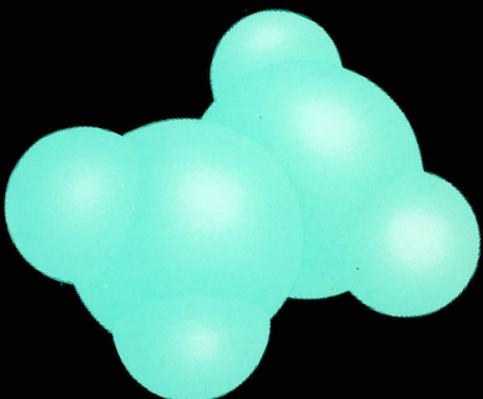




分子研レターズ  
'86 No.15



分子科学研究所  
INSTITUTE FOR  
MOLECULAR SCIENCE  
ISSN 0385-0560

# 目 次

視 点 思いを新たに ..... 所 長 長 倉 三 郎 ..... 1

## 研究室紹介

分子集団動力学部門 (I) ..... 分子研 丸 山 有 成 ..... 2

## 外国人客員教官の紹介

Eberhard Tiemann (西ドイツ ハノーバー大学) ..... 5

J. K. Jeszka (ポーランド 科学アカデミー) ..... 5

J. Robb Grover (米国 ブルックヘブン国立研究所) ..... 6

Jong-Myung Lee (韓国 全北国立大学) ..... 6

外国人評議員の来所 (P.-O. Löwdin 教授) ..... 7

受賞者紹介 (早坂啓一技官) ..... 8

## 課題研究報告

### 「高スピン有機分子の設計、構築及びその物性」

..... 大阪市立大理 伊藤公一・分子研 岩村 秀 ..... 9

## 岡崎コンファレンス報告

### 第26回 岡崎コンファレンス

#### Molecular Processes in Interstellar Space and Cometary Atmosphere

..... 分子研 花崎一郎・小谷野猪之助・西 信之

名大理 斎藤修二 ..... 13

## 国際協力事業報告

第2回日韓分子科学シンポジウム ..... 分子研 諸 熊 奎 治 ..... 23

## 研究会報告

第7回 UVSOR 研究会 ..... 分子研 井口洋夫・渡辺 誠 ..... 28

### New Aspects of Electron Spectroscopy

—— K. Siegbahn 教授を迎えて —— ..... 分子研 木 村 克 美 ..... 30

準安定励起原子分子の生成とその動的挙動 ..... 東大理 朽 津 耕 三 ..... 32

分子過程動力学の理論 ..... 分子研 中 村 宏 樹 ..... 34

共同研究採択一覧	36
分子研コロキウム	46
国際交流	48
海外からの招へい研究者	
海外からの訪問者	
外国人研究者来所予定	
海外渡航	52
人事異動	55

# 視 点

## 思いを新たに

所 長 長 倉 三 郎

分子科学研究所は創設以来10年を経て、研究の基盤が確立され国際的に高い評価を受けると共に、研究所として独自の雰囲気や伝統が育ちつつあることは喜ばしいことである。しかし、よく言われているように「淀む水は腐る」ことも確かである。まして分子科学の国際的センターとして、分子科学の今後の発展に大きな責任をもつ当研究所としては、これまでに築きあげてきた蓄積やそれに対する評価に安住することなく、常に未知の分野を求めてその探求に情熱をもやし、新しい困難な課題に積極的にチャレンジしなければならない。日々思いを新たにして創造性豊かな研究に取り組み、さらに優れた雰囲気や伝統を育てていただくことを特に若い研究者に期待したい。

研究所を訪ねる外国の研究者が「この研究所には熱氣がある」とよく言われる。この言葉をきくことは、赤松前所長をはじめ、創設以来研究所の基盤確立に文字通り心血を注がれた研究スタッフ及び事務関係の諸先輩の御尽力が報いられたことで、私にとっても大変嬉しいことである。これに対しては「所長としての私は熱気が冷えないように適当に燃料を運んでくれればよいので、大変有難い」と答えることにしている。極めて楽観的にみえるが、しかし私の気持の中に一抹の不安がないわけではない。それは、分子科学に革新的な発展をもたらすような真に独創的な概念や研究方法が生れるであろうか、また5~10年後に分子科学の大きな流れとなるような新しい研究分野が分子科学研究所で展開されるであろうかという不安である。

真に画期的な研究が創造される確立は極めて低いものであるから、こうした不安がつきまとることは責任者としての所長の宿命であるかもしれない。しかし、分子科学研究所は優れた研究条件と研究スタッフに恵まれ、革新的・独創的研究を推進する上に最も適した環境にある。これを生かして関係者の期待に答え、また分子科学の飛躍的発展のためにさらに一段の工夫と努力をしなければならないと考えている。そのためには、まず所内の精密化路線・極限化路線の研究といわば海のものとも山のものとも判らない研究の比重を多少後後に傾ける努力が必要であり、所内外の新しい発想や研究の芽を思いを新たにし、新鮮な感覚をもって探し求めなければならないと考えている。さらに長期的には、新しい困難な課題に積極的に挑戦する強い好奇心と激しい情熱をもった若い創造性豊かな研究者を育てることが急務と考えている。こうした観点からも総合研究大学院の創設は極めて重要であり、情熱を傾けてその実現に努力したい。

なお従来の“分子研レターズ”と“分子研ニュース”を併せ、分子研レターズとして発行回数をふやし、一誌で両者の性格をみたすようにした。これも“思いを新たに”的一つの試みとしてご理解いただき、今後ご支援をいただくことをお願いしたい。

# 研究室紹介

## 分子集団動力学部門（I）

丸山有成

標記部門は分子研の第一期計画の最後の部門として昭和58年度末に創設され、59年2月にお茶の水女子大学より丸山が着任し、同年8月にNorthwestern大学より稻辺保助手が赴任して丸山グループが発足した。部門としては、翌年2月に東大物性研究所より佐藤正俊助教授が着任し、また同年7月に筑波大学より小野田雅重助手が赴任して佐藤グループも発足した。

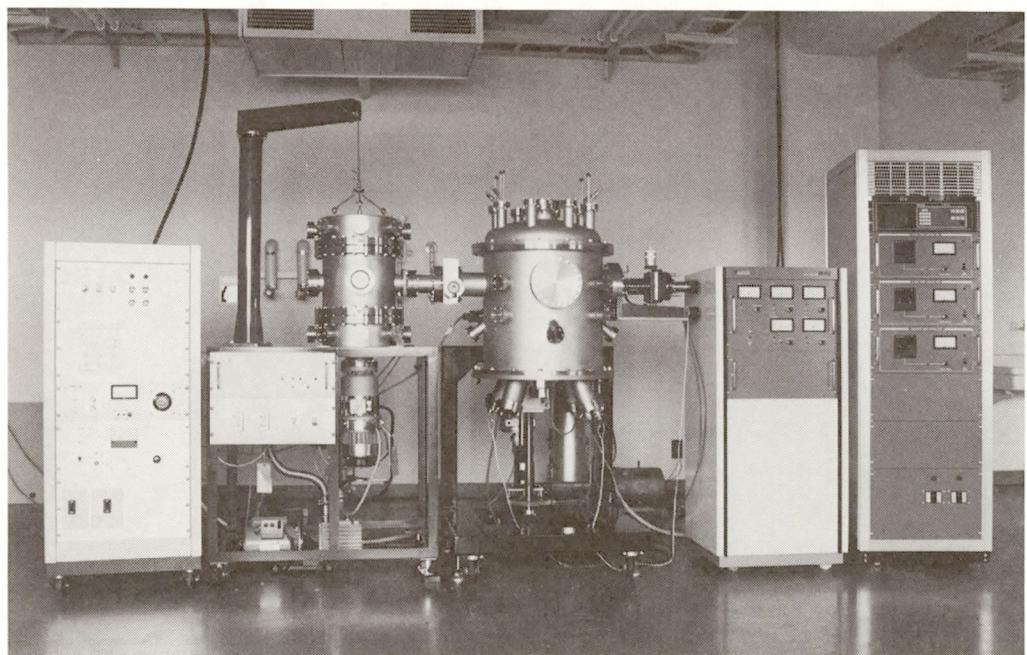
ここでは、丸山グループの研究室紹介を行う。当初、部門として期待されていた研究分野は、固体や液体の興味ある動的物性の研究ということであったが、それと同時に（あるいはむしろ）興味ある新物質・状態の構築とその物性測定を中心的課題と考えるようになった。その意味で、お茶大において始めた黒リンおよびその層間化合物の研究は発足当初から今日まで継続的に行っている。すなわち、協力研究として城谷一民氏（室蘭工大）、岩崎紀子氏（現キャノン中研）と共に黒リンの低温における電子状態を調べ、Anderson局在の存在を導電性測定やトンネル分光により明らかにすることことができた。また、黒リン層間化合物の合成は黒リン研究の最初からの悲願であったが、三菱油化四日市研究所からの受託研究員西井俊文氏の参加を得て1年半の努力の結果、ヨウ素あるいはセシウムのインターラエクションが明らかとなり、特にヨウ素の場合は低温において金属的挙動を示す層間化合物も得られた。

一方、新しいタイプの有機高電導体の合成と物性測定は稻辺助手が中心となって行われてきた。そのうちでまず、TCNQ骨格をピリジン核で置きかえたAzaTCNQを新たに合成し、それをカウンターアニオンとするいくつかの電荷移動錯体結晶の作製に成功した。特に、 $(TMTSF)_2AzaTCNQ$  単結晶は室温から150K附近まで金属的状態にある事が、電気抵抗、熱電能、ESR測定によって明らかになった。またこの結晶の構造解析を分子集団部門の森健彦助手の協力を得て行った結果、正孔伝導に寄与するTMTSFのカラム構造があり、AzaTCNQはそれにはほぼ直交する配置をとりカラムを形成しないという特異な構造を持つことが判明した。これらの仕事は59年4月より61年3月までお茶大修士課程の分子研受託学生であった浦山初果娘によって行われた成果である。その他、2つのTCNQ分子をベンゼン環を介して結合させた構造をもつOCNAQと呼ばれる新しい電子受容体についても、東大理学部の三津橋務氏との協力研究により進展している。また、信州大纖維工学部の太田和親氏との協力研究で、ディスコティック液晶の導電性の研究も進行中である。さらに最近、分子研装置開発室の三谷洋興助教授との共同研究で、導電性と光応答性という2つの機能をもつ新しい物質系としてプロトン移動と電子移動（それぞれ分子内あるいは分子間で）の結合系の分子設計およびその合成を開始している。これらの系の隠された新しい

有用な側面を引き出したいと考えている。

新しい物質状態に関する研究としては、非晶質状態（有機物質）およびその発展としての液体状態での物性測定も行われた。具体的には、アントラセン、ピレン等の融解状態の蛍光スペクトルおよびその時間特性（ピコ秒領域）を結晶や非晶固体の場合と比較検討したもので、この研究はお茶大からの受託学生堀口留美子嬢（昭和59年4月—60年3月）によって行われた。堀口嬢の卒業後この仕事は残念ながら中断しており、機会をみて新しい展開をはかりたいと考えている。

このように新物質・新状態を研究することを目標とした当研究室の目玉として、創設当初からの計画である有機極薄多層膜の作製というテーマがある。方法としては、超高真空蒸着装置を用いたいわゆる MBE 装置を有機物質用に改良したもので、現在ようやく膜作製の段階に入った。これは本年3月より技官として東工大より着任した星肇氏が担当し、他の全員も協力していくことになる。装置の外観の写真を示す。有機物の単分子層オーダーの多層膜として新物質をつくり、その新しい物性を引き出したいと考えている。



有機極薄多層膜作製装置の外観。右側が蒸着用チャンバーで左側が試料交換室。4種類の物質の順次蒸着が可能で、RHEED, エリプソメトリー, 電導度測定などが in situ に行える。

以上紹介したように、研究室創設以来約2年半が経過した。この間には、上記以外に59年9月より60年7月までの10ヶ月間ソ連カリコフ工科大学からの特別協力研究員として、Y. I. Dolzhenko氏が滞在した。 $PbI_2$ などの新しい層間化合物の研究をされ、ナイーブで親しみやすい（しかしながらなかなか頑固な）ソ連人という印象を残して無事帰国されたが、その後の連絡が十分とれない点が残念である。

創設直後の研究室にお茶大から半強制的に参加してもらい、文字通り異色の存在であった堀口・浦山両花の活躍は特に銘記しておきたい。また、三菱油化からの西井氏の多方面にわたる貢献も多大であった。現在のスタッフは筆者以外に稻辺助手、星技官、それにこの7月より新しいカテゴリーの研究技官として星野直美氏（お茶大、Ohio州立大）が加わった。星野技官は、プロトン・電子移動系の研究を開始している。分子集団動力学の英語訳の略号はMADとなるが、当研究室はMAD-1グループとして異色の存在でありたいと思っている。

# 外国人客員教官の紹介

## 分子エネルギー変換研究部門

Eberhard Tiemann 教授 (西ドイツ・ハノーバー大学教授)

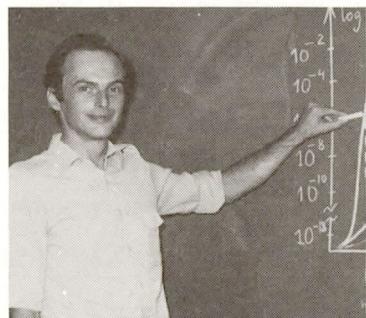
Tiemann 教授は外国人客員教授（エネルギー変換部門）として昭和61年6月1日から同62年3月15日まで9ヶ月半の間分子研に滞在される。同教授は1942年ドイツに生れ、ベルリン自由大学物理学教室で博士、ハビリタチオン取得、助手、助教授を歴任、1978年ハノーバー大学原子分子物理学教室教授となり、現在に至っている。この間米国ワシントンのNBSに約半年間滞在し共同研究を行った。Tiemann 教授の業績の根幹は超微細構造定数、双極子モーメント等の分子定数の精密決定とそれに基づく分子の基本的性質の解明にある。対象は2原子分子など比較的簡単な分子に限られるが、分子線の手法を巧みに用いて Born-Oppenheimer 近似の破れを明確に示した着実な成果は特筆に値しよう。最近前期解離を超微細構造を通じて明らかにするというユニークな方法を開発し注目を集めている。



(廣田榮治記)

J. K. Jeszka 助教授 (ポーランド・科学アカデミー研究員)

ポーランド科学アカデミー・分子・高分子研究センターのJeszka 博士が外国人客員助教授として5月末着任した。彼は、Lodz 大学物理学科の出身で、Lodz 工科大学で高分子の物理化学の研究課題で Ph. D を取得している。5月から半年間、分子科学研究所に滞在して、物性化学部門との共同研究を進めている。



ポーランドでは M. Kryszewski 教授の許で他の機関では全く手掛けていない高分子をマトリックスとした電荷移動分子錯体の電導現象を中心に、独自の物質系の研究を行っている。分子研では、共同でこれらの試料中の電荷の挙動の解析を行っている。

また、ここでの研究課題として、対象を **TTCnTTF** と略記している4個のパラフィン鎖を持つ有機固体におき、その熱的測定から実験を開始し、奇妙な相転移の解析を急ぎ行っている。

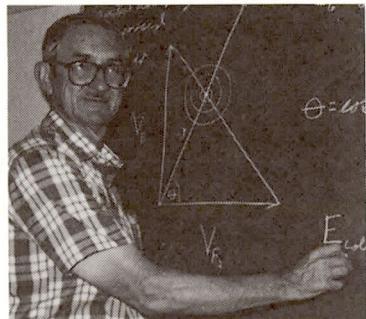
(井口洋夫記)

## 極端紫外光研究部門

J. Robb Grover 教授 (米国・ブルックヘブン国立研究所主任研究員)

昭和61年6月6日より62年4月30日までの約11ヶ月間、外国人客員部門教授として滞在されるグローバー博士は、米国の Brookhaven 国立研究所 (BNL) の化学部の主任研究員 (senior chemist) である。博士は、1958年に、カルフォルニア大学バークレー校のノーベル賞学者である Glenn T.Seaborg 教授のもとで、核化学の分野で Ph. D. を取得された、分子研の招へい研究者としては異色な存在の人であろう。BNL では、核化学の分野で活躍して来られたが、1970年以降は、短寿命の人工放射性元素を用いた高感度原子検出法を考案され、化学反応素過程研究に新しい方法を提供した。最近は、BNL に建設された国立シンクロトロン光源 (NSLS) の VUV リングを光源として、分子間化合物の光イオン化質量分析法による、イオン分子反応の興味ある一連の研究を行っておられる。

