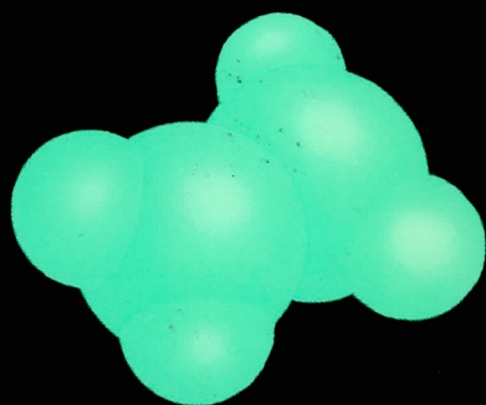


分子研レターズ

'87 No.17



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

目 次

研究紹介

LB 多層膜による光合成アンテナ色素系のシミュレーション

.....分子研 山崎 巖・玉井尚登・山崎トモ子 1

UVSOR ストレジ・リング内電子ビームの安定化

.....分子研 春日 俊夫 5

外国人客員教官の紹介

Hans Toftlund (デンマーク オデンセ大学) 9

Peter Guy Wolynes (アメリカ イリノイ大学) 9

受賞者紹介 (廣田榮治教授) 10

岡崎コンファレンス報告

第28回 岡崎コンファレンス

Solid State Chemistry with VUV Synchrotron Radiation

.....分子研 井口洋夫・渡辺 誠, 広大理 関 一彦 11

第29回 岡崎コンファレンス

Molecular Aspects for Ion-Ion and Ion-Solvent Interactions in Solution

.....東工大総合理工 大瀧仁志, 国際基督教大 齋藤一夫, 分子研 石黒慎一 19

国際協力事業報告

JAPAN-ANGLO (5+5) Workshop on Molecular Material Chemistry

.....分子研 丸 山 有 成 26

研究会報告

短寿命分子の高分解能スペクトル.....分子研 廣 田 榮 治 30

非断熱遷移をともなう原子・分子衝突と化学反応

.....都立大 金子洋三郎・小林信夫, 分子研 中村宏樹 32

電子状態の理論研究.....分子研 諸 熊 奎 治 35

新機能物質としての無機／有機中間化合物の探索

.....分子研 井口洋夫・丸山有成 36

孤立分子集合体の光励起緩和過程.....分子研 正嶋宏祐, 京都工繊大 平山 鋭 38

昭和62年度（前期）共同研究採択一覧	41
分子研コロキウム	47
国 際 交 流	48
海外からの招へい研究者	
海外からの訪問者	
海 外 渡 航	52
人 事 異 動	54
編 集 後 記	57

研究紹介

LB 多層膜による光合成アンテナ 色素系のシミュレーション

山 崎 巖

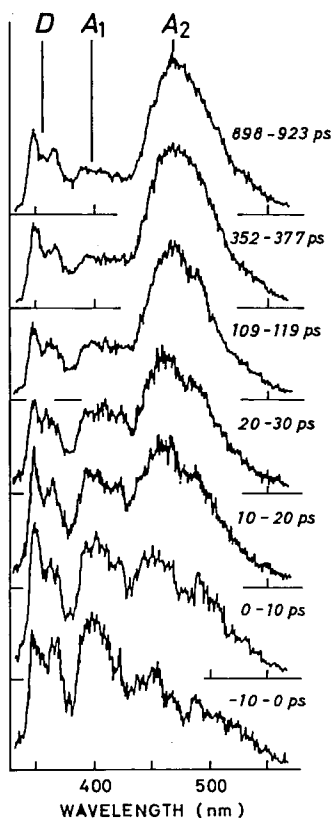
玉 井 尚 登

山 崎 トモ子

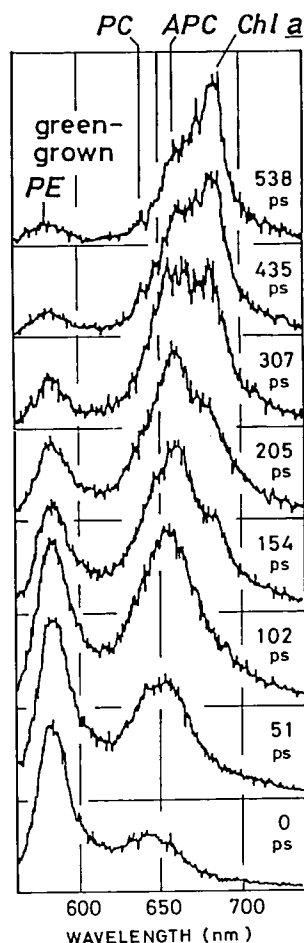
単分子膜の積層構造体であるラングミュア・ブロッジェット (LB) 多層膜は、われわれが比較的任意にその積層構成を設計し得るという点で特徴的な分子集合体であるが、近年これを電導性有機薄膜、記憶材料などの機能材料へ応用することに目が向けられ活発に研究が進められている。¹⁻⁴⁾ 応用研究は別として物理化学の立場からみても興味をもたれ、励起エネルギー移動、電子移動、光化学反応などの光化学的諸過程が、分子の特殊な幾何学的配列の「場」においてどのようにふるまうか、さらに従来調べられてきた均一な 3 次元系ではみられなかった新しい現象が見出されないか、など様々な期待が寄せられる。このような観点にたって最近われわれは、図 1 に示すような LB 多層膜を作成し、外側から内側に向かって一方向に起こる光エネルギー伝達の様子をピコ秒時間分解蛍光分光法で調べ、類似の生体系である植物の光合成アンテナ色素系、とくに藻類のフィコビリナークロロフィル色素系 (図 2) における挙動と比較したので、ここではその概略を紹介したい。

カルバゾール環をもつドナー (D) とシアニン系色素のアクセプター (A) を用いて 2 層系 (D-A₁)、3 層系 (D-A₁-A₂) および 4 層系 (D-A₁-A₂-A₃) を作成した。これらの LB 膜は常法に従って作製され、¹⁾ パルミチン酸および 5mol% の色素を含むベンゼン溶液を水面上に展開した後、無蛍光石英板の上に累積した。D-A₁, A₁-A₂, A₂-A₃ の層間距離はいずれも 25 Å である。時間分解蛍光分光はシンクロナス励起モード同期色素レーザーと時間相関光子計数装置⁵⁾を用いて行った。

時間分解蛍光スペクトルおよび蛍光減衰曲線の解析から、⁶⁾ いずれの系においてもドナー・アクセプターの吸収帯および蛍光帯の重なりから期待されるように、D から A₃ に至る一方向の逐次的エネルギー伝達が確認された。カルバゾール環を含む D 層を 300nm のレーザーパルス光で照射することにより、2 層系では先ずカルバゾール (D) の蛍光帯が 350nm に現れ、励起後 100ps の間に A₁ 蛍光が立上がる。3 層系では図 1 に示すように、励起と同時にカルバゾールおよび A₁ 蛍光が 400nm に現れ、D-A₁ 層間のエネルギー移動は速やかに起こっていることがわかる。



The diagram illustrates the structure of the photosynthetic reaction center complex. The top portion shows a chemical structure of a protein with a disulfide bridge (S-S) and a heme b group (O=C-S-). The bottom portion shows the lipid environment, including phospholipids (PE, PC, APC) and the reaction center (RC I, RC II) embedded in a membrane.



