周期遷移金属錯体の合成

岡山理大

大河原 六 郎

配位化合物の励起三重項零磁場定数の理論計算

横浜国大・工

樋 口 治 郎

水素吸着グラファイトーアルカリ金属層間化合物
の合成と物性

分子研

榎 敏 明

レーザー化学における動的諸過程

分子研

西 信 之

有機薄膜の分子設計と機能

広大・生物生産

岡 田 正 和

分子集合体における構造と光エネルギー緩和

分子研

丸 山 有 成

有機カゴ型化合物のつくる分子場と特異機能の研究

分子研

三 角 莊 一

金属多核錯体触媒とクラスター触媒の接点に関する
諸問題

分子研

中 村 晃

分子過程動力学の理論

分子研

中 村 宏 樹

単一物質より成る導電性有機化合物（分子ファスナー）

分子研

井 口 洋 夫

準安定原子の生成とその動的挙動

東大・理

朽 津 耕 三

新しい電子分光

分子研

木 村 克 美

UVSOR 課題研究

◎ H_2^+ イオンへの Cs 原子からの電荷移動による H^- イオン生成の H_2^+ イオン振動準位依存性

三重大・工

川 崎 昌 博

東北大・理

三 上 直 彦

○ 阪府大・総合

杉 浦 俊 男

分子研

小谷野 猪之助

阪府大・総合

松 本 晟

分子研

田 中 健一郎

阪府大・総合

早 川 滋 雄

阪府大・総合

古 郷 真 嗣

◎ 蛍光分光法による光化学反応過程の研究

○ 分子研

正 畠 宏 祐

東大・理

近 藤 保

東大・理

永 田 敬

東邦大・理

大 島 茂

東大・教養

梶 本 興 亜

東大・教養

本 間 健 二

東工大・理

疋 田 巧

東工大・理

市 村 禎二郎

東工大・理

森 雄 次

東工大・理

小 尾 欣 一

東大・理

久 米 博

新潟大・理

徳 江 郁 雄

九大・生産研

辻 正 治

九大・総合

小 川 禎一郎

東大・教養

土 屋 莊 次

理研

松 本 吉 泰

分子研

田 林 清 彦

分子研

平 谷 篤 也

東工大・理

渋谷 一 彦

分子研

山 崎 巖

◎ 超音速ジェット中の分子クラスターの SOR 光イオン化分光

○ 分子研

木 村 克 美

分子研

阿知波 洋 次

分子研

佐 藤 健 児

公害研

鷺 田 伸 明

慶大・理工

茅 幸 二

慶大・理工

富 宅 喜代一

東大・理

近 藤 保

東大・理

永 田 敬

東大・理

久 米 博

北大・理

勝 又 春 次

筑波大

森 岡 弓 男

富山医薬大

北 川 泰 司

富山医薬大

森 佳 洋

三重大・工

佐 藤 博 保

UVSOR協力研究

〔前 期〕

| | | |
|---|--------|---------|
| 真空紫外領域におけるハロゲン化メチルの光分解 | 新潟大・理 | 徳 江 郁 雄 |
| エネルギー依存性に注目した有機固体の光電子脱出深度の検討 | 熊大・理 | 佐 藤 直 樹 |
| $(\text{Ar} + \text{O}_2)^+$ 系における内部状態選別した電荷移動反応断面積の絶対値測定 | 京大・理 | 加 藤 立 久 |
| 有機分子イオンの分解機構 | 奈良女大・理 | 山 本 正 夫 |
| 二原子分子の超励起状態からの競争失活過程 | 東邦大・理 | 大 島 茂 |
| 配向していない有機分子性固体の角度分解光電子分光 | 千葉大・工 | 上 野 信 雄 |
| 基礎的分子及び分子イオンの電子励起状態に関する蛍光測定による研究 | 京大・化研 | 伊 吹 紀 男 |

〔後 期〕

| | | |
|--------------------------------|----------|---------|
| カルバゾール類の光電子スペクトルの励起光エネルギー依存性 | 茨城大・工業短大 | 東 美 和 子 |
| ビニル高分子の角度分解SOR光電子分光 | 千葉大・工 | 杉 田 和 之 |
| 有機固体の光電子脱出深度のエネルギー依存性 | 熊大・理 | 佐 藤 直 樹 |
| 真空紫外領域における NO_2 の励起状態 | 東工大・理 | 渋谷 一 彦 |
| 有機分子イオンの分解機構 | 奈良女大・理 | 竹 内 孝 江 |
| 真空紫外領域におけるハロゲン化メチルの光分解 | 新潟大・理 | 徳 江 郁 雄 |
| 基礎的分子の電子励起状態と光分解過程に関する研究 | 京大・化研 | 伊 吹 紀 男 |