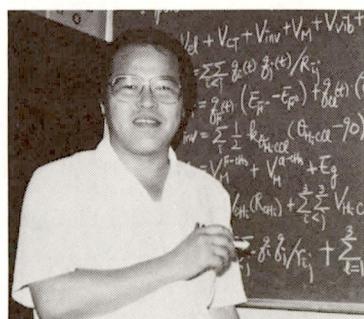
(正畠宏祐記)



Jong-Myung Lee 助教授 (韓国・全北国立大学助教授)

Jong-Myung Lee (李鐘鳴) 博士は、外国人客員助教授として、本年3月1日より11月末まで理論グループと協力して研究に励んでおられる。李博士は1981年韓国高等科学技術院 (KAIST) の全武植教授の下で学位をとった後、韓国中西部の全州 (Chonju) にある全北 (Chonbuk) 国立大学化学科の助教授になり今日に至っている。専門は、統計熱力学の液体・溶液の理論への応用であるが、分子研では統計力学と古典衝突論を組合せて、水和クラスター中の化学反応の動力学の理論研究を推進しており、連日深夜まで頑張っている姿が見られる。家族は、奥さん (全恵玉 Hae Ock Chon)、3才の長男と1才の長女の計4人で、最近山手ロッジから三島ロッジに移った。週末は、2台の自転車に子供たちをのせて、市内の公園など出かけて家族サービスに専念するいいパパである。

(諸熊奎治記)



## 外国人評議員の来所

P.-O. Löwdin 教授

外国人評議員の Per-Olov Löwdin 教授が、5月6日から12日まで、評議員として3度目で最後の来所をされた。Löwdin 教授は、昭和58年6月から本年5月末まで3年間にわたって評議員をつとめられ、その間、スーパーコンピュータ導入など、研究所の将来方針について種々の助言をされたほか、昨年5月の創立十周年記念行事での特別講演、いくつかのセミナー、またスウェーデンの教育研究体制やノーベル委員会についてのレクチャーなど大変貴重な寄与をしてくださった。

今回の来所では、評議員懇談会に加え、電子状態理論の現状と将来に関する1日ミニシンポジウムに御参加くださり、毎年 Löwdin 教授が主宰されるサニベル理論化学会議や国際量子化学会議などで旧知の研究者の最近の研究に対し、いろいろとコメントをくださった。評議員として3年間お世話になったことを感謝するとともに、近い将来にまた来所されるように望みたい。

(諸熊奎治記)



## 受賞者紹介

早坂啓一氏に  
日本化学会化学研究技術有功賞



極低温センターの早坂啓一技官が、昭和60年度の日本化学会“化学研究技術有功賞”を受けた。分子科学研究所の一員として、極低温センターに関係している一人として、また彼の誠実な人柄に敬服している者として、非常に嬉しい出来事であった。

この賞の対象を日本化学会の公告から転記すると「わが国の化学および化学工業の研究を遂行する上で、わが国で開発された技術に関して、特に顕著な業績のあった者」とされている。

早坂啓一氏の歩んだ低温科学技術の道は、即日本の低温科学発展の道だったようと思える。昭和36年東京大学物性研究所に就職し、昭和57年分子科学研究所に移って現在までの25年間、ヘリウム液化機の性能向上と、液体ヘリウム利用技術の発展に全力を投入した。昭和30年代の貴重品“液体ヘリウム”の製造技術の改善は、例えば液化機の能力を40%増加させたり、熱交換器を上手く利用して、運転開始から液体ヘリウムが実際に流出する迄の時間を4分の1に短縮するなどは特記に値する。

また、今までこそヘリウムの漏れるバルーンなど考えることも出来ないが、昭和40年当時、気球製作所と共同開発したナイロン補強合成ゴムバルーンの利用で、従来のバルーンに比べて回収率を50%から90%にあげたことは、液体ヘリウムの利用普及にはかり知れない貢献をしたものである。高価なヘリウムには回収のむつかしさがつきまとう。早坂氏の考案（昭和52年）した回収配管の利用は、分子研全実験棟に適用し、短時間に95%以上が回収出来るようになっていることは、余り知られていない。

昭和56年の分子研の一般公開で好評を博した科学映画“奇妙な世界・極低温へ”は東大物性研永野弘教授（現富山大）との共同指導でつくられたもので、あれ程明瞭に液体ヘリウムを映出したものはその後も現れていない。

低温科学の一分野として低温化学が育ちつつある。早坂氏が今迄の蓄積を生かして、その育成に貢献してくださることを期待している一人である。

(井口洋夫記)

## 課題研究報告

# 「高スピン有機分子の設計, 構築およびその物性」

大阪市立大学理学部 伊藤公一  
分子科学研究所 岩村秀

分子には幾何学的対称性のほかに、トポロジー的対称性がある。この対称性を利用して分子設計を行うと、基底状態で極めてスピン多重度の高い有機分子を構築することができる。われわれは幾何学的対称性からは実現できない  $S \geq 3/2$  の分子を、特に高スピン有機分子と呼ぶことにしている。この特異な分子の電子構造と磁気的性質については、既に多くの基礎的な知識が集積されており、その発展、応用として新物質である有機強磁性高分子を考えることができる。そのために解決しなければならない問題としては、(1)大きなスピン多重度を持った高スピン有機分子を得ること、(2)その分子間に強磁性的相互作用を持たせ、バルクとしての強磁性を発現させること、の2つがある。本稿は、この2点について物理化学と有機化学の両面から協力研究する目的で3年間行われた課題研究の報告である。

### (1) 一次元鎖構造を有する高スピンポリカルベンの磁性と分子構造

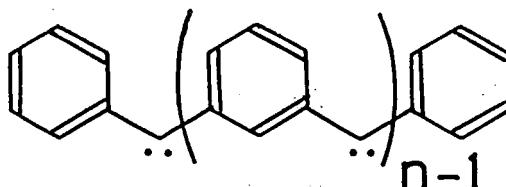


図1 一次元強磁性体モデル化合物  
 $n = 3, 4, 5, 6$

図1に示した一次元鎖ポリカルベンは、いずれも前駆体であるポリジアゾ化合物の光分解によって得られる。 $n=4$  の分子はベンゾフェノン単結晶をホストとする混晶系について測定した ESR<sup>1・2)</sup> と帯磁率<sup>3・4)</sup> から基底9重項 ( $S=4$ ) であることが証明され、磁気的パラメータも決定された。これは有機、無機化合物を通じて最もスピン多重度の高い分子である。また低温で

有機溶媒中に捕捉すると、弱い反磁性的相互作用を持った会合体になることが帯磁率の測定から判った<sup>3・4)</sup>。 $n = 3$  の場合は基底 7 重項分子となり、それについても同様な研究が行われた。また分子が複雑になると単結晶試料を得ることが困難となるので、粉末およびガラス状態における複雑な多重項 ESR スペクトルを解析する一般的方法を確立した<sup>5)</sup>。

これらの一次元鎖ポリカルベンは、二価炭素のために柔軟な構造を持っているのが大きな特徴である。そのためにこの 9 重項分子は、単結晶ホスト中でも 1.8–160 K の範囲で不可逆的に 4 種の配座異性体をとるが、スピントリニティは変わらない。磁気的パラメータの半経験的計算から、これらは二価炭素結合の反転を伴う大きな構造変化であると推定される。この事実はスピノ整列機構が分子構造変化に対して安定であることを示しており、理論的にも予測されるところであるが、トポロジーの性質として興味深い。

$n = 5, 6$  のポリカルベンは、基底 11 および 13 重項になることが期待される。現在、単結晶 ESR からはそれを示唆する予備的結果を得ているが、他方帯磁率の測定では期待した程スピントリニティは上らず、目下その原因を解明中である。

## (2) 一次元鎖間の弱い相互作用

純粋に一次元のスピノ配列からはバルクとしての強磁性の発現がないことが理論的に知られているので、多次元化に関する方針を定めることが極めて重要である。これに関しては 2 つのアプローチを行った。

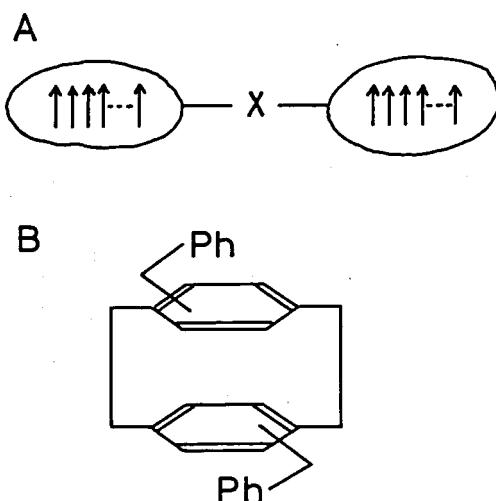


図 2 一次元鎖間の弱い相互作用の考察

第一は図 2 A に示したように、一次元高スピン有機分子間に架橋 X を導入し、その間に強磁性的相互作用を持たせるアプローチである。最も簡単な構造のモデル化合物として、モノカルベンである三重項ジフェニルメチレン (DM) 間を  $-\text{CH}_2-$  および  $-\text{O}-$  で架橋した分子を(1)の場合と同様な系からつくり、その磁性を調べた。これまで述べた分子はいずれも交互炭化水素であり、隣接炭素原子上のスピン分布は交互に反転しているので、架橋の位置が重要な因子となる。 $-\text{CH}_2-$  を二価炭素からみて 3 と 4' の位置に架橋すると、3 種類のジカルベンが得られる。4, 4' 架橋の場合は極低温では反強磁性的に働くが、昇温すると構造変化が起って強磁性的となった。これは変化後に分子がより平面的になり、超共役機構が支配的になったためと考えられる。また  $-\text{O}-$  架橋では 4, 4' の場合反強磁性的になるが、3, 3' と 3, 4' では強磁性的となり、電荷移動機構が働くものと考えられる。このように架橋の位置と構造を選ぶことによって、鎖間のスピン整列をコントロールできることが判った。

第二のアプローチは、正と負のスピン密度間の空間的重なりを利用するものである。図 2 B に示したように [2.2] パラシクロファン骨格で二つの三重項 DM を連結したモデル分子は、二つの二価炭素に関して擬オルト、擬メタ、擬パラの三種類があり、McConnell の理論に従うとそれぞれ強、反、強磁性的に相互作用するものと期待される。実験結果は予想通りであり、擬メタおよび擬オルトは基底状態がそれぞれ一重項および五重項で、三重項状態よりも 200 cal/mol ほど安定であることが認められた<sup>6)</sup>。ただし架橋の単結合  $(\text{CH}_2)_2$  を介したトポロジー的対称性によっても同じ結果が期待される。そこでこれを長くした [3.3] パラシクロファン骨格で同様の実験を行ったところ、同じ結論が得られた。したがって、パラシクロファンに組み込まれたベンゼン環の間の正と負のスピンの空間的重なりが主要な原因であると結論された。このモデル化合物を用いた実験から、高スピン分子のスタッキングで適切な配向が得られれば、分子間にわたってスピンを揃えることができる事が明らかとなった。実際に、長鎖アルキル基間の分散力をたよりにビス(*p*-オクチルオキシフェニル)ジアゾメタンを配向させ、この結晶に紫外線を照射して対応する三重項 DM を発生させると、分子 4 個にわたってスピンが並行に揃ったクラスターが生じていることが ESR の微細構造および帯磁率の測定から明らかとなった<sup>7)</sup>。

このように、強磁性的に結合したスピン集団である高スピン有機分子を構築し、その間のスピン整列をコントロールする方法を確立することができた。

本共同研究は、分子科学研究所の課題研究として寛大な支援を得、お蔭で極めて円滑に進行し、更に大きなモーメンタムを得て、実質的には現在も進行している。

1) Y. Teki, T. Takui, K. Itoh, H. Iwamura, K. Kobayashi, *J. Am. Chem. Soc.* **105**, 3722–3723 (1983).

2) Y. Teki, T. Takui, K. Itoh, H. Iwamura, K. Kobayashi, *J. Am. Chem. Soc.* **108**, 2147–2156

(1986).

- 3 ) T. Sugawara, S. Bandow, K. Kimura, H. Iwamura, K. Itoh, *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 6449–6450 (1984).
- 4 ) T. Sugawara, S. Bandow, K. Kimura, H. Iwamura, K. Itoh, *J. Am. Chem. Soc.* **108**, 368–371 (1986).
- 5 ) Y. Teki, T. Takui, H. Yagi, K. Itoh, *J. Chem. Phys.* **83**, 539–547 (1985).
- 6 ) A. Izuoka, S. Murata, T. Sugawara, H. Iwamura, *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 1786–1787 (1985).
- 7 ) T. Sugawara, S. Murata, K. Kimura, H. Iwamura, Y. Sugawara, H. Iwasaki, *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 5293–5294 (1985).

# 岡崎コンファレンス報告

## 第26回 岡崎コンファレンス

Molecular Processes in Interstellar Space and Cometary Atmosphere

分子研 花 崎 一 郎

小谷野 猪之助

西 信 之

名大理 斎 藤 修 二

化学とはおよそ関係のなさそうな宇宙空間の諸現象が、今や“分子”を抜きにしては語れないということが明らかになってきた。電波の観測からは70種にのぼる様々の分子の存在が示され、星の生成初期過程や原始太陽系の生成過程は、様々の分子の雲の温度や広がりを観測する事によって解明されつつある。今年はハレー彗星が接近し、ヨーロッパ、日本、アメリカから探査機が打上げられ、その分子組成が大ざっぱながらわかった。また、彗星の表面は黒く、有機物が太陽からの紫外光で反応を起こし、水素、炭素、窒素、酸素がほぼ、 $1 : 1 : 1 : (0.6 \sim 1)$  の割合で含まれる重合物となっているらしい。塵の分析計は、このような粒子を捕えている。

本コンファレンスでは、60年代から星間塵が分子の凝縮体である事を予言し続けた、天文物理の Greenberg 教授、オンサラ電波天文台で精力的に活躍しておられる Hjalmarson 博士、それにイオン-分子反応で有名な Smith 教授と Adams 博士を交えて、星雲を中心とした電波観測の最近の話題、実験室での分光実験、彗星の分子過程、イオン-分子反応過程、そして、原始海洋でのペプチドや細胞状物質の生成に至るまで、幅の広い話題が、宇宙における分子という共通の基盤に立って展開された。分子研では特別研究としてこの問題に取り組んでおり、独自の立場での貢献を試みているが、最先端の分子科学の知識がこのような研究の展開に導入され、より正確な議論を可能にしている。しかし、まだまだ観測事実が不足しており、分子過程を論じることはできても実証に至るには、まだまだ年月がかかりそうである。

以下にプログラムと講演・討論の内容を紹介する。なおレセプション後の after-dinner talk は早川幸男教授（名大理）によって行われたが、この内容は P. 19 以降に掲載してある。

## **June 26 (Thursday)**

I. Hanazaki Presiding

13 : 00—13 : 10 S. Nagakura (IMS), "Welcome Address"

13 : 10—13 : 20 I. Hanazaki (IMS), "Introductory Remarks"

E. Hirota Presiding

13 : 20—14 : 10 A. Hjalmarson (Onsala Space Observatory), "Molecular Radioastrophysics-Astrochemistry"

14 : 10—14 : 40 N. Kaifu (Nobeyama Radio Observatory), "Recent Results of Molecular Spectroscopic Observations in NRO"

14 : 40—15 : 00 M. Ohishi (Nobeyama Radio Observatory), "Physical and Chemical Analysis of Massive Star Forming Region"

S. Saito Presiding

15 : 40—16 : 20 A. Mizuno (Nagoya Univ.), "Discovery of Five Bipolar Outflows with the Nagoya 4m Telescope"

16 : 20—16 : 45 *H. Takeo*, S. Takano, M. Sugie, C. Matsumura and K. Kuchitsu (Natl. Chem. Lab. for Industry and Univ. of Tokyo) "Laboratory Detection and a Search for Interstellar C-Cyanomethanimine (HCN Dimer)"

K. Takagi Presiding

16 : 45—17 : 10 E. Hirota (IMS), "High-Resolution Infrared Spectroscopy of Transient Molecules of Astrophysical Interest"

17 : 10—17 : 35 M. Ohishi, S. Saito, K. Kawaguchi, H. Suzuki, T. Kasuga and N. Kaifu (Nobeyama Radio Observatory and IMS), "Laboratory Observations of U45. 379 ; the J=17-16, 1<sup>+</sup>, v=1 Transition of H (C ≡ C)<sub>2</sub>CN?"