— 2 —

次いで、10ps 以後 A_2 蛍光帯が 470nm に現われ 50ps 以後これが主たる蛍光帯となる。4 層系 ($D-A_1-A_2-A_3$) においても同様な逐次的エネルギー伝達をみることができ、カルバゾールの励起によって A_1 , A_2 の蛍光帯がみられ時間とともに強度を増し、60ps 以降最終段のアクセプター A_3 の蛍光帯が立上がる。

次に生体系フィコビルリン・アンテナにおける時間分解蛍光スペクトルをみてみよう (図 2)。⁷⁾ 先ずフィコエリトリン (PE) の励起によって PE の蛍光帯 (578nm) が現れ、次いでフィコシアニン (PC), アロフィコシアニン (APC), Chl a の順で蛍光帯が逐次的に生成し消滅している。これによって光エネルギー伝達は外殻から内殻反応中心に向かって PE-PC-APC-Chl a の経路で、励起後約 0.5ns の間に起こっていることがわかる。

ここでとりあげた人工系および生体系アンテナ色素は、その積層構造においてまた発色団分子の分布構造においてかなり異なっているのであるが、それにもかかわらず、蛍光スペクトルの時間的挙動をみる限り両者は良く対応しており、最外殻層の励起によって各層からの蛍光帯が、同様な時間スケールで次々と現れ消滅していくことが観察され、光励起が逐次的に伝達していくことがわかる。ここには示さないが蛍光の生成減衰曲線をみることによって、さらに詳細な類似点、相違点が明瞭なものとなる。⁶⁾ 先ず共通点についてまとめると、(1)最外殻から内殻へ移るとともに、すなわち人工系では $D-A_1-A_2-A_3$, 生体系では PE-PC-APC-Chl a と移るにつれて蛍光の立上がりに遅延 (20-100ps) があること、(2)最外殻の PE あるいは D 層の実験曲線において寿命の長い指数関数減衰がみられ、光エネルギー伝達に関係しない孤立分子が存在すること、(3)いずれの系においても、一对のドナー、アクセプターの蛍光減衰曲線において、アクセプターの立上がりは速やかであるのに対し、ドナーの減衰は著しく緩やかであること、などが特徴的である。人工系と生体系で異なる点は、光エネルギー伝達の効率である。生体系における効率は 90% に達するのに対して人工系では 50% 程度にとどまる。この原因は発色団分子の分布が生体系では蛋白ポリペプチドネットワークの中でほぼ一定の間隔において均一に分布し、またある場合には一直線上に配列して光エネルギー伝達のうえで特別なチャンネルを形成している。それに対して人工系では発色団分子は不均一分布をしており「island 構造」と呼ばれるようなクラスター状の集合体から成り、単分子膜面内でのエネルギー散逸過程の寄与が大きい。^{8),9)}

各層の蛍光の生成減衰曲線の形は、単純な指数関数減衰ではなく複雑であり、これらの逐次伝達の現象が数式において如何に記述され、またその現象を支配するパラメータに基づいて現象を定量的に理解することが次の問題となる。従来この種の研究は、溶液、結晶など分子の分布に関して 3 次元均一系において研究され、特殊な幾何学的構造体についての研究例は極めて少ない。われわれは先に生体系フィコビルリンにおける光エネルギー伝達に関して、3 次元均一分布系の式における励起エネルギー移動効率の極限の場合に対応する $\exp(-2kt^{1/2})$ 型の速度式で適合さ

せることができたが,⁷⁾ 人工系 LB 多層膜アンテナの実験曲線に対しても同様な型の速度式を用いて適合させることができた。D-A₁, A₁-A₂, A₂-A₃, それぞれのステップの光子伝達はおおよそ 10ps で起きている。

現段階では未だ、逐次的エネルギー伝達の時間的挙動について極めて概括的に観察したに過ぎないのであるが、今後さらに種々条件を変えて速度論について詳細に調べる計画である。また多層膜の中にフォトクロミック反応を利用した可逆応答性単分子膜を組み込むことによって、光子の伝達をスイッチングすることも計画している。

この稿の終りにあたり、この研究課題の意義、進め方などについて有益な助言を下された分子研前所長長倉三郎先生に感謝の意を表します。また生体系アンテナについて共同研究の機会を与えて下さった基生研教授藤田善彦先生に厚く御礼申し上げます。

文 献

- 1) 福田清成, 石井淑夫, 新実験化学講座 (第18巻), 界面とコロイド (井口洋夫編) 丸善 (1977), p. 439.
- 2) 中原弘雄, 日本油化学協会誌, 31巻, 559 (1982).
- 3) 杉 道夫, 斉藤充喜, 福井常勝, 飯島 茂, 固体物理, 17巻, 774, (1982).
- 4) H. Kuhn, D. Möbius and H. Bucher, in *Technique of Chemistry* (eds. by A. Weissberger and B. W. Rossiter), Vol. 1, Part 3B, Wiley, New York, 1972.
- 5) I. Yamazaki, H. Kume, N. Tamai, H. Tsuchiya and K. Oba, *Rev. Sci. Instrum.*, 56, 1187 (1985).
- 6) I. Yamazaki, N. Tamai, T. Yamazaki, M. Mimuro and Y. Fujita, in *Primary Processes in Photobiology* (The 12th Taniguchi Symposium), ed. by T. Kobayashi, Springer Ser. Biochemistry, (Springer, Berlin, Heidelberg 1987), in press.
- 7) I. Yamazaki, M. Mimuro, T. Murao, T. Yamazaki, K. Yoshihara and Y. Fujita, *Photochem. Photobiol.* 39, 233 (1984) .
- 8) I. Yamazaki, N. Tamai and T. Yamazaki, *J. Phys. Chem.*, 91, 3572 (1987).
- 9) N. Tamai, T. Yamazaki and I. Yamazaki, *J. Phys. Chem.*, 91, 841 (1987).