UVSOR招へい協力研究

〔前 期〕

| | | |
|-----------------------------|--------|---------|
| 極端紫外光による多価イオン化及び解離イオン化過程の研究 | 阪市大・原研 | 増 岡 俊 夫 |
| UVSOR 遠赤外ビームラインの建設 | 東北大・理 | 難 波 孝 夫 |
| UVSOR 用固体光電子分光装置の設計 | 阪市大・工 | 藤 井 康 夫 |
| UVSOR 用極端紫外分光器の設計 | 阪市大・原研 | 三 谷 七 郎 |

UVSOR 用極端紫外分光器の設計
共同利用用気体測定装置の建設協力

阪市大・工
京大・化研

石 黒 英 治
伊 吹 紀 男

〔後 期〕

共同利用用気体実験装置の建設
UVSOR 共同利用用気体実験装置の建設協力
UVSOR 用極端紫外分光器の設計と動作チェック
UVSOR 用極端紫外分光器の設計と動作チェック

阪市大・原研
京大・化研
阪市大・原研
阪市大・理

増 岡 俊 夫
伊 吹 紀 男
三 谷 七 郎
石 黒 英 治

分子研コロキウム

第279回 昭和60年 1月16日

水銀光増感反応中間体のレーザー分光 (土屋 莊次)

第280回 1月23日

極低温気体のレーザー分光

—分子化合物の電子励起状態における緩和を中心として— (三上 直彦)

第281回 2月6日

Photochemistry of Phytochrome as a Gene Activator in Plants

(P.-S. Song; Texas Tech University)

第282回 2月13日

ベンゼン誘導体の気相における193nm光化学 (池田 憲昭)

第283回 2月20日

化学反応の磁場効果 (谷本 能文)

第284回 2月27日

Theoretical studies of intermolecular interactions

(Z. Latajka; University of Wrocław)

第285回 3月6日

超伝導以後の有機伝導体 (森 健彦)

第286回 3月14日

有機遷移金属錯体の反応性に関する研究及び錯体触媒の開発 (山本 明夫)

第287回 4月10日

量子力学的反応速度の理論計算 (山下 晃一)

第288回 4月17日

Time-Resolved CID NP and its Applications to Radical and Biradical Chemistry (G.L. Closs; The University of Chicago)

第289回 4月24日

ラジカル発生機構に対する時間分解ESR法の応用 (手老 省三)

第290回 5月1日

Charge-Transfer between Redox-Sites in Organic Polymers

(Karl Doblhofer; Fritz-Haber-Inst. der Max-Planck-Gesellschaft)

第291回 5月15日

Infrared Diode Laser Spectroscopy of Molecular Ions
(A.R.W. Mckellar; National Research Council of Canada)

第292回 5月22日

無機低次元導体の電荷密度波 (佐藤 正俊)

第293回 5月29日

Dissipation and Entropy Production in Molecular Liquids
(Ernst Lippert; Techn. Univ. Berlin)

第294回 6月5日

レーザー励起状態光電子分光の最近の研究 (木村 克美)

第295回 6月12日

Allylic Resonance—When Is It Unimportant ?
(W.T. Borden; Univ. of Washington)

第296回 6月19日

多層構造分子集合体における励起エネルギー移動と会合体形成 (玉井 尚登)

第297回 6月26日

Atom Selective Photochemistry with Soft X-Rays from Synchrotron
(David M. Hanson; State University of New York, Stony Brook, NY)

第298回 7月3日

量子力学の論理の再構築 (豊沢 豊)

第299回 7月10日

時間分解共鳴ラマン分光法とその応用 (浜口 宏夫)

第300回 7月24日

Transition Metal Hydrides with Three-Centre Two-electron Bonds: Synthesis, Structure and Reactivity
(Luigi M. Venanzi; ETH Zürich)

第301回 7月31日

Matrix Isolation Studies of Photochemical Reaction Intermediates and Photophysical Processes
(Antony J. Rest; University of Southampton)

第302回 9月4日

Photochemistry of Simple Molecules: then and now

(H. Okabe; Howard Univ.)

第303回 9月11日

Orthonormal Operators in Ligand Field Theory

(Claus Schaffer. Ørsted Institute, Universitet K benhavn)

第304回 9月25日

Dynamical Properties of CDW in Transition Metal Tetrachalcogenides

(P. Monceau; CNRS)

第305回 9月25日

Could Life Have Started on Clays ?