18 : 30—19 : 30 Reception

19 : 30—20 : 30 After Dinner Talk by S. Hayakawa (Nagoya Univ.) "Molecules and Dust in the Interstellar Medium" (K. Takayanagi Presiding)

## **June 27 (Friday)**

N. Nakagawa Presiding

9 : 30—10 : 30 M. J. Greenberg (Univ. of Leiden) "Is the GIOTTO Comet Halley Mission Telling Us Something about Interstellar Dust?"

10 : 50—11 : 20 T. Yamamoto (Inst. of Space and Astronautical Sci.) "Origin of Comets as

Viewed from Chemical Composition of Cometary Ice and Grains"

11:20-11:50 N. Nishi (IMS) "Condensation of Molecules as Clusters and the Surface Photochemistry of Contaminated Ice"

11:50-12:20 M. Shimizu (Inst. of Space and Astronautical Sci.) "Cometary Organic Hydrogen"

I. Koyano Presiding

14:00-15:00 D. Smith (Univ. of Birmingham) "Molecules in Diffuse and Dense Clouds and in Cometary Atmosphere"

15:00-15:30 A. Sakata and S. Wada (Univ. Electro-Communications) "7.7 and 7.6  $\mu\text{m}$  IR Features from Partially Oxidized Carbonaceous Dust"

16:00-16:30 H. Suzuki (Nobeyama Radio Observatory) "Reconsideration of Interstellar Chemical Evolution"

16:30-17:00 H. Yamazaki (Tokyo Inst. Tech.) "Sensitivity Test of Ion-Molecule Reaction Rate Constants in the Formation of Interstellar Molecules"

**June 28 (Saturday)**

Y. Kaneko Presiding

9:30-10:20 N. Adams (Univ. of Birmingham) "Recent Studies of Reaction Rates Relevant to Interstellar Chemistry"

10:20-10:50 K. Sakimoto (Inst. of Space and Astronautical Sci.) "Influence of Long-Range Interaction on Ion-Molecule Reaction Rate"

10:50-11:20 I. Koyano (IMS) "On the Heat of Formation and Structure of  $\text{C}_3\text{H}_3^+$  Ions"  
T. Ohshima Presiding

11:20-11:50 H. Yanagawa (M-K Inst. Life Sci.) "Formation of Polypeptides in the Possible Primitive Earth Environments"

コンファレンスの1日目は、星間分子の宇宙電波分光および実験室での分光について議論がおこなわれた。

A. Hjalmarson 氏は、星間空間の天体諸階層での物理現象と分子の関わり合いを概説し、分子のスペクトル線をプローブとして星間空間を見ると、それら天体諸階層の構造やそこでの物理現象に関する知見が得られることを詳しく論じた。さらに、新しい星間分子を電波望遠鏡で観測する場合の詳細を  $\text{C}_3\text{H}$  の場合を例として紹介し、今まで発見されている70種以上の星間分子につ

いて、どんな種類の分子が、どんな場所に、どんな濃度で存在するかを、主として星間分子の探査の立場から詳しく検討した。

海部宣男氏は東京天文台の45m大型電波望遠鏡のその後の改良と性能の向上を報告したうえで、40GHz帯の分子線サーベイの成果およびオリオンA、KL天体、星生成領域での双極分子流および回転ガス円盤の観測結果、さらにこれらの天体现象と分子との関わり合いを議論した。

大石雅寿氏はやはりオリオンA、KL天体の星生成領域について観測したいいろいろな分子種のいろいろなスペクトル線について、それらのドップラー速度、線幅、回転温度を細かく検討すれば、星生成中心部、分子流部、ガス円盤など領域に従って、そこに存在する分子種やそれらの間の相対量も異なり、それぞれの特徴的な物理状態に対応して化学が存在していることを明らかにした。

水野亮氏は、名古屋大学の4mミリ波望遠鏡を用い、COや<sup>13</sup>COのJ=1→0遷移を利用しておこなった広域サーベイの結果発見した7個の双極分子流天体の詳細について報告し、これら天体の物理的諸特性を明らかにすると共に、巨大分子雲におけるこれらの天体の役割について論じた。

竹尾陽敏氏は、熱分解法による不安定分子の生成法を論じた後、最近、実験室において観測するのに成功したCーシアノメタイミニン（HCN二量体）のマイクロ波スペクトルの分光結果とこの分子の星間分子としての可能性について検討した。

広田栄治氏は、実験室における短寿命分子の高分解能赤外分光法の実際を紹介するとともに、最近の成果としてCH<sub>3</sub>、BH<sub>3</sub>、SiH<sub>3</sub>、CO<sub>2</sub><sup>+</sup>、BO<sub>2</sub>などのフリーラジカルや分子イオンのスペクトルやそれらの解析結果を報告した。

斎藤修二は、東京天文台45m大型電波望遠鏡により観測された強い未同定線U45.379に対応する実験室での吸収線の観測とその同定を述べ、U45.379がH(C≡C)<sub>2</sub>CH、V<sub>11</sub>=1状態のJ=17←16、ℓ<sup>+</sup>成分である可能性を論じた。

2日目は、ライデン大学天体物理教授のグリーンバーグ博士による講演で始まった。博士は星間塵の権威で、古くから塵が有機物を含む水を主体とする氷で、その中にケイ素質の核があるモデルを提案しており、この塵が集まって彗星ができることが今回の探査機ジョットによる観測で実証された。星間塵に含まれる分子がどの温度で凝縮したかは未解決の問題であるが、博士はBiermannらの15K以下という説を支持し、この氷の中に含まれる物質が宇宙元素比に対応した酸素：炭素：窒素の比、即ち6:3:1の組成をもち、これらの分子の多くが塵の上で生成したとの最近の仕事に関する報告を行なった。また、地球上に現在ある生物総質量の十分の一に相当する有機物を彗星が含んでおり、地球生成後の度量なる彗星の衝突によって地球上の有機物原料がもたらされたのではないかとの考えを示した。

山本哲生氏（宇宙研）は、非平衡的凝縮モデルによる彗星氷の生成を論じ、原始太陽系星雲から原料の塵が生じ、その凝縮温度は星間空間より高いと主張し、彗星における一酸化炭素と水の比は0.2以下であるとした。又、太陽接近時の水分子の昇華と再凝縮機構、更にS<sub>2</sub>分子の放出機構を論じた。

西信之（分子研）は、低温での分子の凝縮に温度依存性が高く、最初に水を主体とする氷が不純物を取り込みながら凝縮してゆき、ここに取り込まれない分子は更に低温で氷の層とは分離して凝縮することをクラスター実験から示した。また、このようにして生成した不均一な氷の表面での光化学反応のモデル実験の結果から、表面では分子の縮合反応が繰返され、水素は、生成物としての水素分子やメタンといった揮発性化合物、あるいは直接光解離によって脱離してゆき、HCN重合体、あるいは炭素質不飽和ポリマーが生成してゆく可能性を示した。

続いて清水幹雄氏（宇宙研）は、宇宙研のハレー彗星探査機、「Suisei」によるハレーからのライマンーアルファ発光プロフィールの観測結果を報告した。特に、この発光が広い空間にわたって不均一にみられることから、彗星の核の表面から昇華してでてきたガス状の水の解離によるモデルだけでは水素原子の生成は説明されず、彗星から放出された塵の中の有機物が紫外線によって分解され、水素原子を放出しているのではないかとの考えを示した。

2日目の午後から3日目にかけては、星間分子生成のイオン-分子反応モデルとそれにまつわる諸問題を中心としたセッションがもたれた。冒頭はイギリスからの招待者David Smith氏の総合講演であった。同氏は、まず星間分子の特色を密度の薄い雲と濃い雲とに分けて述べ、ついでそれぞれの領域における分子生成のスキームを明解に整理して提示した。濃い雲においては、HC<sub>n</sub>N (n=3, 5, 7,...) と C<sub>3</sub>H<sub>2</sub> の生成の問題がとくにとり上げられた。後者は最近同定された環状カルベン（シクロプロペニリデン）であり、星間空間に見い出された最初の環状炭化水素であるため多くの科学者の関心を集めている。同氏によると、これら両分子の生成のかなめにあるのは放射性結合反応 (radiative association) とよばれる一群の反応である。例えば、C<sub>3</sub>H<sub>2</sub> の前駆体は C<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup> であると考えられるが、これは放射性結合反応 C<sub>3</sub>H<sup>+</sup> + H<sub>2</sub> → C<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup> + hν によってできる。これら一群の反応は実験室ではまだほとんど研究されていないが、3体結合反応 A<sup>+</sup> + B + M → A B<sup>+</sup> + M の速度からその速度を見積ることができる。Smith氏らは多数の3体結合反応についての自らの測定結果に基いて上記のスキームを打ち出した。とくにとり上げられたもう一つのトピックスは同位体分子の存在比とその濃縮機構の問題であった。ここでも同氏らの実験結果に基いた議論が展開された。さらに、彗星大気の分子組成とその生成スキームが論じられた。

ついで、坂田朗氏（電通大）は晩期型の星の周囲に存在する塵が放つ赤外線の問題を論じた。同氏らの実験結果に基いて、7.7及び8.6 μm の U-line の担い手は部分的に酸化された交差共役

縮合多環炭化水素であると結論した。

鈴木博子氏（東大東京天文台）は、まず同天文台野辺山宇宙電波観測所の45m電波望遠鏡によるサーベイの結果を2～3報告し、ついで従来の星間分子生成モデルの問題点を論じた。モデルをたてるに当っては、各雲の物理的条件を考慮に入れることが重要であることを、内部条件、外部条件及び歴史的条件にわけて指摘した。

山崎秀郎氏（東工大）は、星間分子の生成モデル中に用いられる個々の反応の速度定数の変化がシミュレーションの結果にどのように影響するかについて報告した。速度定数を順次一つずつ10%だけ変化させて10<sup>7</sup>年後の生成量の変化をみた結果、ある分子の生成量に2オーダーもの変動を与える反応があることなどがわかった。

3日目はNigel Adams氏の講演で始まった。同氏は星間分子の生成に重要なイオン-分子反応速度定数の実験室的測定を中心に述べた。星間空間で重要な反応は特殊なものが多く、かつ、（極）低温という特殊条件下での速度定数が要求される。室温付近で得られた温度依存性を単純に（極）低温に外挿するのは極めて危険であることを多くの実例から指摘し、ついで（極）低温におけるイオン-分子反応の研究手法を概観した。とくに、同氏らの開発したVT-SIFT（温度可変イオン入射型フロー管）及びVT-SIFDT（同フロードリフト管）法とそれによって得られた結果について詳しく論じた。星間分子の生成に重要なもう一つの過程であるイオンと電子の解離性結合反応についても詳論した。

つづいて崎本一博氏（宇宙研）はイオン-分子反応の理論的側面、とくに、速度定数に及ぼす長距離力の影響について論じた。高柳和夫氏（宇宙研）によってはじめて導入され同氏らのグループで発展させられてきたPRS(perturbed rotational state)法とそれによる極性分子系についての計算結果が中心に論じられ、便利なスケール則が提示された。

小谷野猪之助（分子研）はC<sub>3</sub>H<sub>2</sub>の前駆体と考えられるC<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup>の構造と生成熱の問題について述べた。C<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup>の関与する多くの2分子反応から、一般に受け入れられているシクロプロペニルイオンの生成熱よりずっと低い生成熱をもつC<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup>が存在する証拠が得られることを指摘した。

最後の講演は、これまでの天文物理あるいは天文学の話から、地球上の進化の話に飛んだ。三菱化成生命科学研究所の柳川弘志氏は、グリシン、アラニン、アスパキギン酸、バリンの4種のアミノ酸が初期の進化に重要な役割を果したとの考えを示し、カルシウムイオンを含む擬似海水中での高温高圧反応によって、ペプチド生成が効率よく進行し、球状物質に生長すると報告した。このような考え方は、原始海洋に落下した彗星によって有機物が運ばれ、それが、海洋の火山活動によって高温高圧状態の条件下にさらされ、これによって細胞状物質が生成したというシナリオによっている。

3日間の議論は、観測から、実験、更に生命の起源への展開と、多くの内容を含んでいたが、この分野のかつてない進歩の状況を明らかにした。天文学者、物理学者、そして化学者が一同に会し、同じテーマを前に語りあえた事は、この学問が学際的な新しい、しかも重要な分野に育ちつつあることを明らかにしたのではないだろうか。

## AFTER DINNER TALK

### From Molecules to Dust in the Interstellar Medium

S. Hayakawa

— Given at Okazaki Conference on 26 June 1986 —

The extinction of light from distant stars has been attributed to small dust grains in the interstellar space. If grains grow by accretion from a gas, small grains of nanometer size or large molecules may be copiously left in the interstellar gas. Accordingly Platt (1956) suggested that such small dust grains — called Platt particles — could be responsible for the interstellar extinction. He demonstrated that the absorption of radiation should be strong at a wavelength of about 400 times the grain size, and that the extinction of visible light could be caused by nanometer grains, each consisting of about  $10^3$  atoms.

Although the idea of Platt was found attractive in several respects, such as the need of a smaller amount of matter required for extinction, this has been gradually forgotten because of the success of the submicron dust model theoretically developed by van de Hulst (1957) and in accounting for astronomical phenomena as extensively reviewed, for example, by Greenberg (1968). It was also pointed out by Hollenbach and Salpeter (1971) that hydrogen molecules should be formed on the grain surface.

Recently however, the idea of small grains has revived. This has arisen from the study of reflection nebulae by Sellgren (1984). The near infrared spectrum independent of the distance from the illuminating star suggests the emission from small dust grains heated to about 1000K by single photon absorption. Since the energy absorbed is given to a small number of atoms, about  $10^2$ , the temperature can be raised to  $10^3$  K and decreases by radiation cooling. Such a temperature fluctuation of small dust grains was discussed by Greenberg (1968) and others, but little attention has seriously been paid to the role of small dust grains. Sellgren has further argued that the emission fea-

tures at 3.3 and 3.4  $\mu\text{m}$  can also be explained by hot dust grains.

It has been known that there are unidentified features at 3.3, 3.4, 6.2, 7.7, 8.6 and 11.3  $\mu\text{m}$  in circumstellar shells and diffuse nebulae. Leger and Puget (1984) have demonstrated that these features can be identified with vibrational modes of polycyclic aromatic compounds such as coronene which are formed by binding hydrogen atoms to planar graphite particles. The peak temperature of about 1000 K is attainable if the compound contains about 50 carbon atoms. Such compounds which contain only a few per cents of total carbon can explain the band intensity of about 10% of the total infrared intensity.

If the number density of small grains is comparable to or somewhat larger than that expected from the  $a^{-3.5}$  distribution for normal dust grains, the emission from small grains gives a substantial contribution to the galactic radiation in the range around 10  $\mu\text{m}$ , as demonstrated by Pudet et al. (1985) and by Draine and Anderson (1985). This would result in a detectable flux at 12  $\mu\text{m}$  from the cirrus clouds discovered at 100  $\mu\text{m}$  by IRAS. The infrared spectrum calculated by Pajot et al. (1986) shows a bimodal behavior characterized by two peaks at about 10  $\mu\text{m}$  and 100  $\mu\text{m}$  due respectively to hot, small and cold, normal grains.

The existence of very small grains has an important bearing on the interpretation of those observational results obtained by the Nagoya group, which would otherwise be hardly understandable.