UVSOR ストレジ・リング内 電子ビームの安定化

春 日 俊 夫

分子科学研究所に放射光の利用のみを目的とする電子ストレジ・リング——愛称 UVSOR ストレジ・リング——が完成し、電子ビームの貯蔵に成功したのは昭和58年11月であった。それ以来、ストレジ・リング内のビームの安定化の研究を行なっている。

放射光専用のストレジ・リングに対しては次のような要請がある。

- 1) 電子ビームの電流が大きく寿命が長いこと
- 2) 電子ビームの軌道が安定であること
- 3) ビーム・サイズは出来る限り小さく、且つ変動しないこと

スリット上に電子ビーム（発光点）の像を結ばせ、スリットを通過した光を利用している場合には、ビーム位置の移動、ビーム・サイズの増大・変動は、光量の低下・変動を意味する。

- 4) 光パルスの間隔が一定していること

光パルス間隔が一定でないと時間分解測定時の障害となる。

現実にはこれらの要請に反し、ビームの「質」を悪くする様々な現象が観測されている。ストレジ・リングの完成から現在までに観測・対策を行なってきた現象のうち、

- 1) イオン捕獲現象
- 2) 縦方向カップルド・バンチ不安定

について述べる。なお UVSOR の主なパラメーターを表1に示す。

表1 UVSOR の主なパラメーター

エネルギー	6 0 0 — 7 5 0	MeV
平均半径	8.4 7	m
周 長	5 3. 2	m
偏向半径	2. 2	m
臨界波長	5. 6 9 — 2. 9 2	nm
水平方向チューン	3. 2 5	
鉛直方向チューン	2. 7 5	
加速周波数	9 0. 1	MHz
バンチ数	1 6	

1. イオン捕獲現象

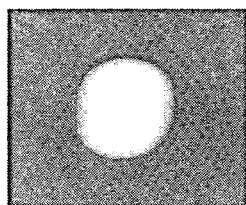
ストレジ・リングを周回している電子ビームは真空容器中に残留している気体分子と衝突してこれをイオン化する。発生したイオンは電子ビームのつくる電場に引き寄せられて電子ビームの近傍に集まる。これがイオン捕獲現象である。捕獲されたイオンにより2つの問題が生じる。1つは、気体分子の平均密度に捕獲されたイオンの密度が加わるので、衝突中心が増加することになり電子ビームの寿命が短くなることである。第2の問題は、イオンのつくる電場によって電子ビームの運動が影響を受けることである。前者は単に寿命を僅かに短くするだけであるが、後者は条件によっては突然ビームを失わせたりビーム・サイズを極端に増大させたりするので是非とも解決しなければならない問題である。

後者がどのようなメカニズムで起こるかを述べる。電子ストレジ・リングには、ビームが設計軌道から大きくはずれないように適度な収束力が与えられている。この収束力によりビームは設計軌道の回りを振動しながら周回している。ビームがリングを一周する間に行なう振動の数は与えられた収束力で決まり、ベータートロン数又はチューンと呼ばれている重要なパラメーターの1つである。このベータートロン数がある特定の値に近づくとビームが失われたりサイズが増大したりする。(共鳴現象と呼ばれている。) さて、イオンがビームの回りに集まると両者は引き合うのでビームに対して収束力として働く。この収束力は、ストレジ・リングに与えられていた所定の収束力により定まっていたベータートロン数を変えてしまう。ベータートロン数が変わり、

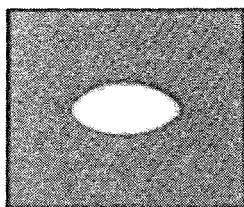
ある共鳴に近づくと前述のようにビームが失われたりサイズが増大したりする。

この現象を抑えるには、ビームからイオンを引き剥すか、あるいはイオン密度を低下させればよい。現在 UVSOR では、電子ビームを上下方向に僅かに(約 0.005mm)振動させイオンをビームから引き剥し、さらにリング内21箇所を設置した電極に吸収させている。

UVSOR のイオン除去装置の効果の例を図1に示す。aはイオン除去装置を停止したときのビームの断面の写真であり、bはイオン除去装置を動作させたときのものである。ビーム・サイズの上下方向の増大が抑えられている様子が良く分かる。



a



b

図1 イオン除去装置の効果
a: イオン除去装置非動作
b: イオン除去装置動作

2. 縦方向カップルド・バンチ不安定

電子ビームが放射光を放出することによって失ったエネルギーは加速空洞内の電磁場から補給される。ビームは加速高周波に同期して加速を受けるので、高周波のある位相のまわりに集団（バンチ）を形成して周回している。UVSOR の場合、このバンチの数は16個である。加速空洞には、温度変化や外力による変形によってずれた共振周波数を元にもどすためのチューナーが取り付けられている。チューナーは、ビームが空洞からエネルギーを持ち去っても空洞内の電場の位相が所定の値となるよう調整する機能も担っている。

さて、ビームの断面（図1参照）の時間的变化を測定していると突然ビームが水平方向に拡がり、ビーム中心の明るさが低下することがある。この現象は、多くの場合加速空洞のチューナーの動きに伴って起こる。またビーム信号のスペクトラムを調べてみると、この現象はビームの進行方向（縦方向と呼んでいる）の振動を伴っている。これらの観測結果から、加速空洞の高次の共振によって引き起こされるカップルド・バンチ不安定であることが推定され、実際に空洞に高次の共振が誘起されていることを観測することにより確かめられた。

ビームは加速空洞を通過するたびに空洞の高次の共振を励起し、電磁場を発生する。空洞のこの共振のQ値が高いと電磁場は次のバンチが到着するまで持続し、このバンチを加速あるいは減速する。もしバンチが加減速を受けたことによってさらに大きな電磁場を空洞に残すとすれば、加減速は連鎖反動的に大きくなる。加減速の結果、16個のバンチのエネルギーは不揃いになり、バンチ毎の軌道も異なってくる。（エネルギーの異なった電子は異なった軌道を回る）