(Pierre Laszlo; University of Liege)

第306回 10月9日

Activation Pattern, Bonding Character, Charge Transfer and Related Problem for the
Chemisorption of CO on Bicomponent Systems

(Chen Rong; Dalian Inst. of Chemical Physics, Academia Sinica)

第307回 10月16日

The Formation of Singlet Molecular Oxygen from Molecular Triplet States: Some New
Observations

(Michael A. J. Rodgers; The University of Texas Austin)

第308回 10月23日

ポリアセチレンの非線形励起に対するクーロン相互作用の効果 (笹井 理生)

第309回 10月30日

Manifestation of Back-Bonding in Reactivity

(Henry Taube; Stanford University)

第310回 11月6日

Lasers and Applications in the Indian Context

(Hari D. Bist; Indian Institute of Technology, Kanpur, India)

第311回 11月13日

酸素キャリアーとしての鉄ポルフィリン及び関連錯体の共鳴ラマン・赤外分光法による
研究 (大塩 寛紀)

第312回 11月20日

The electron nucleus coupling in paramagnetic compounds

(Ivano Bertini; University of Florence, Italy)

第313回 11月20日

擬一次元導体バナジウムブロンズにおけるポーラロンとバイポーロン凝縮相

(小野田 雅重)

第314回 12月4日

Some Current Problems in Organic Solid State Physics

(E.A. Silinsh; Institute of Physics and Energetics, Latvian SSR, Academy of Science, USSR)

第315回 12月4日

励起化学種の動的挙動に対する外部磁場効果 (林 久治)

第316回 12月18日

硫黄およびセレンを含む多重結合化合物 (岡崎 廉治)

第317回 12月18日

Biomolecular Science (宮澤 辰雄)

第318回 12月25日

有機結晶の光電導 (小谷 正博)

編 集 後 記

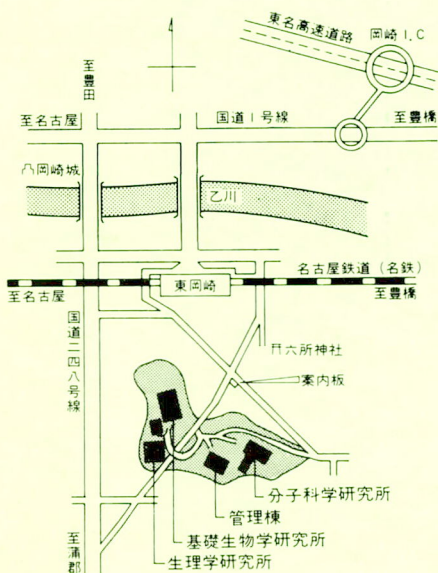
本年は分子研創設10周年を迎え、多くの記念事業がおこなわれました。分子研レターズも、「10周年」を念頭に置いて編集致しました。「視点」は評議員会議副議長の馬場宏明先生にお願いしました。「10周年」は、私達が分子科学という学問分野の発展の過程をふりかえり、今後のことを考えるよい機会でした。そこでレターズ欄では、「分子科学、次の10年に期待する」という題のもとに、分子研にかかわりの深い外部の方々に執筆していただきました。また、最近分子研に3ヶ月以上滞在された外国人研究者には、分子研の印象を語っていただきました。そして例年の記事以外に本号では、10周年の記念事業をまとめ、記録に残そうと考えました。お忙しいなか原稿を執筆していただきました方々に厚くお礼申し上げます。

| | |
|-------|--------------|
| 編集委員会 | 大 峯 巖 |
| | 木 村 克 美 |
| | 北 川 禎 三 (代表) |
| | 高 谷 秀 正 |
| | 吉 原 経太郎 |

— 分子研レターズ No.14 —

| | |
|------|-----------------------------|
| 発行年月 | 昭和61年 3 月 |
| 印刷年月 | 昭和61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 | 株式会社 刈 谷 高 速 印 刷 |

位置図



交通案内

- 東京方面から
豊橋駅下車、名古屋鉄道に乗り換えて東岡崎駅下車（豊橋―東岡崎間約25分）南へ徒歩で約7分。
- 大阪方面から
名古屋駅下車、名古屋鉄道に乗り換えて東岡崎駅下車（新名古屋―東岡崎間約35分）南へ徒歩で約7分。
- 自動車利用の場合
東名高速道路の岡崎J.Cをおりて、国道1号線にでて西へ約10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 |
| 相関領域研究所 | (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 |
| 極端紫外光実験施設 | (52) | 6 | 1 | 0 | 1 |