With a balloon-born telescope launched in Australia, we observed the southern sky at 2.4  $\mu\text{m}$  and 3.4  $\mu\text{m}$ . The surface brightness at 2.4  $\mu\text{m}$  is generally stronger than that at 3.4  $\mu\text{m}$ , since stars are mainly responsible for infrared emission in this wavelength range. When the telescope crossed an HII region NGC6357/W22, however, we noticed a stronger emission at 3.4  $\mu\text{m}$  than at 2.4  $\mu\text{m}$ . Moreover, the emission region is extended as widely ( $\sim 0.5^\circ$ ) as that of radio continuum, and the spectrum of the extended emission is similar to that of a narrow ( $\sim 5''$ ) region containing an illuminating star. The situation is analogous to that observed for reflection nebulae by Sellgren. Hence the near infrared continuum can be explained by small grains heated to about 500 K by the absorption of a single UV photons.

With rocket-borne photometers launched from Kagoshima Space Center, we observed the diffuse component of near infrared radiation. The radiation observed arises from a number of origins, zodiacal emission, galactic emission and possibly extragalactic emission. In the 5  $\mu\text{m}$  band the galactic emission is dominant, as demonstrated by the cosec  $b$  dependence on the galactic latitude  $b$ . The surface brightness in the galactic pole direction is about  $5 \times 10^{-12} \text{ W cm}^{-2} \mu\text{m}^{-1} \text{ sr}^{-1}$  which is about 20 times less than that estimated by Cox et al. (1986) for the galactic plane as due to the

emission from hot, small dust grains. The difference is roughly consistent with the scale height of 250 pc assumed for explaining the infrared surface brightness distribution of the Galaxy.

The above two observational results provide further support to the small grain hypothesis and means for the study of this new component. Namely, the small dust grains exist commonly in the interstellar medium together with gas and normal dust.

Finally, I mention how the small dust grains are formed. Since the size distribution roughly follows that for normal grains, there may be a mechanism common to the formation of whole dust. The formation of dust grains is observationally demonstrated in the stellar wind of cool stars and in shock waves triggered by supernovae. In the former case a rapid cooling associated with the adiabatic expansion of the stellar atmosphere can form condensations. Since the saturated vapor pressure increases as the grain size decreases, the optimum grain size is determined by the competition between the expansion and accretion rates. The size distribution depends on the time dependence of monomer pressure and accretion.

If grains formed are mostly of normal sizes, these grains may be destroyed by radiation, cosmic rays and grain-grain collisions. Perhaps the last process is most effective to break up normal grains in small pieces. The time scale of grain-grain collisions is short enough, when dense clouds are shocked because of compression and turbulence. Graphite grains are ablated to become mono-layer pieces on which hydrogen atoms are bound to form hydrocarbon compounds.

These processes have not been worked out yet in a satisfactory way. It will be a challenge to surface chemists to solve these astrophysical problems.

#### References

- Drain, B. T. and Anderson, N. 1985, Ap. J. **292**, 494.  
Greenberg, M. J. 1968, in Stars and Stellar Systems, Vol. 7, p. 221. Hollenbach, D. J. and Salpeter, E. E. 1971, Ap. J. **163**, 155.  
Hollenbach, D. J., Werner, M. W., and Salpeter, E. E. 1971, Ap. J. **163**, 165.  
Leger, A. and Puget, J. L. 1984, A and Ap. **137**, L5.  
Pajot, F., Boisse P., Gispert, R., Lamarre, J. M., Puget, J. L., and Serra, G. 1986, preprint.  
Platt, J. R. 1956, Ap. J. **123**, 486.  
Puget, J. L., Leger, A., and Boulanger, G. 1985, A. and Ap. **142**, L9.  
Sellgren, K. 1984, Ap. J. **277**, 623.  
van de Hulst, H. C. 1957, Light Scattering by Small Particles.



# 国際協力事業報告

## 第2回日韓分子科学シンポジウム

分子研 諸 熊 奎 治

分子研では、昭和59年度から韓国の KAIST (Korea Advanced Institute of Science and Technology)との間で、分子科学における日韓研究協力を進めている。その一つとして韓国の大学や研究所の若手研究者を分子研に招へいして共同研究を行うプログラムがあり、59年度には4名がそれぞれ約3ヶ月ずつ、60年度には3名がそれぞれ約4ヶ月ずつ来所し、共同研究を行った。協力のもう一つの中心として共同シンポジウムがある。第1回目は日韓理論化学シンポジウムとして、59年5月23日-25日分子研で行われた。参加者は韓国から14名、日本側は分子研所内から10名余、所外15名で、3日間にわたって理論化学についての情報交換や討論が行われた。この共同シンポジウムはこの後2年に1度ずつ、両国で交代に行われることに同意された。

これらの研究協力の成果をうけて、第2回日韓分子科学シンポジウムが、韓国ソウルの KAISTで、本年5月13日から15日の3日間にわたって行われた。前回は理論化学を研究会のテーマにしていたが、今回からは、研究協力の分野をさらに拡充するためにも実験分子科学の各分野の研究者も加え、シンポジウムの名前も分子科学シンポジウムと改めて行われた。

快晴にめぐまれて、1時間半ほどの快適な、予想以外に短かい空の旅を終えて、三々五々集まつた日本側出席者は15名、内訳は分子研より8名、所外が7名、また研究分野は理論関係10名、実験関係5名であった。一方、韓国側の正式出席者は19名、内訳は KAIST より 5 名、Inha 大学 3 名、ソウル国立大学 2 名など全国各地の研究者が集まっていた。

さて、シンポジウムは宿舎にあてられた Ambassador ホテルからマイクロバスで30分余りの KAIST の会議室で行われた。プログラムは次の通りである。

### May 13 (Tuesday)

Chairman Mu Shik Jhon

9:00-10:00 Saburo NAGAKURA (IMS) Magnetic Field Effects upon Dynamical Behavior of Gaseous Molecules

10:00-11:00 Taikyue REE (KAIST) Molecular Theory of Non-Newtonian Flow

11:00-11:30 Hiroki NAKAMURA (IMS) New Semiclassical Theory in Phase Space for Chemical Reactions

11 : 30—13 : 30    Lunch Break

Chairman Kyung-Hoon Jung

13 : 00—13 : 30    Kook Joe SHIN (SNU)    Microscopic Theory of Condensed Phase Chemical Reactions

13 : 30—14 : 00    Yukikazu ITIKAWA (Institute for Space Science)    Collisional Excitation of Rotational-Vibrational Motion in Molecules

14 : 00—14 : 30    Young Soon KIM (Myong-Ji Univ.)    Laser Intensity Effects on Configuration Interactions and Multiphoton Autoionization

14 : 30—15 : 00    Iwao OHMINE (IMS)    A Theoretical Study of Photochemical Reaction Dynamics in Solution

15 : 00—15 : 30    Coffee Break

15 : 30—16 : 00    Hosung SUN (Pusan Nat. Univ.)    Quantum Mechanical Inelastic Non-Reactive Scattering

16 : 00—16 : 30    Ichiro HANAZAKI (IMS)    Vibrational Photodissociation of Van Der Waals Molecules

16 : 30—17 : 00    Yoo Hang KIM (Inha Univ.)    Vibrational Relaxation of Hydrogen Fluorides

17 : 00—17 : 30    Sung Dahm OH (Sook Myung Women's Univ.)    Proof that Allowed Dipole Matrix Elements never Vanish

17 : 30—18 : 00    Yoon Sup LEE (KAIST)    Relativistic SCF Calculations for Atoms and Molecules ; Basis Set Selection ; Koopmans Theorem and the Correct Non-Relativistic Limit

18 : 00—18 : 30    Sunhee CHOI (Colgate-Palmolive Co.)    Resonance Raman Studies of Heme Complexes and Proteins

18 : 30—20 : 00    Reception

### **May 14 (Wednesday)**

Chairman Yoon Sup Lee

9 : 00—10 : 00    Teijiro YONEZAWA (Kyoto Univ.)    Some Recent Studies in Quantum Inorganic Chemistry

10 : 00—10 : 30    Ikchoon LEE (Inha Univ.)    MO Theoretical Studies on the Gas Phase Reaction of Alkanol-Alkoxide Negative Ions with Alkanol and Alkoxy silane

10 : 30—11 : 00    Kyoung Tai NO (Soong Jun Univ.)    Mechanism of Dealumination in A-Type Zeolite

11 : 00—11 : 30 Bon-Su LEE (Inha Univ.) Transition State Determination by Conjugate Reaction Coordinate Method

11 : 30—13 : 00 Lunch Break

Chairman Ikchoon Lee

13 : 00—13 : 30 Shi Choon KIM (Han Yan Univ.) Theoretical Studies of Pyrolysis for Carboxylic Acid Esters Containing Oxygen and Sulfur as Heteroatoms

13 : 30—14 : 00 Hiroshi KASHIWAGI (IMS) Ab initio MO Studies on Fe-Porphyrins and the Supercomputer System of the Institute for Molecular Science

14 : 00—14 : 30 Mu-Yong CHOI (KIT) Magnetic Field Induced Transitions in (TMTSF)<sub>2</sub>ClO<sub>4</sub>

14 : 30— Sightseeing

#### May 15 (Thursday)

Chairman Bon-Su Lee

9 : 00—10 : 00 Keiji MOROKUMA (IMS) Chemical Reactions and Potential Energy Surfaces

10 : 00—10 : 30 Yosuke KATAOKA (Kyoto Univ.) Computer Experiments of Concentration Fluctuations and Mutual Diffusion Coefficient in a 2D Aqueous Solution

10 : 30—11 : 00 Jong-Jean KIM (KAIST) Light Scattering from Simple Fluid Shear Flow-Molecular Dynamics Simulation

11 : 00—11 : 30 Suehiro IWATA (Keio Univ.) Some Application of Quantum Chemical Calculations

11 : 30—12 : 00 Mu Shik JHON (KAIST) Something You don't Know about Recent Water Structures

12 : 00—13 : 00 Lunch Break

Chairman Jong-Jean Kim

13 : 00—13 : 30 Keiichiro NASU (IMS) BCS Pairing versus Bi-Polaron Crystallization in Two Dimensional Strongly Coupled Electron-Phonon System-From Adiabatic Limit to Inverse Adiabatic Limit

13 : 30—14 : 00 Dong Jae LEE (National Fisheries Univ. of Pusan) On the Multiple Scattering for a Fluid Composed of Chiral Molecules

14 : 00—14 : 30 Hiroshi TSUBOMURA (Osaka Univ.) Semiconductor Photoelectrochemistry for Solar Energy Conversion

- 14:30-15:00 Sangwoon AHN (Jeong Buk Univ.) The NMR Chemical Shift for a 5d' System in a Crystal Field Environment of Octahedral Symmetry
- 15:00-15:30 Coffee Break
- 15:30-16:00 Eizi HIROTA (IMS) High Resolution Spectroscopy of Transient Molecules and Molecular Ions
- 16:00-16:30 Jihwa LEE (Seoul Nat. Univ.) Metastable Quenching Spectroscopy as a New Surface Electron Spectroscopy; Principle and Application
- 16:30-17:00 Soji TSUCHIYA (Tokyo Univ.) Intramolecular Processes in Rovibrationally Excited Small Polyatomic Molecules as Studied by LIF and Zeeman Quantum Beat Spectroscopy
- 17:00-17:30 Kyung-Hoon JUNG (KAIST) Collisional Energy Transfer in Two-Channel Thermal Unimolecular Reaction
- 17:30-18:00 Takayuki FUENO (Osaka Univ.) Reaction Paths and Routes of Singlet and Triplet Diradicals in the Gas Phase

会議第1日目は、韓国側世話人代表Mushik Jhon KAIST教授のあいさつの後、長倉分子研究所長が溶液中の光化学反応や気相反応の動的挙動における磁場効果について講演した。次いで、第1回会議には直前の御怪我のため出席されなかったTaikyue Ree KAIST教授が、86才とは思えないダイナミックな講演を非ニュートン流の分子理論について行われ、参加者全員を感動させた。次いで、衝突動力学過程の理論、溶液中の化学反応の理論、光化学素過程、共鳴ラマン分光、相対論的電子状態理論などについての講演が行われた。

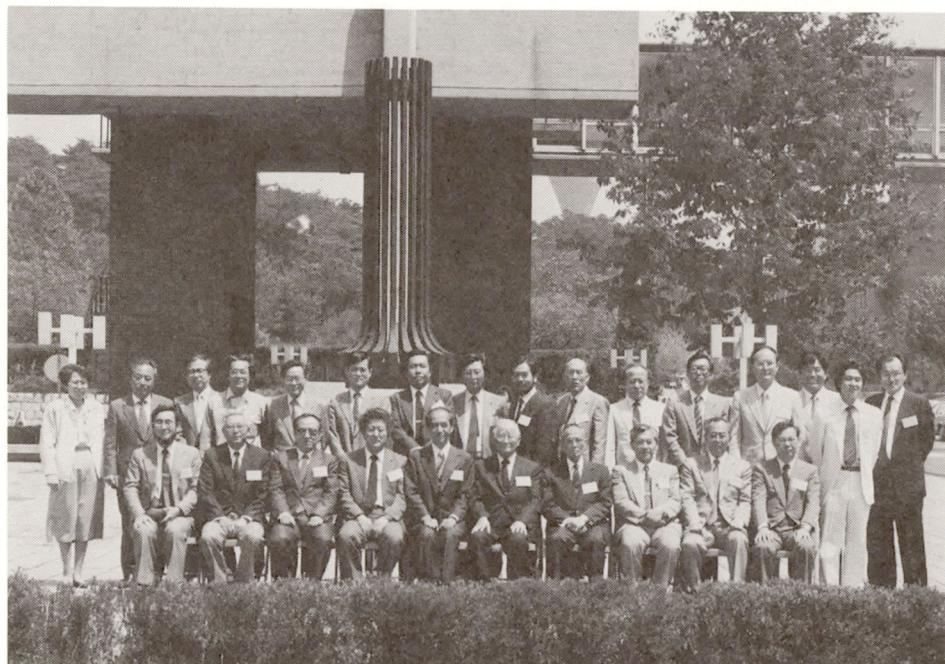
午後6時からのレセプションはAmbassadorホテルで行われ、Mushik Jhon教授、前KAIST総長で現科学技術大臣のHakze Chon氏、Inha大学総長で前韓国化学会長のTaiWon Park氏から歓迎の辞があり、日韓両国が研究協力を行うことの重要さが強調された。日本側からは長倉分子研究所長、米沢京大教授のあいさつがあり、分子科学における研究協力を強めて行きたいむね述べられた。次いで、Taikyue Ree教授の発声で乾杯があり、参加者一同歓談に花が咲いた。

第2日は米沢教授の量子無機化学の講演ではじまり、化学反応機構、金属錯体、低次元有機伝導体などの理論を中心に講演が行われた。お互いに雰囲気になれてきたのか、質問も沢山でて、活発な討論となった。午後はソウル市内の「秘園」といわれる名園を案内してもらい、また、市内の見物や散策をたのしんだ。第3日は、前日にひきつづき、化学反応理論、溶液や液体の理論、電子状態理論、低次元有機伝導体の理論、光エネルギー変換、分子の高分解能分光、エネルギー移動や化学反応動力学などについて午後6時まで講演と討論が行われた。最後に、第3日午後帰国の必要があった長倉分子研究所長の意をうけて、米沢教授から第3回共同シンポジウムは1988年

分子研で行われる予定であるむねの発表があって、3日間にわたるシンポジウムの幕を閉じた。この後には、いくつかのグループにわかれ、Inha 大学などの招待で韓国料理を満喫した。

今回のシンポジウムは、第1回のシンポジウムおよび過去2年間にわたる若手研究者受入（本シンポジウムの韓国側出席者のうちに、受入研究者4名が含まれていた）の実績をふまえ、従来から交流の深かった電子状態理論などの分野については、共同研究などさらに密度の高い研究協力を進める足がかりとし、さらに従来比較的交流の少なかった研究分野については、両国の研究者同志がはじめて顔を合わせて討論することで、お互いを知るようになったことに大きな意義があったといえよう。特に、韓国では比較的少なかったとされる、物理と化学とその境界領域の研究者が一堂に集まって討論する機会があったことは、日本語とハングルという言葉のちがいとともに、物理と化学の言葉のちがいをのりこえて、分子科学の進歩のために大きな寄与をすると期待される。両国とも参加者の約半数は今回がはじめてのシンポジウム参加であった。また、日本側出席者の2/3以上は、韓国ははじめてという方々であった。「今回のシンポジウム参加によって、韓国と日本が地理的にも文化的にもお互いに非常に近いということを、はじめて身をもって感じました。今後とも日韓研究協力に出来る限りの寄与をしたいと思います。」という、出席者の声をお伝えしておきたい。