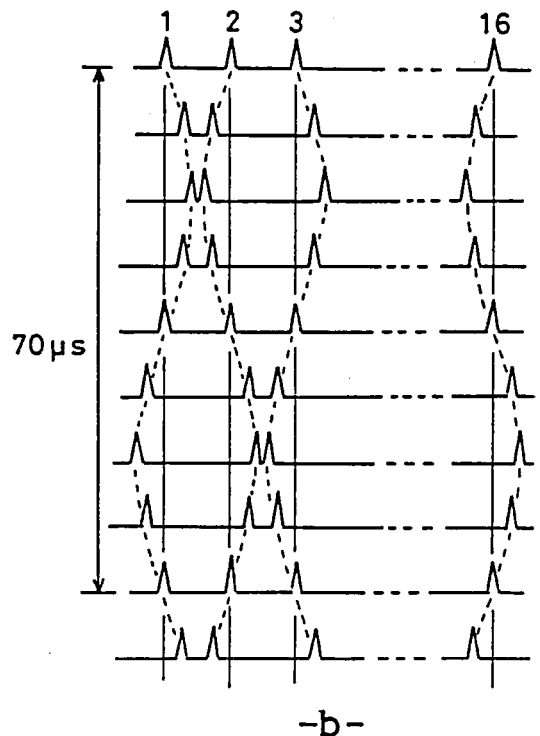
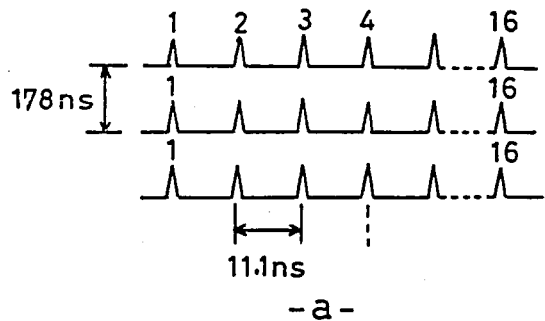


図2 縦方向カップルド・バンチ不安定
a: 不安定が無い場合
b: 不安定が起こった場合

バンチ毎の軌道が異なることに対応して、バンチがリングを一周するのに要する時間も異なりバンチ相互間の時間間隔も異なることになる。この様子を模式的に描いたのが図 2 である。この図はリングの或る位置でビームを観測していた時に得られる波形である。或いは、ビーム・ラインで放射光を観測していたときの光のパルス列と考えても良い。この不安定が起らない場合は、16個のバンチは約 11.1ns 毎に等間隔で到着し、178ns ($11.1\text{ns} \times 16$) 後には最初のバンチが再び到着する (図 a)。この不安定が起ると、各々のバンチの到着予定時刻に対して実際の到着が前後するようになり (図 b)、前述の要請 3)、4) に反することになる。

この不安定は各々のバンチのエネルギーに不揃いが生じることによるものであるからこの不揃いを何等かの方法で修正してやれば抑制することができる。各々のバンチのエネルギーの平均値からのずれを検出し、エネルギーの高いバンチは減速し低いものは加速するフィード・バック回路系を試作し、この不安定の抑制のテストを開始した。実験的には抑制に成功しており、定常的な運転での利用に向かったのテストを続行中である。

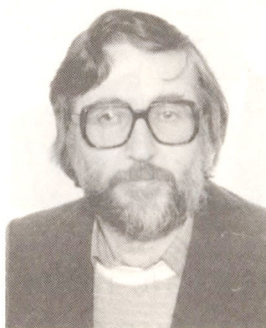
UVSOR ストレジ・リング内の電子ビームの研究の 2 つの例を述べた。これ以外にもビームの性質を悪化させる様々な現象がある。その内の幾つかは解決がついているが、全く手付かずのものもある。更に、ユーザーからビームの位置の長時間にわたる安定性に対する疑問がだされている。これに対しては回答の目処もたっていない状態である。今後とも解決の努力を続けるつもりである。

外国人客員教官の紹介

分子エネルギー変換研究部門

Hans Toftlund 助教授 (デンマーク オデンセ大学講師)

Toftlund 博士は外国人客員助教授として昭和62年7月18日より昭和63年3月17日まで9ヶ月間分子研に滞在される。同氏は1945年生れで、コペンハーゲン大学を卒業後、Pedersen 教授の

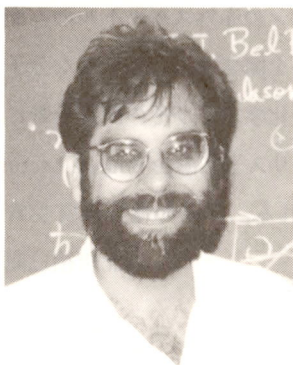


下で錯塩化学を専攻して1972年博士の学位を取得された。1972年からコペンハーゲンの農業大学化学教室で助手、1975年よりオデンセ大学大学講師（現職）となられた。同氏は錯塩化学の広い領域で研究業績を挙げて来られたが、一貫した研究の基本方針は、新しい物性、反応性をもった新物質を合成し、その characterization を行うといったものである。既に、スピン・クロスオーバー鉄錯体、金属酵素の活性部位のモデル化合物など興味ある新化合物の合成を発表されている。（木田茂夫記）

極端紫外光研究部門

Peter Guy Wolynes 教授 (アメリカ イリノイ大学教授)

ウォリネス教授はイリノイ大学化学及び物理科に於て、溶液の構造とダイナミックス、溶液内化学反応の動力学的理論的研究を行ってきています。同教授は1953年にシカゴで生れ、インディアナ大学を卒業後、若干18才でハーバード大学の大学院に入り、ロイ・ゴードン教授のもとで Ph.D



を取得し、MIT の博士研究員を経て、1976年にハーバード大学の助教授、1980年にイリノイ大学に移り、1983年より正教授になり現在に至っています。1982年には招へい外国人として分子研に3ヶ月滞在したので、同氏をご存知の人も多いと思います。研究は、流体力学的モデルや多体系に応用できる量子力学的記述法を用いて、溶液中のトンネル効果の問題や、エネルギー緩和現象、ガラス状態の研究や、生体内化学反応過程の理論的研究と多義に亘っており、幅の広い研究者ですので、実験家の人にも Discussion に訪れて下さい。（大峰 巖記）

受賞者紹介

廣田榮治教授に日本化学会賞

分子構造研究系の主幹である廣田榮治教授が“高分解能分光法による短寿命分子の構造研究”の業績に対して、昭和62年度日本化学会賞を受賞された。分子科学研究所にとって非常にうれしいことであった。