今後も、若手研究者受入と共同シンポジウムを通して、両国の分子科学研究者の協力が一層幅広く、密になることを大いに期待している。



## 研究会報告

### 第7回 UVSOR研究会

分子研 井 口 洋 夫  
渡 辺 誠

極端紫外光実験施設では、毎年1回 UVSOR研究会を開催してきた。はじめの頃は施設全体に関する提案、光源及び観測システムの設計等が中心テーマであったが、建設が進むにつれて、建設の報告および完成後に行う実験の議論が行なわれた。今回からは UVSORを用いた実験研究の成果発表と討論が中心テーマである。実験が行なわれた8本のビームラインから最新の成果が報告され、活発に議論が行なわれた。その中で今後の研究の動向をつかむということで4つの招待講演をお願いした。参加者は所内、所外合せて約60名であった。第1日は飛入りで折しも在日中であった米国 SSRL の副所長の H. Winick 氏も聴衆の一人として参加した。プログラムは以下の通りである。また UVSORの最近の写真を掲載する。なお、これらの内容の一部は、UVSORのActivity Reportとして発刊しているので、詳細はそれらを参照していただきたい。

#### 第7回 UVSOR研究会プログラム（昭和60年12月3，4日）

12月3日

13：30—13：35	挨拶	井口 洋夫（分子研）
13：35—14：05	光源の現状	春日 俊夫（分子研）
14：05—14：25	観測システムの現状	渡辺 誠（分子研）
14：25—14：40	遠赤外線ビームライン(BL6A1)の現状	難波 孝夫（東北理大）
14：40—14：55	大きな格子定数をもつ物質による散乱及び回折	森 昌弘（阪大教養）
14：55—15：15	シンクロトロン放射光リソグラフィによる軟X線光学素子の製作	有留 宏明（阪大基礎工）
15：15—15：35	SOR 真空リングラフィ（II）	山田 人己（名大工）
15：35—16：05	休憩	
16：05—16：25	気相沃素分子の光化学	平谷 篤也（分子研）

- 16:25-16:45  $\text{CCl}_3\text{X}$  ( $\text{X}=\text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ) 及び  $\text{SiCl}_3\text{H}$  の VUV 光励起による蛍光励起スペクトル  
伊吹 紀男 (京大化研)
- 16:45-17:05  $\text{CH}_3\text{SCN}$  及び関連化合物の吸収・発光スペクトル  
徳江 郁雄 (新潟大理)
- 17:05-17:25 気相分子の光イオン化ーコインシデンス実験  
小谷野猪之助 (分子研)
- 17:25-17:45 BL2B2VUV 分子線分光装置の製作と応用  
阿知波洋次 (分子研)
- 18:00-20:00 懇親会

#### 12月 4 日

- 09:00-09:20 カドミウムハライド結晶の反射と発光 中川 英之 (分子研・福井大工)
- 09:20-09:40 斜方晶 In ハライド結晶の反射スペクトル 中村 快三 (分子研・京大理)
- 09:40-10:00 希土類化合物の  $\text{N}_{4.5}$  吸収スペクトル 会田 修 (大阪府大工)
- 10:00-10:20 軟X線用二結晶分光器の性能評価 村田 隆紀 (京都教育大)
- 10:20-10:45 ダースベリ研究所における軟X線ビームポート 松川 徳雄 (阪大教養)
- 10:45-11:15 休憩
- 11:15-11:40 VUV 領域における時間分解スペクトル 三谷 忠興 (分子研)
- 11:40-12:00 UVSOR を用いた蛍光寿命測定 岡田 正 (阪大基礎工)
- 12:00-13:20 昼食, 見学
- 13:20-13:40 アルカリハライドからのイオン脱離 安江 常夫 (名大工)
- 13:40-14:00 SR 励起による価電子帯軟X線スペクトルの観測 谷口 一雄 (大阪電通大)
- 14:00-14:30 スピン偏極光電子分光 宮原 恒昱 (高工研)
- 14:30-15:00 UVSOR を用いたプラズマ測定機器の較正 水井 順一 (名大プラ研)
- 15:00-15:30 休憩
- 15:30-16:00 超微粒子・クラスターの微視的構造と SOR 菅野 晓 (東大物性研)
- 16:00-16:30 EXAFS 分光法による触媒作用のダイナミックスの研究 岩沢 康裕 (東大理)
- 16:30-17:15 UVSOR の今後の課題 (自由討論)
- 17:15-17:20 まとめ



分子研 UVSOR 施設

## New Aspects of Electron Spectroscopy

—— K. Siegbahn 教授を迎えて ——

分子研 木 村 克 美

本研究会は3月7日に行われ、ESCAで著名なK. Siegbahn教授（1981年ノーベル物理学賞受賞）の来所を機会に開催されたHalf-Day Symposiumであった。Siegbahn教授の来日が急にきまつたため、十分前もって準備された研究会ではなかったが、この機会に国内の電子分光関係者のうち当日都合のつく方々に集まっていただいて、有意義なミニ研究会をもつことができた。

本研究会は、Siegbahn教授の講演を中心に、8名の国内の電子分光関係の研究者のShort talkからなる次のプログラムで行われた。

**March 7 (Friday), 1986**

13:30 Opening Address S. Nagakura (IMS)

13:40 Plenary Lecture K. Siegbahn (Univ. Uppsala) "New Aspects of Electron Spectroscopy"

15:00-17:30 Short Talks (10 minutes each) and Comments

K. Kimura (IMS) "Excited-State Photoelectron Spectroscopy"

Y. Murata (Inst. for Solid State Phys., Tokyo Univ.) "Alkali Metal Adsorption on Silicon"

K. Onchi (Dept. of Chem., Kyoto Univ.) "Chemisorbed States (HREELS, LEED, AES)"

T. Sagawa (Dept. of Phys., Tohoku Univ.) "Angle Resolved UPS"

T. Ishii (Inst. for Solid State Phys., Tokyo Univ.) "Photoemission of Cu Halides"

N. Kosugi (Dept. of Chem., Tokyo Univ.) "Shake-Down Phenomena in XANES"

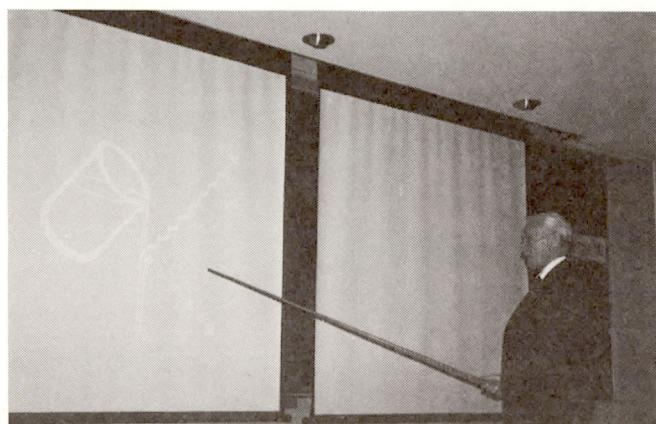
M. Owari (Inst. of Indust. Sci., Tokyo Univ.) "X-Ray Photoelectron Differaction"

I. Watanabe (Dept. of Chem., Osaka Univ.) "Photoelectron Spectroscopy in Solution"

Siegbahn 教授は最近の X 線光電子分光の進展について、ウプサラ大学物理学研究所の成果を中心にわかりやすく紹介し、参加者に感銘を与えた。同教授の来日は初めてであり、わが国の電子分光の研究者との交流が多少とも実現したことは、今回の研究会の大きな収穫であった。

同教授は現在新しい高分解能光電子分光装置を製作中とのことで、紫外レーザーによる多光子イオン化の光電子分光に意欲をもっているようであり、わが国との今後の交流をとくに望んでおられた。

今回の研究会は通常の分子研研究会に比べてかなり小規模であったが、わが国とスウェーデンとのこの分野の交流の出発点になったという点で有意義であった。



Siegbahn 教授の講演

# 準安定励起原子分子の 生成とその動的挙動

東大理 朽 津 耕 三

準安定励起原子分子の生成や反応に関して、反応生成物の散乱角依存性や衝突エネルギー依存性をビーム実験で調べ、反応の詳細を明らかにしようとする試みが次第に増えてきている。一方、従来から行なわれているフロー法では、熱エネルギー領域の衝突により生成する解離励起発光種のスペクトルを比較的高い分解能で測定できる。これは前述のビーム実験と相補的な情報を与える。しかし、国内においてさえ、この二つの分野の相互作用は必ずしも大きいとは言えない。そこで、両分野の研究者で上記研究会を下記のプログラムで、3月24日に開催した。

北川 穎三（分子研）「あいさつ」

中村 宏樹（分子研）「各種状態遷移における同形性」

篠原 久典（分子研）「新しい水クラスターイオンの安定性」

上原 博通（城西大理）「Se を含むフリーラジカルの LMR とヒートパイプによる OCSe の合成」

羽根 一博（名大工）「希ガスー金属原子系におけるペニングイオン化過程」

辻 正治（九大生研）「放電フロー法による非フランク・コンドン的イオン化反応の研究」

鈴木 薫（東大理）「準安定励起希ガス原子と簡単な分子との反応」

北 重公（東北大科研）「起音速準安定原子ビームの生成」

笠井 俊夫（阪大理）「準安定アルゴン原子ビームのパルス化と化学発光反応への応用」

田林 清彦（分子研）「希ガス準安定励起種衝突における水、アンモニアの励起解離過程」

M. J. J. Vrakking（分子研）「準安定クリプトンビームと臭素化合物による KrBr エキシマー生成」

朽津 耕三（東大理）「まとめ」

以下に講演の要点を述べる。

中村は、異なるように見える種々の状態遷移も見方によっては類似性があることを指摘した。特に、非断熱遷移としての同形性について、原子の二電子励起状態への遷移と化学反応における振動遷移との対応について述べた。篠原は、水とアルゴンや CO<sub>2</sub> との混合クラスターを光イオン化することにより、純粋な水クラスターイオン、(H<sub>2</sub>O)<sup>+</sup><sub>n</sub> を観測した。この (H<sub>2</sub>O)<sup>+</sup><sub>n</sub> は水クラス

ターのイオン化や、 $H_2O^+$ の free jet expansion などでは観測されない。混合クラスターの場合は余剰エネルギーを Ar または  $CO_2$  の運動エネルギーとして消費するために、 $(H_2O)_n^+$  が安定に検出されると理解できる。上原は、N 原子と  $Se_2Cl_2$  との反応で生成する NSe ラジカルのレーザー磁気共鳴スペクトルについて報告した。また、Se を含むラジカルの原料となる OCSe をヒートパイプを用いて合成する方法を紹介した。

羽根は、金属蒸気レーザーの発振機構に関する報告した。特に、He/Cd 系での詳細が述べられ、 $Cd^+$  の基底状態の生成断面積が大きいこと、レーザー発振に関与する準位では、レーザー発振の上の準位への生成確率が大きいことが確かめられた。辻は、 $He^*$ ,  $Ne^*/HCl$ ,  $HBr$  系で、 $HCl^+(A)$ ,  $HBr^+(A)$  の振動分布を調べた。従来から、ペニンゲイオン化がフランク・コンドン的かどうか議論されていたが、今回  $He^*/HCl$  系ではフランク・コンドン的、 $Ne^*/HCl$  系では非フランク・コンドン的であると結論された。鈴木の講演では、 $Ar^m/BrCN \rightarrow CN^*$  を例にして、希ガス励起種に特徴的な反応について述べられ、 $CN^*$  の摂動線の強度、および、その圧力依存性から通常観測されない電子状態の分光およびダイナミックスに関する情報が得られることが示された。また、ノッティンガム大学のローター加速ビーム装置が紹介された。

北は、希ガス準安定励起原子ビーム源の製作について講演した。ビームの速度分解能には特に注意を払った。ビームのパルス化では準安定励起原子ビームのパルス幅や特性は、基底状態のものと類似していることが示された。笠井はパルス希ガス準安定励起原子ビームを  $CF_3H$  の解離励起反応に応用した例を話した。準安定原子ビームの時間プロファイルについての問題が議論され、ビーム内の衝突による減衰がきいていることが示された。田林は、アーク加熱準安定励起原子ビーム装置を用いた水、アンモニアの解離励起過程の研究を報告した。特に、アンモニアでは、反応のスピン保存則に反する状態の生成断面積がスピン許容状態のものと同程度であることが示された。また、断面積の衝突エネルギー依存性は、水、アンモニアの場合とも、 $Ar^*$  では負、 $Kr^*$  では正であることが報告された。これは、準位の相関図を用いて説明された。Vrakking から  $Kr^*$  と臭化物との反応で生成する  $KrBr^*$  エキシマーからの発光に関する報告があった。

参加者数の限られたミニ研究会ではあったが、ビーム実験とフロー実験の最近の話題を提供しあうことによって、両分野の相互作用を強めるという、初めに意図した目的は、ある程度達せられたと考えられる。また、来日中のカリフォルニア大学（バークレー分校）の Y. T. Lee 教授に参加していただき、有益なコメントを得ることができたのは幸運であった。

研究会前日は、あいにく関東地方が時ならぬ大雪に見舞われ、分子研に苦労して到着した参加者もいた。また、このことで、北川教授をはじめ分子研の方々には大変お世話になった。ここに感謝の意を表する。

# 分子過程動力学の理論

分子研 中 村 宏 樹

将来の分子科学の発展を考えるとき、さまざまな分子過程の動力学の研究が一層その重要性を増していく事は確かだと思う。それは気相における個々の微視的過程の研究にとどまらず、凝縮系等において周囲の環境の影響を受けながら進行する動的諸過程の研究、更には巨視的スケールでの自己秩序形成過程の問題にまで及ぶ事が必要であろう。それには微視的過程に対する動力学理論と統計力学的手法の合体が不可欠であり、さまざまな分野間の交流と協力が要となる。この意味では、動力学分野、特にその理論の研究者が非常に少ない日本の現実は大変厳しいが悩んでばかりいられないで少しでも出来る事から努力を積み上げていく事が大切であると考え、その活動の一環として本研究会を企画した。

上述の主旨から、従来の研究会とは若干性格の異なったものとし勉強会的色彩を強めた。意図的にかなり広い分野をカバーし分野間交流を深め、また大学院生や実験家にも参加していただき啓蒙的効果と同時に動力学理論の発展とそのあり方に関して幅広い討議の場を持ちたいと考えた。各講演に一時間を割り当てみっちり話していただいたので、話がよく理解出来て大変よかったです。ご批評をいただけたのは大成功であったと思っている。また、討論会にかなりの時間を割き理論に対する実験家や大学院生の卒直な意見を聞きそれに対する理論“屋”の弁解と反論を述べたのも一風変った企画として有意義であった。動力学理論における若手の育成という最も大切な最もむずかしい問題については、勿論簡単に答が得られる訳ではなく、大学化学科におけるカリキュラムの問題等々に関する地道な努力の必要性が改めて認識された。しかし、講演においても討論会においても数少ない若い人達から積極的に質問や意見が述べられたのは大変嬉しい事であった。いささか欲張った企画の研究会ではあったが、今後の活動の意義ある第一歩となったと思っている。昭和61年度科研費総合(A)「動力学の先駆的理論の開発とそれに基づく化学反応諸現象の学際的研究」も認められたので、この分野の一層の新しい発展が期せられる事を祈っている。なお、本研究会の要旨集が若干まだ私の手元に残っている。最後に研究会のプログラムの大略を記しておく。

3月25日（火）

13:10-13:20	主旨説明	中村 宏樹（分子研）
13:20-14:20	A Survey on Atom-Diatom Exchange Collisions	M. Baer（分子研）
14:30-15:30	化学動力学の半古典論	高塚 和夫（分子研）
15:50-16:50	超球座標による化学反応の取扱い	大崎 明彦（分子研）
17:00-18:00	遷移状態理論の発展	梶本 興亞（東大・教養）
	コメント	山下 晃一（分子研）
18:10~	懇親会（分子研職員会館）	

3月26日（水）

9:30-10:30	核反応-化学反応との対比	市村 淳（宇宙研）
10:40-11:40	量子的カオスの問題	北原 和夫（東工大・理）
13:10-14:10	分子内緩和過程に関する理論	加藤 重樹（東大・教養）
14:20-15:20	超励起状態の動力学	高木 秀一（北里大・医）
15:40-16:40	固体表面での電界蒸発	島 信幸（東大・理）
16:50-18:20	討論会	

3月27日（木）

9:30-10:30	非断熱遷移の理論	中村 宏樹（分子研）
10:40-11:40	分子の多光子遷移機構	藤村 勇一（東北大・理）
11:40-11:50	まとめ	

# 共同研究採択一覧

## 昭和61年度共同研究

### 課題研究

#### ◎近赤外部におけるラマン効果によるポリアセチレンの構造の研究

○名大理 田仲二朗 分子研 小林孝嘉 名大理 清水正昭  
分子研 北川禎三 分子研 山崎巖 名大教養 平尾公彦

#### ◎タンパク中の電子移動とプロトン移動

○分子研 北川禎三 阪大産業科学研 二井将光 京大理 前田章夫  
自治医大 曽根勇史 京大医 折井 豊 自治医大 大野宏毅

#### ◎励起化学種の動的挙動に対する磁場効果の研究

○理研 林久治 分子研 桜木宏親 金沢大葉 谷本能文  
神戸大理 加藤肇 分子研 又賀昇 東大教養 務台潔  
分子研 山崎巖 分子研 中垣良一 分子研 今村隆史  
理研 阿部晴雄 奈女大理 岩井薰 阪大基礎工 平田善則

#### ◎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 栄津耕三 分子研 広田栄治 分子研 正畠宏祐  
東大理 近藤保 東大理 鈴木薰 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]

繰り込み摂動法の非経験的分子軌道計算への応用	広島大理	今村證
気相クラスター分子における電荷移動反応の理論的研究	室蘭工大	太田勝久
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
非弾性衝突の準古典近似	東工大理	北原和夫
オレフィンに対するラジカル反応機構の理論的研究	大阪学院大	酒井章吾
強電界中の表面と超微粒子の挙動	東大理	塙田捷
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
分子-電子衝突励起解離過程の解析	九大総合理工研究科	小川禎一郎
擬一次元モデル系の ab-initio HF-MP 計算	阪大基礎工	山口兆

一次元有機強磁性体の理論的研究	金沢工大	三嶋 昭臣
単分子反応の ab initio MO CI 計算	慶應大理工	長村 吉洋
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
変調法による酵素原子反応の中間体分光とその動力学的研究	東大工	幸田清一郎
ミリ波・光二重共鳴による高振動励起状態の研究	東大理学系研究科	松尾由賀利
赤外マイクロ波分光による HBO と FBO の検出	幾徳工大	川嶋 良章
赤外分光法による分子イオンの検出	九大理	田中 桂一
低い内部回転障壁を持つ分子のマイクロ波分光	西南学院大	松村 敬治
ケイ素を含む星間分子のマイクロ波分光	名大理	山本 智
HNO 分子の光・マイクロ波二重共鳴	富山大理	高木光司郎
チトクロム酸化酵素による酸素活性化機構	阪大医学研究科	小倉 尚志
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
シトクロム P-450 電子伝達系フラビン酵素の電荷移動錯体の解析	阪大医	杉山 俊博
偏光変調赤外吸収法を用いた電極表面の研究	慶應大理工	伊藤 正時
自己拡散係数の測定によるミセル間相互作用の研究	都立大理	加藤 直
EXAFS による合金触媒の局所構造の決定	豊橋技大	上野 晃史
有機固体粉末のピコ秒時間分解拡散反射スペクトル	京都工芸繊維大繊維	池田 憲昭
ロドプシンの光化学初期過程の研究	京大理	七田 芳則
メチルビオローゲン誘導型オレフィンの光電荷移動反応	筑波大自然科学類 トーマスエブソン	
レーザーフラッシュ法による気相化学反応の研究	東京造形大	岡村 忠
新規な半導体物質の光触媒作用に関する研究	阪大工	柳田 祥三
多層 LB 膜の光起電力と電子移動	東工大工	藤平 正道
半導体表面における有機化合物の吸着及び反応	明星大理工	上田 豊甫
液体から生成したクラスターの研究Ⅱ	北九州大文	竹之下芳也
グラファイト層間化合物の陽電子消滅	東京学芸大	村上 英興
状態を規定したイオン-分子反応の研究	静岡大教養	尾形 照彦
イオン-分子反応による星間雲分子生成のショミレーション	東工大理	山崎 秀郎

NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> +NH <sub>3</sub> におけるイオン・分子反応の研究	阪大理	友田 真二
多光子イオン化光電子分光法による CCl <sub>2</sub> ラジカルの 電子準位の測定	京大化学研	伊吹 紀男
9.9'-ビアントリルの CT 状態のダイナミックス —その溶媒和数依存性	東大教養	梶本 興亞
分子線溶媒和分子の光ダイナミックスの研究	京都工芸繊維大繊維	平山 錠
黒リンの新しい intercalation compound の合成と電子 物性	室蘭工大	城谷 一民
超伝導体 Li <sub>0.9</sub> Mo <sub>6</sub> O <sub>17</sub> のバンドギャップの測定	青山学院大理工	秋光 純
亜鉛ポルフィリン錯体による1,2ジブロム化合物の脱 臭素化	名大工	高木 克彦
時間分割レーザー分光法によるカルベン反応での隣接 基関与の解明	三重大工	富岡 秀雄
チオニトロン化合物の研究	東大理	岡崎 廉治
ATOMCI プログラムの機能拡充、改良	北大理	佐々木不可止
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	名大理学研究科	斎藤 稔
ピレン結晶における非輻射緩和過程	甲南大理	松井 敦男
合成二分子膜におけるエネルギー移動	東京農工大工	下村 政嗣
高分子系における励起状態相互作用の動的測定	東工大資源化学研	喜多村 昇
均一触媒反応における不安定中間体の単離とその物性	熊本大工	大吉 昭
軸性キラルなホスフィン類の合成とその機能開発	埼玉大工	宮下 晃
新しいキラル二座配位金属配位子を用いる不齊接触反 応の研究	愛知学泉短大	小谷野錦子
キノノイド構造をもつレドックス系の分子設計	阪大理	中筋 一弘
高压 ESR 分光器の製作	静岡薬大	吉岡 寿
キラルなランタノイド錯体の分子設計と構造解析	九大理	大川 尚士
異種架橋基をもつ二核銅（II）錯体の磁性	九大理	西田 雄三
テトラキス（アミノエチル）テトラアザシクロアルカ ンを用いた新しいタイプの二核錯体の合成と性質	九大教養	村瀬 一郎
ヘテロ金属間結合を有する二核錯体の電子共鳴スペク トル	大阪市立大理	中村 幸雄

三元金属錯体における分子内芳香環スタッキングの研究	金沢大薦	山内 倭
Mo <sub>6</sub> 骨格をもつ混合配位子クラスター錯体の合成と構造決定	東北大理学研究科	海老原昌弘
混合配位子錯体生成の熱力学と立体構造	新潟大理学研究科	佐藤 敬一
Xylylene 架橋二核 Mo (II) 錯体の光反応	大阪市立大理	磯辺 清
ベリリウム(II)イオンおよびアルミニウム(III)イオンの溶媒交換反応	名大理	石井 雅男
硫黄・セレン単体を配位子とするコバルトホスフィン錯体のキャラクタリゼーション	名大理	喜多 雅一
希土類シェブレル化合物における希土類イオンの配列	大阪市立大理	大井俊一郎
混合原子価錯体の合成と構造	東北大理	伊藤 翼
スピンドロスオーバー鉄(III)錯体の研究	九大理	前田 米藏

[後期]

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	東大工学系研究科	神谷 健秀
分子振動の旋光強度の理論計算	阪大蛋白質研	菅田 宏
遷移金属錯体の構造、電子状態、触媒作用に関する分子軌道研究	熊本大工	榎 茂好
液相における電子移動反応に関する理論的研究	東大教養	加藤 重樹
非断熱過程の準古典的理論	東工大理	北原 和夫
オレフィンに対するラジカル反応機構の理論的研究	大阪学院大	酒井 章吾
No の多光子イオン化機構の MQDT 解析	九大総合理工研究科	中島 慶治
励起原子の衝突イオン化	北里大医	高木 秀一
擬縮退電子系を有する一次元クラスターの理論的研究	阪大基礎工	山口 兆
NH <sub>3</sub> 分子 V <sub>4</sub> =1 振動励起状態の反転マイクロ波分光	慶應大理工	佐々田博之
赤外分光法による分子イオンの検出	九大理	田中 桂一
低い内部回転障壁を持つ分子のマイクロ波分光	西南学院大	松村 敬治
酸素原子の反応中間体の分光とその動力学的挙動の研究	東大工	幸田清一郎

ミリ波・光二重共鳴法による高振動励起状態の衝突過程の研究	東大理学系研究科	松尾由賀利
不安定化合物 $\text{SiF}_3$ ラジカル, $\text{SiFxHy}$ ラジカル等のマイクロ波スペクトルの観測	(財)相模中研	谷本 光敏
準安定電子励起分子のダイオードレーザー分光	名大理	山本 智
共鳴ラマン散乱による高酸化状態のポルフィリンモデル錯体の研究	阪大医学研究科	橋本 慎二
チトクロム酸化酵素による酸素還元機構のラマン分光法による研究	甲南大理	吉川 信也
共鳴ラマンスペクトルによる高酸化金属ポルフィリン錯体の研究	阪大基礎工	龍野 瞳宜
セラミックス中不純物の状態分析	東工大工業材料研	森川日出貴
シリカ担持合金微粒子触媒の構造解析	豊橋技大	上野 晃史
担持モリブデン硫化物触媒の構造研究	東北大工	山田 宗慶
超高速時間分割スペクトロスコピーによる化学反応のエネルギー共役に関する研究	都立大工	井上 晴夫
有機固体粉末のピコ秒時間分解拡散反射スペクトル	京都工芸纖維大纖維	池田 憲昭
トリエチルアミン-ハロゲン化アントラキノン間の光誘起電子移動	京都工芸纖維大工芸	濱之上熊男
カルバゾール系二分子膜を用いる光誘起電荷分離	九大工	中村 博
金属クラスター錯体の光触媒機能開発の基礎的検討	東北大理	木戸 寛明
半導体光触媒及び光応答電極による有機化学反応	明星大理工	原田 久志
硫化物半導体の光触媒機構に関する研究	阪大工	柳田 祥三
プラズマ CVD 法を用いた Si 系無機薄膜の生成	東海大工	平山 達
多光子イオン化法によるカルボニル分子の励起状態およびその光化学過程の研究	神戸大理	馬場 正昭
液体流から生成したクラスターの研究 (Ⅲ) アミン類のクラスター	北九州大	竹之下芳也
塩素置換炭化水素の光解離過程	東工大理	市村禎二郎
紫外パルスレーザーによる表面光分解反応	三重大工	川崎 昌博
長鎖アルキル基をもつトリフェノジチアジンの固体物性	熊本大理	佐藤 直樹

黒鉛層間化合物の電荷移動	熊本大理	佐野 瑞香
内部状態を選別したイオン-分子反応	東大教養	本間 健二
(H <sub>2</sub> O <sup>+</sup> , H <sub>2</sub> O) 系におけるイオン・分子反応	阪大理	友田 真二
状態を規定したイオン-分子反応の研究	静岡大教養	尾形 照彦
MPI 法による励起三重項状態のダイナミクス	京大理	広田 襄
ホルムアミドの電子励起状態	明星大理工	坪井 正道
無蛍光性アントラセンの電子励起緩和過程のモレキュラービームによる研究	京都工芸繊維大繊維	平山 錠
強い電子受容体を成分とする電荷移動錯体の合成と物性	東大物性研	浦山 初果
超伝導体 Li <sub>0.9</sub> Mo <sub>6</sub> O <sub>17</sub> 及び BaBi <sub>1-x</sub> PbxO <sub>3</sub> のバンドギャップ	青山学院大理工	秋光 純
一次元型高スピニ有機分子の ESR による研究	大阪市立大理	手木 芳男
亜鉛ポルフィリン錯体を用いる1,2-ジプロム化合物の光増感脱プロム化	名大工	高木 克彦
安定ビスフェノキシラジカルの合成とその磁気的挙動	東大教養	菅原 正
ATOMCI プログラムの機能拡充・改良	北大理	佐々木不可止
分子のポテンシャル曲面と電子密度曲面の計算科学	中京大教養	秦野 寛世
合成二分子膜のピコ秒レーザーフォトリシス	東京農工大工	下村 政嗣
フレンケル励起子の格子緩和	甲南大理	松井 敦男
オキサメタラサイクルの反応性について	金城学院大家政	山川 仁
新しい不斉接触反応プロセスを用いる生理活性物質の合成	愛知工大	井上 真一
新しいキラルなホスフィン類を配位子とする遷移金属錯体の合成	埼玉大工	宮下 晃
新しい多核金属錯体の合成とその触媒作用	熊本大工	大吉 昭
有機電荷移動錯体結晶の電子状態の研究	東大工	国府田隆夫
有機分子性強誘電体の基礎研究	東大工	十倉 好紀
新しい機能を持つ分子集合体(陽子-電荷移動型錯体)の開発と評価	東大物性研	齐藤 軍治
μ-オキソニ鉄(Ⅲ, Ⅳ)混合原子価錯体の研究	九大理	大川 尚士
銅塩の水素化合物の構造と物性	徳島大工	神田 精一

2,3-ビス(2'-ピリジル)ピラジンのつくる二核 銅錯体の磁気的相互作用	金沢大教育	井原 良訓
非水溶媒中におけるカドミウム(II)チオシアナト錯 体の熱力学と構造	東工大総合理工学研究科	大瀧 仁志
三元金属錯体における分子内芳香環スタッキングの研 究	金沢大薬	山内 倖
フェノール誘導体を配位子とする鉄およびマンガン混 合原子価錯体の物性に関する研究	金沢大理	鈴木 正樹
非イオン界面活性剤存在下の溶液内錯形成平衡の変化 について	新潟大理	外林 武
[Ru(C <sub>5</sub> Mes) <sub>2</sub> Cl(μ-Cl)]および関連化合物の酸化還 元反応	大阪市立大理	磯辺 清
鉄硫黄クラスター錯体による酸化触媒反応	阪大理	上山 憲一
反磁性金属イオンの溶媒交換反応	名大理	石井 雅男
複核、三核のタンゲステン(V), (IV), - (III)錯体 の <sup>183</sup> W-NMR	東北大理	永澤 明
金属錯体の溶液内物性に関する多核NMRによる研究	愛知県立大	田浦 俊明
ルミノールの化学発光における銅(II)錯体の触媒作 用の研究	愛教大教育	稻毛 正彦
シェブレル型類似構造をもつヘキサモリブデン混合原 子価クラスター錯体の構造	東北大理学研究科	海老原昌弘
希土類シェブレル化合物における希土類イオンの配列 キノンの光還元に対する金属イオンの効果	大阪市立大理	大井俊一郎
配位子光励起による中心金属の反応場の活性化とその 物理化学	東北大理学研究科	下石 平己
スピンクロスオーバー鉄(III)錯体の遷移機構の研究	九大理	伊藤 翼
		前田 米藏

## 招へい協力研究

### [前 期]

有機金属化合物の合成と反応	東工大資源化学研	山本 明夫
反応動力学とポテンシャルエネルギー面に関する研究	東大工	松井 宏幸
生体高分子の動的挙動に及ぼす水和の影響の研究	九大工	野口 俊之

新機能材料としての酸化物超格子	京大化学研	坂東 尚周
スピニ平衡鉄（Ⅲ）錯体の磁気的性質と構造に関する 研究	九大理	高島 良正
金属の特性を活かした有機合成	岡山理科大	野崎 一