廣田教授は、東大理学部化学の森野研究室でのマイクロ波分光の研究をスタートに、これまで一貫して精密構造化学の実験的および理論的研究を展開してこられた。最初の頃は、振動励起状態にある分子の回転スペクトルを測定して振動回転相互作用を解析するところに特色を発揮された。回転異性体をもつ複雑な分子についても解析を進められ、内部回転ポテンシャルに関する情報を得られた。対称性が高く双極子モーメントをもたない分子はマイクロ波分光にかからないのであるが、一部の原子を同位体置換することによって対称性を下げ、回転スペクトルが現われるようにして研究を進められた。それらに加え、1960年頃からフリーラジカルや分子イオン等の短寿命分子の構造解析を始められ、それ用のマイクロ波分光装置を自作された。後に分子研に移られ、 $\text{CH}_3\text{O}\cdot$ や $\text{CH}_2=\text{CHO}\cdot$ のような多原子ラジカルを検出できるまで装置を改良された。また半導体レーザーを用いた高感度高分解能赤外分光システムを組みあげ、化学反応の過程で生成する短寿命分子の赤外スペクトルの観測に成功された。特に CH_3 ラジカルの赤外スペクトルは最初のものであった。放電により反応中間体をつくると、分子イオンがフリーラジカルと同時にできる場合があるが、そういうときに分子イオンの赤外スペクトルのみを選択的に測定する方法としてホローカソード吸収セル用の磁場変調法を開発し、いろいろな分子イオンの赤外スペクトルを確立された。このように廣田教授は、構造化学およびその関連分野に卓越した業績をあげられ、これまでに化学会進歩賞、仁科賞、イギリス王立協会 Bourke Lectureship、ハーバード大学 Kistiakowsky Lectureship 等を受賞しておられる。今回の化学会賞受賞を心よりお祝いすると共に、益々の御活躍をお願いしたい。



(北川禎三記)

岡崎コンファレンス報告

第28回岡崎コンファレンス

Solid State Chemistry with VUV Synchrotron Radiation

分子研 井 口 洋 夫

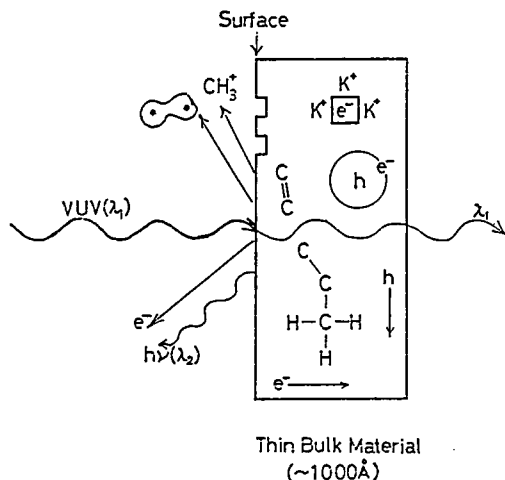
渡 辺 誠

広島大理 関 一 彦

極端紫外光実験施設 (UVSOR) を用いた研究が軌道に乗ってきたこの時を機会に、シンクロトロン放射 (SOR) による研究の一つの重要な分野である固体の分光学および光化学を取り上げ、今後の発展の方向を探った。

物質の振動子強度の大半は極端紫外領域 (5~5keV) に分布しており、これが大きな吸収係数を与える所以である。従って極端紫外光は表面からおよそ 1000 Å 程度しか侵入できないので、この光と物質の相互作用では表面現象を無視できないが、今回は主としてバルクな固体との相互作用に力点を置いた。又、EXAFS は第22回岡崎コンファレンスで取り上げられたので今回は割愛した。極端紫外光を固体に照射すると自由電子、正孔、励起子等を発生し、その後、下図に模式的に示すような種々の現象が起こる。今回のトピックスは分光、光電子分光、時間分解蛍光分光、自己束縛励起子・格子欠陥生成、光脱離、光分解、固体内光化学反応および極端紫外光による新しい物質の作成に関する将来展望であった。対象は無機、有機の固体、液体、生体物質さらに一

部気体に及んだ。



極端紫外光による新しい物質の作成についてはまだまだこれからという感じであったが、3日間討論は活発に行なわれ、またレセプション、休憩、見学等を通して親睦も深まったと思う(文中に休憩のスナップ写真を掲載しておく)。招待講演6、一般講演19であった。アブストラクトおよび参加者名簿はUVSOR Activity Report 1986に掲載した。以下ではプログラムと会議の簡単な紹介を載せる。

February 5

- 12 : 30—13 : 30 **Registration**
- 13 : 30—13 : 40 **Opening Address** S. Nagakura (IMS)
 Spectroscopy T. Murata (Kyoto Univ. Educa.) Presiding
- 13 : 40—14 : 10 K. Nakamura (Kyoto Univ.), "Core Excitons in Orthorhombic Indium Halides"
- 14 : 10—14 : 40 M. Taniguchi (Univ. of Tokyo), "Electron-Core-Hole Interaction in Layered Semiconductors"
- 14 : 40—15 : 10 N. Kosugi (Univ. of Tokyo), "Near Edge Structure of Coordination Compounds"
- 15 : 10—15 : 40 T. Fujikawa (Yokohama National Univ.), "Theory and Applications of Multiple Scattering in Solids"
- 15 : 40—16 : 10 Group Photograph
 Coffee Break
- Photoelectron Spectroscopy** T. Ishii (Univ. of Tokyo) Presiding
- 16 : 10—16 : 40 T. Takahashi (Tohoku Univ.), "Angle-Resolved Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy of Alkali-Metal Graphite Intercalation Compounds"
- 16 : 40—17 : 10 K. Seki (Hiroshima Univ.), "Photoelectron Spectroscopy of Organic Materials"
- 17 : 10—18 : 10 V. Saile (HASYLAB), "Two-Photon Photoemission from Molecular Crystals Combining Synchrotron Radiation with a Laser"
- 18 : 30—20 : 00 Reception, Careteria 2F