#### [後期]

均一系触媒反応の素反応に関する研究	阪大	大塚齋之助
気相反応のポテンシャルエネルギー面と反応動力学に 関する研究	東大工	松井 宏幸
固体粉末、ポリマー系のピコ秒レーザーホトリシス パラジウム触媒を用いる有機合成	京都工芸繊維大 東工大工	増原 宏 辻 二郎

## 研 究 会

#### [前期]

化学反応動力学研究の最近の進歩	分子研	正畠 宏祐
炭酸ガス・窒素固定の電気化学および触媒プロセス	名古屋工大	伊藤 要

#### [後期]

分子の動的挙動と化学反応に対する磁場効果	理化研	林 久治
短寿命分子の高分解能スペクトル	分子研	広田 榮治
金属錯体による酸素ならびに低分子の活性化機構	京大工	森島 績

## 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

○大阪府立大総合科学	杉浦 俊男	分子研	小谷野猪之助
大阪府立大総合科学	松本 晟	大阪府立大総合科学	早川 滋雄

分子研 鈴木 信三 大阪府立大総合科学 古郷 真嗣

◎超高压下における遠赤外分光装置の開発

○東北大理	難波 孝夫	東北大理	池沢 幹彦
東北大理学研究科	浦島 泰人	東北大理学研究科	王 小蕾

分子研 渡辺 誠 分子研 福井 一俊

◎蛍光分光法による真空紫外光化学反応過程の研究

○分子研 正畠 宏祐 東邦大理 大島 茂 東工大理 斎田 巧  
東大教養 梶本 興亞 京大化研 伊吹 紀男 新潟大理 徳江 郁雄  
東大理 近藤 保 東大理 永田 敬 京都工芸繊維大 平山 鋭  
大阪府立大 田中富士雄 分子研 阿知波洋次 分子研 田林 清彦

◎超音速ジェット中の分子・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  
分子研 城丸 春夫 分子研 鶴田 伸明 慶應大理工 茅 幸二  
慶應大理工 富宅喜代一 富山医薬大薬 北川 泰司 富山医薬大薬 森 佳洋  
北大応電研 勝又 春次 三重大工 佐藤 博保 三重大工 川崎 昌博  
京大化研 伊吹 紀男 富山医薬大 国安 美和 東工大理 篠野 嘉彦  
阪大理 友田 真二

### UVSOR 協力研究

[前 期]

高分子レジストの角度分解光電子分光	千葉大工	上野 信雄
有機分子イオンの分解機構の研究	奈良女大理	竹内 孝江
NO <sub>2</sub> の分解イオン化過程の研究	東工大理	渋谷 一彦
ハロゲンと有機金属化合物の光イオン化過程	三重大工	佐藤 博保
有機カルボン酸会合体の光イオン化分光の研究	富山医薬大薬	北川 泰司
炭化水素の VUV 領域における光イオン化断面積	東工大理	篠野 嘉彦
メタンチオールと関連分子の吸収・発光スペクトル	新潟大理	徳江 郁雄
二原子分子の分子線吸収・発光スペクトルの測定	東邦大理	大島 茂

[後 期]

ポリキノン類の光電子スペクトル	茨城大工業短大	山口 裕之
真空紫外領域における二酸化窒素の光イオン化過程	東工大理	渋谷 一彦
有機分子イオンの分解機構の研究	奈良女大理	竹内 孝江
二酸化炭素とそのクラスターの光イオン化過程	三重大工	佐藤 博保
簡単な分子の高励起状態と光分解に関する研究	京大化研	伊吹 紀男
金属表面に吸着した色素の励起状態の緩和過程	東邦大理	大島 茂
ハロゲン化硫黄およびチオニル化合物の光解離過程	新潟大理	徳江 郁雄

## UVSOR 招へい協力研究

### [前 期]

BL3A 観測システムの建設及びそれを用いた原子・分子素過程の研究	大阪市立大原子力基礎研	増岡 俊夫
共同利用用気体測定装置の建設協力	京大化研	伊吹 紀男
UVSOR 用極端紫外分光器の動作チェック	大阪市立大原子力基礎研	三谷 七郎
UVSOR 用極端紫外分光器の動作チェック	大阪市立大工	石黒 英治

### [後 期]

UVSOR-UPS による有機固体の研究	広島大理	関 一彦
BL3A 観測システムの建設及びそれを用いた原子・分子素過程の研究	大阪市立大原子力基礎研	増岡 俊夫
共同利用用気体測定系（II）の建設	京大化研	伊吹 紀男
UVSOR 用極端紫外分光器の動作チェック	大阪市立大工	石黒 英治
UVSOR 用極端紫外分光器の動作チェック	大阪市立大原子力基礎研	三谷 七郎

# 分子研コロキウム

第319回 昭和61年1月22日 分子内水素結合をもつ分子の励起状態における動的過程の研究  
(長岡 伸一)

第320回 1月29日 Quantum Mechanical Studies of Atom-Diatom Exchange Collision  
(M. Baer ; Soreq Nucl. Res. Cent.)

第321回 2月5日 有機金属錯体の反応機構の理論的研究 (古賀 伸明)

第322回 2月12日 IV-VI族化合物半導体 SnTe の性質 (福井 一俊)

第323回 2月19日 ハロゲン架橋混合原子価錯体の光学的性質 (和田 芳樹)

第324回 2月27日 共鳴ラマン散乱強度と電子励起状態の構造 (岡本 裕巳)

第325回 3月5日 均一系触媒反応の理論的研究と分子設計に翔ける夢 (中村振一郎)

第326回 3月5日 Electron Spectroscopy for Atoms, Molecules and Condensed Matter, a Survey  
(K. Siegbahn ; Uppsala Univ.)

第327回 3月12日 ルチニウム触媒を用いる有機合成反応  
還元反応・N-アルキル化反応ならびに不斉水素化反応 (太田 哲男)

第328回 4月9日 Energetic and Dynamics of Concerted Unimolecular Decomposition of Organic  
Molecules (Y. T. Lee ; Univ. of California, Berkeley)

第329回 4月16日 Active site chemistry and binding sites in reactions of metalloproteins  
(A. G. Sykes ; Univ. of Newcastle upon Tyne)

第330回 4月23日 高分子および関連化合物の紫外光電子分光 (関 一彦)

第331回 4月30日 不安定分子種のサブ・ドップラー分光 (鈴木 哲雄)

第332回 5月7日 大きな孤立分子の“暗い”プロセス  
——分子内エネルギー変換と化学反応 (吉原經太郎)

第333回 5月14日 Difference frequency laser spectroscopy of molecular ions  
(T. Amano ; Herzberg Inst. of Astrophysics, National Research Council of Canada, Ottawa,  
Canada)

第334回 5月21日 New Analytical Techniques Based Upon Fluorescence Spectroscopy to Study  
Polymers in the Solid State (Mitchell A. Winnik ; Univ. of Toronto)

第335回 5月28日 固体表面と超微粒子の物性 (里子 允敏)

第336回 6月4日 金属超微粒子の表面状態と物性 (木村 啓作)

第337回 6月11日 Non-transform-limited 広帯域光を用いた超高時間分解能分光  
(森田 紀夫)

- 第338回 6月18日 多核錯体の特性と構造 (木田 茂夫)
- 第339回 7月9日 分子の非弾性衝突における虹散乱について (中村 正人)
- 第340回 7月16日 CS<sub>2</sub> の発光に対する磁場効果 (今村 隆史)
- 第341回 7月23日 Laser Spectroscopy of Predissociated Molecular States  
(E. Tiemann ; Inst. At. Molekulphys., Univ. Hannover)
- 第342回 7月30日 状態を選択したイオン——分子反応の研究——最近の話題  
(小谷野猪之助)

# 国際交流

## 海外からの招へい研究者

(61. 1. 1~61. 7. 30)

### 1. 評議員

P-O. Löwdin	(アメリカ フロリダ大学教授)	61. 5. 6-61. 5. 10
-------------	-----------------	--------------------

### 2. 外国人客員研究部門

H. D. Bist	(インド インド工業大学教授)	60. 8. 1-61. 5. 31
M. Baer	(イスラエル ソレク原子核研究センター主任)	60. 9. 5-61. 6. 4
J. M. Lee	(韓国 全北国立大学助教授)	61. 3. 1-61. 11. 30
J. Jeszka	(ポーランド 科学アカデミー上級研究員)	61. 5. 27-61. 11. 26
E. Tiemann	(西ドイツ ハノーバー大学教授)	61. 6. 1-62. 3. 15
J. R. Grover	(アメリカ ブルックヘブン国立研究所主任研究員)	61. 6. 6-62. 4. 30

### 3. 文部省招へい外国人研究員

K-H. Jung	(韓国 韓国高等科学技術院教授)	60. 12. 21-61. 2. 20
M. C. Chang	(韓国 スンチョン国立大学助教授)	60. 12. 1-61. 1. 31
B. S. Lee	(韓国 インハーレ大学準教授)	61. 1. 4-61. 3. 3
Y-T. Lee	(アメリカ カリフォルニア大学バークレー教授)	61. 3. 1-61. 6. 15
S-O. Oh	(韓国 慶北国立大学教授)	61. 7. 1-61. 8. 31
H. S. Yoo	(韓国 チュンブク国立大学助教授)	61. 7. 1-61. 8. 31
X. Sun	(中国 復旦大学教授)	61. 7. 18-61. 11. 30

### 4. 日本学術振興会招へい外国人研究者 (\*二国間交流)

C. Daniel *	(フランス ストラスブル大学主任研究員)	61. 6. 1-61. 11. 30
M. R. Willis	(イギリス ノッtingham大学準教授)	61. 6. 15-61. 9. 12

### 5. 岡崎コンファレンス

R. A. Mathies	(アメリカ カリフォルニア大学バークレー教授)	61. 1. 15-61. 1. 19
H. P. Trommsdorff	(フランス グルノーブル科学薬科大学教授)	61. 1. 15-61. 1. 18
P. F. Barbara	(アメリカ ミネソタ大学準教授)	61. 1. 14-61. 1. 19

M. A. EL-Sayed	(アメリカ カリフォルニア大学ロサンゼルス教授)	61. 1. 16-61. 1. 18
J. C. Scaiano	(カナダ 国立研究所研究員)	61. 1. 15-61. 1. 19
J. M. Greenberg	(オランダ ライデン大学教授)	61. 6. 24-61. 6. 28
A. Hjalmarson	(スウェーデン シャルマース工科大学研究員)	61. 6. 25-61. 6. 29
D. Smith	(イギリス バーミンガム大学教授)	61. 6. 25-61. 6. 29
N. G. Adams	(イギリス バーミンガム大学教授)	61. 6. 25-61. 6. 29

## 6. 招へい協力研究員

山口 幸男	(アメリカ カリフォルニア大学パークレー主任研究員)	61. 1. 15-61. 1. 16
K. Siegbahn	(スウェーデン ウプサラ大学教授)	61. 3. 4-61. 3. 8
朱 麗 蘭	(中国 中国科学院化学研究所長)	61. 3. 25-61. 3. 29
M. Vala	(アメリカ フロリダ大学教授)	61. 4. 6-61. 4. 10
E. Fischer	(イスラエル ワイツマン研究所教授)	61. 5. 19-61. 5. 21
G. R. Crosby	(アメリカ ワシントン州立大学教授)	61. 5. 20-61. 5. 26
J. Dumas	(フランス 国立研究所教授)	61. 5. 23
L. D. Kispert	(アメリカ アラバマ大学教授)	61. 5. 27-61. 5. 30
J. L. Brédas	(ベルギー ナムール大学研究員)	61. 5. 28-61. 5. 30
W. R. Salaneck	(スウェーデン リンチューピン大学教授)	61. 5. 29-61. 5. 31
J. P. Pouget	(フランス 国立研究所教授)	61. 7. 9-61. 7. 10

## 7. 特別協力研究員

石 祖 荣	(中国 中国科学院化学研究所研究員)	60. 5. 18-61. 6. 17
H. Petek	(アメリカ カリフォルニア大学パークレー)	60. 8. 1-62. 3. 31
M. J. J. Vrakking	(オランダ アイントホーヘン工科大学院生)	60. 9. 9-61. 4. 30
A. K. Campen	(イギリス サザンプトン大学大学院生)	61. 3. 25-61. 6. 14
天埜 禹義	(カナダ ヘルツベルグ研究所上級研究員)	61. 4. 1-61. 5. 31
田 曾 挙	(中国 復旦大学博士候補生)	61. 5. 1-61. 10. 31
M. C. Chang	(韓国 スンチョン国立大学助教授)	61. 6. 23-61. 7. 6
B. Y. Lee	(韓国 慶尚大学副教授)	61. 6. 25-61. 8. 25
K. H. Kwon	(韓国 韓国高等科学技術院院生)	61. 7. 1-61. 7. 31

## 海外からの訪問者

李 貴 和	(中国 中国科学技術大学助教授)	61. 1. 6-61. 1. 18
裴 元 吉	(中国 中国科学技術大学副技師長)	61. 1. 6-61. 1. 18
張 允 武	(中国 中国科学技術大学副技師長)	61. 1. 6-61. 1. 18
陳 祖 塋	(中国 中国科学技術大学技師)	61. 1. 6-61. 1. 18
王 貴 誠	(中国 中国科学技術大学講師)	61. 1. 6-61. 1. 18
謝 荣 胜	(中国 中国科学技術大学技師)	61. 1. 6-61. 1. 18
吳 根 鎬	(韓国 漢陽大学教授)	61. 2. 18-61. 2. 21
J. -L. Birbaum	(スイス スイス連邦工科大学博士研究員)	61. 3. 10-61. 3. 11
A. S. Kende	(アメリカ ロチェスター大学教授)	61. 3. 25
T. A. Claxton	(イギリス レスター大学上級講師)	61. 3. 25-61. 3. 26
D. E. Fenton	(アメリカ シェフィールド大学教授)	61. 3. 25-61. 3. 26
E. Fluck	(西ドイツ マックスプランク協会研究員)	61. 3. 29
A. G. Sykes	(イギリス ニューカッスル大学教授)	61. 4. 16-61. 4. 17
S. J. Cox	(イギリス 王立協会国際担当秘書官)	61. 4. 18-61. 4. 19
L. I. Simandi	(ハンガリー ブダペスト大学教授)	61. 5. 12-61. 5. 13
M. A. Winnik	(カナダ トロント大学教授)	61. 5. 21
F. Winnik	(カナダ ゼロックス研究所研究員)	61. 5. 22
M. Z. Hoffman	(アメリカ ポストン大学教授)	61. 5. 25-61. 5. 26
T. Matsubara	(アメリカ イーストマンコダック社研究員)	61. 6. 3
M. Guest	(イギリス ダースベリー研究所研究員)	61. 6. 4
M. K. DeArmond	(アメリカ ノースカロライナ大学教授)	61. 6. 8-61. 6. 10
K. W. Hanck	(アメリカ ノースカロライナ大学教授)	61. 6. 8-61. 6. 10
J. J. Verbist	(ベルギー ナムール大学教授)	61. 6. 9-61. 6. 10
K. Nakamoto	(アメリカ マーケット大学教授)	61. 6. 12-61. 6. 13
C. E. Brion	(カナダ ブリティッシュ・コロンビア大学教授)	61. 6. 25-61. 6. 28
J. A. Richards	(イギリス ブリティッシュカウンシル科学担当官)	61. 7. 8
M. Randic	(アメリカ ドレーク大学教授)	61. 7. 8
K. Willenbrock	(アメリカ サザンメソディスト大学教授)	61. 7. 28
G. Housner	(アメリカ カリフォルニア工科大学)	61. 7. 28
A. P. DeAngelis	(アメリカ 全米科学財団主任研究員)	61. 7. 28

## 外国人研究者来所予定

P.-S. Song	(アメリカ テキサス工科大学教授)	62. 1. 5-62. 3. 31予定
I. Munro	(イギリス ダーズベリー研究所主幹研究員)	62. 2. 1-62. 4. 30予定
J. T. Groves	(アメリカ プリンストン大学教授)	62. 1. 3-62. 1. 24予定
P. G. Mezey	(カナダ サスカチューク大学教授)	62. 1-62. 2予定
S. M. B. Costa	(ポルトガル 高等学術研究所教授)	61. 10. 20-62. 1. 20予定
P. N. Skancke	(ノルウェー トロムゼ大学教授)	61. 8. 15-61. 12. 15予定
C.-Q. Wu (吳長勤)	(中国 復旦大学博士候補生)	61. 7. 15-61. 10. 24予定
K. Kemnitz	(アメリカ コロンビア大学研究員)	61. 10. 1-61. 11. 15予定