February 6

- Time Resolved Spectroscopy (I)** T. Okada (Osaka Univ.) Presiding
- 9 : 00—10 : 00 I. Munro (Daresbury Lab.), "Time Resolved Fluorescence Anisotropy of Biochemical Systems"
- 10 : 00—10 : 30 Y. Hatano (Tokyo Inst. Tech.), "Time Resolved Fluorescence Spectroscopy of Liquid Alkanes"
- 10 : 30—11 : 00 Coffee Break
- Time Resolved Spectroscopy (II)** T. Kobayashi (Univ. of Tokyo) Presiding
- 11 : 00—12 : 00 J. Klein (Strasbourg Univ.), "Relaxation of Highly Excited States in Molecular Solids and Liquids"
- 12 : 00—12 : 30 T. Mitani (IMS), "Time Resolved Fluorescence and Modulation Spectroscopies of Molecular Crystals"

- 12 : 30—13 : 30 Lunch
- Self-Trapped Exciton, Defect Formation** H. Nakagawa (Fukui Univ.)
Presiding
- 13 : 30—14 : 00 K. Nasu (IMS), "Dynamics of Tunneling and Relaxation from Free State to Self-Localized State of Exciton"
- 14 : 00—15 : 00 F. C. Brown (Illinois Univ.), "Defect Formation in Solids by Vacuum Ultraviolet Synchrotron Radiation"
- 15 : 00—15 : 30 Coffee Break
- Photodesorption** S. Ohtani (Nagoya Univ.) Presiding
- 15 : 30—16 : 30 R. Stockbauer (NBS), "Ion Desorption from Surfaces"
- 16 : 30—17 : 00 A. Ichimiya (Nagoya Univ.), "Photon Stimulated Desorption from LiF Surface"
- 17 : 00—17 : 30 H. Kanzaki (Fuji Photo Film Co.), "Photon-Stimulated Desorption of Neutrals from Silver and Alkali Halides"
- Introduction to UVSOR Facility** I. Koyano (IMS) Presiding
- 17 : 30—18 : 00 M. Watanabe (IMS), "Introduction to UVSOR Facility"
- 18 : 00—18 : 30 UVSOR Tour

February 7

- Photofragmentation** J. R. Grover (IMS & BNL) Presiding
- 9 : 00—9 : 20 S. Nagaoka (IMS), "Investigation of Fragmentation Processes Following Core Photoionization of Organometallic Molecules in the Vapor Phase"
- 9 : 20—9 : 30 H. Shiromaru (IMS), "Measurements of H^+ Formation for Hydrocarbons"
- 9 : 30—10 : 30 T. K. Sham (BNL), "Site-Selective Photofragmentation of Molecules and Its Implication to VUV Induced Solid State and Surface Chemical Processes"
- 10 : 30—11 : 00 Coffee Break
- Photochemistry in Solids** Y. Maruyama (IMS) Presiding
- 11 : 00—11 : 30 H. Masuhara (Kyoto Inst. Tech.), "Photochemistry and Morphological Changes of Polymer and Deposited Organic Films"
- 11 : 30—12 : 00 S. Morita, H. Yamada and S. Hattori (Nagoya Univ.), "Wavelength Dependence of Chemical Process in X-Ray Resist"
- 12 : 00—12 : 30 T. Ito (Univ. of Tokyo), "VUV Photodegradation of Biomolecules DNA, ATP and Oligonucleotide"

12:30-13:30 Lunch

Prospective Projects K. Kimura (IMS) Presiding

13:30-14:00 K. Shobatake (IMS), "Photo-Excited Etching Reactions of Silicon Crystals"

14:00-14:30 A. Yoshida (Toyohashi Univ. Tech.), "Thin Film Deposition by VUV Synchrotron Radiation"

14:30-15:00 H. Inokuchi (IMS), "Concluding Remark - Application of VUV Photons to Organic Chemistry -"

会議は2月5日の午後から始まった。長倉所長に急な所用が入り、opening address はレセプションの席で行われ、会議の開会は渡辺が宣した。会議の第一番目の話題は内殻吸収の吸収端近傍の構造の解析であった。中村はInBr および InI の2-30eV 領域の偏光反射スペクトルについて報告した。20eV 以下の構造をバンド計算と対比させ、20eV 付近のIn4d 内殻からの励起子吸収を結晶場におけるIn イオン内遷移として解析した。谷口は黒燐構造を持つ半導体の10-150eV での光電子収量スペクトルを測定し、陰イオン内殻からの吸収では伝導帯の状態密度が反映され、陽イオン内殻からの吸収では励起子構造が表われることを見出した。また内殻励起子の緩和過程として、直接再結合過程とオージェ過程があることを示した。小杉は3d 遷移金属錯体(Fe(CO)₅ 他)の金属のK 吸収端近傍の構造を測定し、イオン化エネルギーより低エネルギー側の構造を配位子場理論に基づいて解析した。特に1s → Rydberg 遷移、1s → 3d, 4p^{*} 遷移等による構造を同定した。藤川は多重散乱理論を紹介し、これを用いてイオン化ポテンシャルより高くEXAFS の見える領域より低いエネルギー領域のスペクトルを解析した。例としてハロゲンをドーブしたポリアセチレン等を取り上げ、この理論が局所的な分子構造や電荷分布の解析に有用であることを示した。

午後の後半の話題は光電子分光であった。高橋はC₈K 等の黒鉛層間化合物の角度分解光電子分光測定を行ってバンド構造を実験的に求め、理論計算と比較した。さらに層間にあるK の4s 電子は完全にイオン化しているのではなく、π^{*}バンドと層間バンドにほぼ等量で分布していることを示した。関は高分子の分子鎖上に広がった電子状態を光電子分光法で調べ、理論計算



を対比した。対象として広がった σ 電子系を持つポリエチレン、ポリシランや広がった π 電子系を持つフェニル基を主鎖に含む高分子を取り上げた。またジアセチレン LB 膜の光重合過程を調べた。Saile はまず SOR とレーザの同時照射による研究を概括した。この手法を用いると励起状態からの遷移や2光子吸収等の研究が可能となるが、現在のところ実験例は少ないとのことである。ついで金属フタロシアニンと固体希ガスについての実験を報告した。固体希ガスでは電子を SOR によって励起子準位あるいは伝導帯の底へ励起し、その状態からレーザによって真空レベル以上へ遷移させ、電子のエネルギー分布を測定し、励起子の緩和エネルギーやバンドキャップ等を正確に求めた。さらに光電子分光から求めた緩和状態の寿命と蛍光測定から求めたものが異なることから、励起子によって生成される新しいタイプのセンターの可能性を示唆した。

2 日目の午前前半、後半とも SOR のパルス性（パルス幅；サブナノ秒）を用いた時間分解蛍光分光についての講演が行なわれた。Munro は SOR の偏光紫外線を大きい分子に照射し、蛍光の偏光度の時間変化を追いかけた。この測定は大きな分子の変形のしやすさ、特定部分の分子内回転、立体配座の変化あるいは溶媒の中での運動を調べる上で有力である。例として蛋白質中の単一アミノ酸の回転自由度の測定から得られた結果について述べた。ヌクレアーゼ B の中のトリプトファン残基の回転相関時間は 9.85ns であり、これにより蛋白質が全体として回転することを示唆した。一方ミエリン蛋白では相関時間は 0.09 ns および 1.26ns と短く、ミエリンが random coil として振舞っていると解釈した。この手法はさらに生体膜の柔軟性の研究等に対しても有用であることが述べられた。旗野は液体アルカンの蛍光励起スペクトルおよび蛍光の寿命について述べた。寿命は物質毎に異なっており 1~4ns にわたり、用いた励起光の範囲 (7~10eV) ではそれぞれの寿命は変化しないことを見出した。Klein は分子性固体および液体の高励起状態の緩和過程を、種々の測定法と組合せた時間分解蛍光測定で調べた。6~40eV の光で励起した高励起状態



は今まではほとんど調べられていなかった。緩和過程として孤立原子内の過程の他に格子振動、電荷移動および2つの1重項や3重項からなる状態 (biexcitonic state) への遷移がある。これらの過程を蛍光の光子-光子コインシデンス法、磁場・電場変調法および光子-光電子コインシデンス法等で同定した。測定試料はアントラセン、p-ターフェニル、シクロヘキサン等であった。三谷もアントラセンの蛍光寿命を測定し、励起光が励起子エネルギーの2倍以上のエネルギー領域において、従来観測されていた10ns程度の成分の他に500psより速い成分を見出し、この成分を結晶表面における excitonic polariton の消滅によるものとの解釈を示した。関連して岩佐は電場および磁場変調蛍光測定の結果をコメントした。

午後の前半は、自己束縛励起子と格子欠陥の生成の講演が行なわれた。那須は光によって生成した励起子が、その自由 (F) 状態から自己局在化 (S) 状態まで緩和する動力学について述べた。主な点はFS間トンネル過程の確率とトンネルの出口からS状態の谷底まで緩和する際の確率を非断熱効果をも入れて評価する事であった。彼等は多段階的非断熱遷移理論を開発し、これによってピレンの時間分解蛍光実験の結果等が良く説明された。Brownは5eV以上の単色光がアルカリハライドにF中心を生成する効率を、少量のF中心まで検出可能なレーザ誘起蛍光法を開発して測定した。5~1500eV励起では1ケのF中心を作るのにおよそ1keV程度の光エネルギーが必要であることが分った。特にKBrでは、励起子吸収帯の低エネルギー側の光によって出来る1ケの自己束縛励起子が、0.007ケのF中心に変換することを見出した。吸収係数の大きい励起子吸収帯や60eV以下の構造では、生成効率が鋭く減少した。これを吸収係数が大きいため光の侵入の深さが小さく、従って電子-正孔対によるF中心生成が、表面での2次電子放出や光脱離の過程と競合しているためとした。さらに臭素のK吸収端を越すと生成効率が大幅に増加することを見出し、これをオージェ過程による電子-正孔対の増殖のためと解釈した。

午後の後半の話題は光脱離であった。Stockbauerは内殻励起による表面からのイオンの光脱離について報告した。光脱離は格子欠陥の生成と密接な関係がある。金属イオンが最大価数をとるイオン結晶の金属イオン内殻を励起すると、Knotek-Feibelman機構が起こる。例えばTiO₂でTiの3d内殻を励起すると、2つのイオンにまたがるオージェ過程により価電子帯に2ケあるいは3ケの正孔ができ、そのためOやO⁺が発生しそれらは束縛力を失ってあるいは反発力により脱離する。しかしながらMgOにおけるMgの内殻励起ではO⁺は観測できなかった。従って光脱離では電子的過程だけではなく表面の幾何学的形状も重要な役割を果していると解釈した。さらに共有結合の場合や2次電子の影響等についても論じた。一宮はLiFのLiのK吸収端前後の光によって脱離するLi⁺、F⁺、LiおよびHFを観測した。そして脱離の主たる過程は、内殻励起されたLi⁺がイオン間オージェ過程を通してLiとF⁺を生む過程であり、内殻励起されたLi⁺が基底状態に戻るとともにF⁻がFとなる過程は顕著ではないと述べた。神前は価電子励起 (ハ

ロゲンランプ等を利用) による中性原子・分子の脱離を報告した。アルカリハライドではハロゲンおよびアルカリ原子が観測され、これを表面近傍の自己局在化した正孔と F 中心の生成によるものとした。銀ハライドではハロゲン分子が観測された。さらに微結晶やゼラチン膜がある場合には様相が大きく変わることを示した。

3 日目午前の議論は光分解についてであった。長岡は $\text{Pb}(\text{CH}_3)_4$ 等の有機金属化合物の価電子および金属の浅い d 内殻の励起による種々の光分解片の生成効率を調べた。金属イオンは他の分解片と異なり内殻励起によって生成されることを見出した。城丸は炭化水素の R-H 結合エネルギーを求めるのに、 H^+ の生成エネルギーを実測しこれと H のイオン化エネルギー (13.6eV) の差をとる正確な方法を報告した。(従来は R^+ の生成エネルギーと R のイオン化エネルギーをもとに求めた。) Sham は有機気体分子の内殻励起による site-selective な光分解について述べた。炭素原子の K 内殻の結合エネルギーは炭素原子の分子内での位置によって異なる。従って励起エネルギーを選択することによって特定の結合を切断出来る可能性がある。内殻正孔の緩和過程は軽元素ではオージェ過程が主たるものである。KVV 過程の結果価電子準位に 2 つの正孔ができ、これらが分子内の結合に関与する位置に局在していると、クーロン反発力で結合の切断が起こる。具体的には例えばアセトンの C の K 内殻の励起を行い、 C^+ , H^+ , O^+ や CH_3^+ , CH_3CO^+ , $(\text{CH}_3)_2\text{CO}^+$ 等の生成効率の励起エネルギー依存性を求め、カルボニル基の炭素を励起することによって C^+ や O^+ が多く出来ることを示した。さらにこの手法の高分子への応用等についても言及した。