## 海外渡航 (61.1~61.8)

氏名	所属・職	期間	目的国	目的
加茂川 恵司	分子構造研究系 助 手	61. 1.17 ~61. 3.31	イギリス	分子科学における分子の動的挙動に関する研究の動向調査のため
中村 宏樹	理 論 研究 系 教 授	61. 1.19 ~61. 2. 3	イギリス	分子科学における分子の動的挙動に関する研究の動向調査のため
岩村 秀	相 関 領 域 研究 系 教 授	61. 2. 9 ~61. 2.13	韓 国	第3回日韓有機化学セミナー及び第5回韓国有機化学シンポジウムに出席し講演を行なうため
広田 栄治	分子構造研究系 教 授	61. 2.27 ~61. 3. 7	アメリカ	日米科学協力事業『短寿命分子の高分解能分光』の研究実施のため
田路 和幸	分子構造研究系 助 手	61. 3.15 ~61. 9.14	アメリカ フランス	EXAFSの軽原子への応用と Group Selective Reactionの研究及び第4回 EXAFS国際会議出席、スタンフォード大学SR施設訪問のため
吉原 紹太郎	電子構造研究系 教 授	61. 3.16 ~61. 3.23	アメリカ	米国光学会における超高速現象国際会議に出席のため
斎藤 一夫	錯体化学実験施設 教 授	61. 3.15 ~61. 3.29	イギリス、フランス、西独、デンマーク、アメリカ	分子科学に関する調査研究及び諸外国における大学院教育に関する実状調査
斎藤 一夫	錯体化学実験施設 教 授	61. 4.20 ~61. 5. 7	中 国	金属錯体の反応性及び反応機構に関する研究のため
広田 栄治	分子構造研究系 教 授	61. 4.19 ~61. 4.26	イギリス	分子科学研究所-SERC共同研究(高分解能分光)推進のため
広田 栄治	分子構造研究系 教 授	61. 5.11 ~61. 5.16	韓 国	理論化学等に関する研究動向調査のため
中村 宏樹	理 論 研究 系 教 授	61. 5.12 ~61. 5.16	韓 国	理論化学等に関する研究動向調査のため
諸熊 奎治	理 論 研究 系 教 授	61. 5.12 ~61. 5.16	韓 国	理論化学等に関する研究動向調査のため
花崎 一郎	電子構造研究系 教 授	61. 5.12 ~61. 5.16	韓 国	理論化学等に関する研究動向調査のため
柏木 浩	電子計算機センター 助 教 授	61. 5.12 ~61. 5.19	韓 国	理論化学等に関する研究動向調査のため

氏、名	所 属・職	期 間	目 的 国	目 的
那須 奎一郎	理 論 研 究 系 助 教 授	61. 5. 12 ~61. 5. 16	韓 国	理論化学等に関する研究動向調査のため
長倉 三郎	所 長	61. 5. 12 ~61. 5. 15	韓 国	第2回日韓理論化学シンポジウムに出席のため
大峰 巍	理 論 研 究 系 助 教 授	61. 5. 12 ~61. 5. 16	韓 国	第2回日韓理論化学シンポジウムに出席のため
木村 克美	分子集団研究系 教 授	61. 6. 7 ~61. 6. 15	ア メ リ カ	多光子過程に関するゴードン研究会議において 討議のため
井口 洋夫	分子集団研究系 教 授	61. 6. 7 ~61. 6. 13	ア メ リ カ	米国に於ける新材料研究動向調査のため
廣田 栄治	分子構造研究系 教 授	61. 6. 9 ~61. 6. 21	ア メ リ カ	日米科学共同研究「短寿命分子の高分解能分光」 実施のため
金森 英人	分子構造研究系 技 官	61. 6. 9 ~61. 6. 30	ア メ リ カ	日米科学共同研究「短寿命分子の高分解能分光」 実施のため
川口 建太郎	分子構造研究系 助 手	61. 6. 9 ~61. 8. 24	ア メ リ カ カ ナ ダ	日米科学共同研究「短寿命分子の高分解能分光」 の実施及び分子イオンの差周波レーザー分光実 験のため
吉原 経太郎	電子構造研究系 教 授	61. 6. 14 ~61. 6. 25	ア メ リ カ	第5回超高速現象国際会議招待講演を行うため
山崎 巍	機 器 セ ン タ ー 助 教 授	61. 6. 14 ~61. 6. 30	ア メ リ カ カ ナ ダ	第5回超高速現象国際会議出席のため
大峰 巍	理 論 研 究 系 助 教 授	61. 6. 15 ~61. 6. 23	ア メ リ カ	アメリカ物理学会で招待講演のため
諸熊 奎治	理 論 研 究 系 教 授	61. 6. 15 ~61. 6. 26	ア メ リ カ	第41回分子分光学シンポジウム出席及び理論化 学研究討論のため
篠原 久典	電子構造研究系 助 手	61. 6. 16 ~61. 9. 10	イ ギ リ ス	分子及び分子会合体の電子構造動力学の共同研 究及び調査のため
中村 宏樹	理 論 研 究 系 教 授	61. 6. 23 ~61. 7. 8	韓 国	分子動力学過程の理論的研究実施のため
宇田川 康夫	分子構造研究系 助 教 授	61. 6. 28 ~61. 7. 18	フ ラ ン ス ア メ リ カ	第4回 EXAFS コンファレンスに出席のため

氏名	所属・職	期間	目的国	目的
正畠 宏祐	分子集団研究系 助教 授	61. 7. 4 ～61. 8. 7	アメリカ	共同研究、研究所視察、招待講演及びゴードン研究会議に参加のため
長倉 三郎	所長	61. 7. 11 ～61. 7. 18	イギリス	“閃光光分解法とその応用”研究会に出席するため
坂田 忠良	電子構造研究系 助教 授	61. 7. 16 ～61. 8. 6	フランス、ドイツ、スペイン、 ポルトガル	科学研究費補助金海外学術調査「光合成による光エネルギー交換利用の分子機構に関する研究」実施のため
岩村 秀	相関領域研究系 助教 授	61. 7. 22 ～61. 8. 3	ポルトガル フランス	第11回 IUPAC 国際光化学会議及び IUPAC 光化学委員会出席並びにフランスの2研究機関訪問のため
井口 洋夫	分子集団研究系 助教 授	61. 8. 2 ～61. 8. 11	スウェーデン デンマーク	第8回真空紫外物理学国際会議に出席のため
渡辺 誠	極端紫外光実験施設 助教 授	61. 8. 2 ～61. 8. 11	スウェーデン デンマーク	海外学術調査「シンクロトロン放射光の光電子分光の研究動向調査」実施のため
中島 信昭	電子構造研究系 助手 手	61. 8. 5 ～61. 8. 17	アメリカ	電子供与受容相互作用に関するゴードン研究会議に出席、講演のため
柏木 浩	電子計算機センター 助教 授	61. 8. 14 ～61. 8. 26	アメリカ	ゴードンリサーチコンファレンスへの参加及び研究打ち合わせのため
斎藤 一夫	錯体化学実験施設 助教 授	61. 8. 15 ～61. 9. 5	ペルギー ギリシャ イタリア	ギリシャのアテネにおいて開催される第24回国際錯塩化学会議及び第10回非水溶液化学会議並びに第11回マクロ環化学会議出席のため
遠藤 泰樹	分子構造研究系 助手 手	61. 8. 15 ～61. 9. 19	イギリス	高分解光法による反応中間体の分光と反応機理の解明に関する共同研究及び調査のため
木田 茂夫	錯体化学実験施設 助教 授	61. 8. 21 ～61. 9. 7	ギリシャ ユーロスラビア イタリア	第24回国際配位化学会議出席及び錯体化学研究のため
北川 穎三	分子構造研究系 助教 授	61. 8. 31 ～61. 9. 19	アメリカ	第10回国際ラマン分光学会に出席のため

## 人事異動 (61.1~61.8)

異動年月日	異動前	氏名	異動内容	備考
61. 3. 1	技官(技術課)	馬場正昭	助手(神戸大学理学部)に転任	電子構造研究系技術係
61. 3. 24		水嶋生智	技官(技術課)に採用	分子構造研究系技術係
61. 3. 27		星肇	技官(技術課)に採用	分子集團研究系技術係
61. 3. 31	助手(電子構造研究系)	西山岩男	辞職	電子状態動力学研究部門
61. 3. 31	事務補佐員(電子構造研究系)	服部祐代	退職	
61. 3. 31	助手(分子集團研究系)	阿知波洋次	辞職	基礎光化学研究部門
61. 3. 31	電子構造研究系研究主幹(併任)	吉原經太郎	併任終了	
61. 3. 31	機器センター長(併任)	吉原經太郎	併任終了	
61. 3. 31	助教授(理論研究系)	島村勲	併任終了	分子基礎理論第三研究部門
61. 3. 31	助教授(分子構造研究系)	濱口宏夫	併任終了	分子構造学第二研究部門
61. 3. 31	教授(電子構造研究系)	林久治	併任終了	電子構造研究部門
61. 3. 31	教授(分子集團研究系)	小谷正博	併任終了	分子集團研究部門
61. 3. 31	助教授(相関領域研究系)	岡崎廉治	併任終了	相関分子科学第二研究部門
61. 3. 31	助教授(極端紫外光実験施設)	中川英之	併任終了	
61. 3. 31	教授(錯体化学実験施設)	中村晃	併任終了	錯体触媒研究部門
61. 3. 31	助教授(錯体化学実験施設)	柏原和夫	併任終了	錯体触媒研究部門
61. 4. 1		中村正人	非常勤の講師(理論研究系)に採用	
61. 4. 1		北川禎三	東京工業大学教授資源化学研究所に併任	62. 3. 31まで
61. 4. 1		角田範義	非常勤の講師(分子構造研究系)に採用	
61. 4. 1		福田芳男	技術補佐員(電子構造研究系)に採用	
61. 4. 1		小野厚子	事務補佐員(電子構造研究系)に採用	
61. 4. 1	教授(九州大学理学部)	木田茂夫	教授(錯体化学実験施設)に配置換	錯体合成研究部門
61. 4. 1	助教授(東京工業大学大学院総合理工学研究科)	石黒慎一	助教授(錯体化学実験施設)に配置換	錯体合成研究部門
61. 4. 1		木田茂夫	教授(九州大学理学部)に併任	62. 3. 31まで
61. 4. 1		石黒慎一	助教授(東京工業大学大学院総合理工学研究科)に併任	62. 3. 31まで
61. 4. 1	助手(東京工業大学大学院総合理工学研究科)	小堤和彦	助手(錯体化学実験施設)に転任	錯体合成研究部門

異動年月日	異動前	氏名	異動内容	備考
61. 4. 1	助手(九州大学理学部)	御厨正博	助手(錯体化学実験施設)に転任	錯体合成研究部門
61. 4. 1	教授(錯体化学実験施設)	武居文彦	教授(東北大学金属材料研究所)に配置換	錯体合成研究部門
61. 4. 1	助教授(錯体化学実験施設)	手老省三	助教授(東北大学非水溶液化学研究所)に配置換	錯体合成研究部門
61. 4. 1	助手(錯体化学実験施設)	恒川信	助手(東北大学金属材料研究所)に転任	錯体合成研究部門
61. 4. 1	助手(錯体化学実験施設)	細谷正一	助手(東北大学金属材料研究所)に転任	錯体合成研究部門
61. 4. 1	技官(技術課)	加藤清則	係長(極低温技術係)に昇任	
61. 4. 1		田中秀樹	技官(技術課)に採用	理論研究系技術係
61. 4. 1		西谷昭彦	技官(技術課)に採用	電子構造研究系技術係
61. 4. 1		花崎一郎	電子構造研究系研究主幹に併任	
61. 4. 1		花崎一郎	機器センター長に併任	
61. 4. 1	※助教授 (京都大学工学部)	中西浩一郎	助教授(理論研究系)に併任	分子基礎理論第三研究部門
61. 4. 1	※助教授 (東京大学理学部)	小林孝嘉	助教授(分子構造研究系)に併任	分子構造学第二研究部門
61. 4. 1	※教授 (大阪大学基礎工学部)	又賀昇	教授(電子構造研究系)に併任	電子構造研究部門
61. 4. 1	※教授 (筑波大学物質工学系)	壽榮松宏仁	教授(分子集団研究系)に併任	分子集団研究部門
61. 4. 1	※助教授 (東北大学理学部)	宮仕勉	助教授(相関領域研究系)に併任	相関分子科学第二研究部門
61. 4. 1	※助教授 (高エネルギー研究所)	小早川久	助教授(極端紫外光実験施設)に併任	
61. 4. 1	※教授 (大阪大学基礎工学部)	齋藤太郎	教授(錯体化学実験施設)に併任	錯体触媒研究部門
61. 4. 1	※助教授 (名古屋大学理学部)	舟橋重信	助教授(錯体化学実験施設)に併任	錯体触媒研究部門
61. 4. 5	※教授 (東北大学 金属材料研究所)	武居文彦	教授(錯体化学実験施設)に併任	配位結合研究部門
61. 4. 5	※助教授 (東北大学 非水溶液化学研究所)	手老省三	助教授(錯体化学実験施設)に併任	配位結合研究部門
61. 4. 30	事務補佐員(電子構造研究系)	永井栄子	辞職	
61. 5. 1		奥田芳子	事務補佐員(電子構造研究系)に採用	
61. 5. 5	技術補佐員(分子構造研究系)	李浩喜	辞職	
61. 5. 16	助手(東京大学物性研究所)	森田紀夫	助教授(分子構造研究系)に昇任	分子構造学第一研究部門
61. 5. 16	助手(相関領域研究系)	菅原正	助教授(東京大学教養学部)に昇任	相関分子科学第一研究部門
61. 6. 30	技官(技術課)	鈴木哲雄	辞職	分子構造研究系技術係
61. 6. 30	非常勤の講師 (電子構造研究系)	今村隆史	辞職	
61. 7. 1		星野直美	技官(技術課)に採用	分子集団研究系技術係
61. 7. 1		今村隆史	助手(分子集団研究系)に採用	物性化学研究部門

異動年月日	異動前	氏名	異動内容	備考
61. 7. 10	事務補佐員 (電子計算機センター)	泉 谷 浩 美	辞職	
61. 7. 16	技官(技術課)	古 賀 伸 明	助手(理論研究系)に配置換	分子基礎理論第三研究部門
61. 8. 1		小 倉 尚 志	助手(分子構造研究系)に採用	分子構造学第二研究部門
61. 8. 1	助手(分子集團研究系)	関 一 彦	助教授(広島大学理学部)に昇任	物性化学研究部門
61. 8. 7		梶 田 雅 稔	非常勤の講師(分子構造研究系) に採用	分子構造学第一研究部門
61. 8. 16		奥 山 克 彦	助手(分子集團研究系)に採用	基礎光化学研究部門

異動前欄の※印は客員教官で現職を示す。

## 編 集 後 記

「分子研レターズ」は分子研創設（昭和50年）以来、毎年出版され、研究所の主要な刊行物としてその紹介に重要な役割を果しており、これまで14号にのぼる分子研レターズが編集をされてまいりました。この間、所外からも多数の寄稿をお願いし、貴重なご意見等をお寄せいただきました。一方、「分子研ニュース」は、昭和57年から速報性の記事を小冊子にまとめ、8号まで刊行してまいりました。

創設十周年を迎えた分子研は今年は、次の十年に向けての出発の年になりました。この機会に装いを新たにした「分子研レターズ」を企画することになり、従来の分子研レターズと分子研ニュースを合併し、新しいスタイルで年3回ずつ刊行することになりました。

### 分子研レターズ編集委員会

木 村 克 美 (代表)

北 川 穎 三

吉 原 經太郎

高 谷 秀 正

分子研レターズ No.15

発行年月 昭和61年10月

印刷年月 昭和61年10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 荒川印刷