午後の後半の話題は固体内の光化学であった。増原は π 電子系を含む有機固体のレーザー照射による形態変化と、これら物質の光物理的、光化学的過程との相関を調べた。 $\omega-1$ -ピレニル脂肪酸蒸着膜のレーザーアニリングに伴う集合状態の変化を蛍光法によって観測したこと、ドーブされたメチルメタクリル酸膜のエキシマーレーザーによるエッチングの効率と発色団による吸収の関連等について述べた。森田はフォトレジストが SOR の照射によって削れていく現象 (self-development) を調べ、SOR の直接照射で起こる飽和現象がポリイミド膜や Be 箔を透過した SOR を用いると起らないことを見出した。また照射中の分解片や照射後の赤外スペクトルを測定し、上記効果を主鎖、側鎖の切断との関連を調べた。伊藤は生体物質の真空紫外単色光照射による損傷について報告した。DNA では主鎖が切断されること、ATP では塩基はこわれず糖がこわれること、オリゴヌクレオチドでは励起の第 1 過程によらず特別のサイトが切断されること等を見出し、生体の放射線損傷過程の解明の重要な手がかりを得た。

最終日午後は、物質作成に関する展望を行った。正畠は燐を多くドーブしたシリコン多結晶の表面を、塩素ガスと SOR によってエッチする実験 (photo-assisted etching) を報告した。転写パターンとしてニッケルメッシュを用い、そのパターンを深さ 900 Å までエッチすることができた。

今後このような実験を進めるにあたって、気体および固体表面の光化学反応の基礎的研究の重要性を指摘した。吉田はSORによるCVDについて報告した。まず固体電子素子として重要な役割を持つ薄膜の種々の作成法を解説し、ついでフォトン・ファクトリーで行なわれたSOR-CVDによるアモルファスSi:H作成の実験を紹介し今後の自分達の計画について述べた。最後に井口はこの会議のまとめを行った。まずUVSORが分子研という目的指向の研究所に設置されている特徴を生かして今後とも研究を遂行していきたいと述べた後、将来の1つの方向としてSORによって特に有機物の結合を切断したり接続したりして新しい物質を合成する研究があり、今後この方向への研究が盛んになることを希望してしめくくった。



第29回岡崎コンファレンス

Molecular Aspects for Ion-Ion and Ion-Solvent Interactions in Solution

東工大総合理工 大 瀧 仁 志

国際基督教大 齋 藤 一 夫

分 子 研 石 黒 慎 一

分子間相互作用は化学反応のもっとも基本となる概念で、気相及び固相における分子間相互作用に関してはこれまで多くの研究がなされている。しかし液体及び溶液中における分子間相互作用については上記2相中の問題に比べて極めてわずかな知見しか得られてなく、また測定法や理論の上にも未解決の点が多い。

溶液化学はこの10年ほどのうちに急速に進展した学問領域のひとつで、従来の古典的方法論による物理化学の一分野から、各種の近代的測定法と理論を適用した新しい境界領域へと変ぼうを遂げてきた領域である。比較的小規模の分野ではあるものの、日本は世界の中でもっとも重要な位置を占めるひとつの国で、その研究成果が大いに注目されている。

この時点において、これまでの28回の岡崎コンファレンスでは取り上げられなかった溶液中におけるイオン-イオン及びイオン-溶媒相互作用について、分子論的立場から考察しようというのが今回の岡崎コンファレンスの趣旨であった。気体のように離れている分子間の相互作用が無視できるような系とは異なり、また原子や分子が規則的に配列しているような固体（結晶）とも異なり、分子の集合に関し甚だ複雑な形態を保つ液体及び溶液は常に実験データの解釈に困難をもたらしてきた。各種方法論の発展によりその問題点にかなりのメスを加えることができるようになった。また研究対象も気相クラスター、融体、ガラスなど気相、固相とつながりをもつ系に拡張されてきている。このような状況下において、いくつかの主題のもとに一層深く突っ込んだ議論がなされることは、化学の基本的概念の改質に極めて重要なことと考えられた。

本コンファレンスには4人の外国人が講演者として招かれた。そのため、溶液内におけるイオン-イオン及びイオン-溶媒分子相互作用について、それぞれに主題講演をお願いし、4つの主題を設定した。

- 1) 主として回折法を用いる溶液中の分子配置及び配向に関する研究。
- 2) 分子動力学法及び分子軌道法を用いる分子間相互作用。
- 3) 溶液中のイオン及び分子の移動過程に関する動力学。
- 4) 溶液内化学反応に関する分子論的考察。

これらの4主題はそれぞれ独立ではなく、むしろ互いに極めて密接な関係をもっており、主題間にわたってしばしば成果の引用、討論が行われた。以下にプログラムと講演の内容の概略を紹介する。

プログラム (*印は連名の際の講演者)

May 26 (Tuesday)

13 : 00—13 : 20 H. Inokuchi (IMS), "Welcome Message"

H. Ohtaki Presiding

13 : 20—14 : 20 G. W. Neilson (Bristol Univ., UK), "Diffraction Studies of Aqueous Ionic Solutions"

E. Spohr Presiding

14 : 20—15 : 00 T. Yamaguchi (Fukuoka Univ.), "Structure of Liquid Water in the Temperature Range of 25—200°C by the Neutron Diffraction Method"

15 : 00—15 : 30 Coffee Break

H. Kanno Presiding

15 : 30—16 : 10 H. Ohtaki (Tokyo Inst. Technol.), "The Structure of Hydrated Ions in Solution Studied by Means of X-Ray Diffraction and Molecular Dynamics Simulation"

16 : 10—16 : 50 K. Ichikawa * and Y. Kameda (Hokkaido Univ.), "Environment of Cation and Conformation among Polyatomic Species in Liquid State" Y. Taniguchi Presiding

16 : 50—17 : 30 H. Wakita (Fukuoka Univ.), "X-Ray Diffraction and EXAFS Studies on the Structure of Halogeno and Solvated Complexes of Copper (II) Ion in Solution"

17 : 30—18 : 10 N. Nishi (IMS), "Conversion of Liquids to Cluster Beams: Mass Spectrometric Analyses of Binary Solutions in Terms of Clusters"

18 : 30—20 : 30 Reception

May 27 (Wednesday)

K. Nakanishi Presiding

9 : 00—10 : 00 P. J. Rossky (Univ. Texas at Austin, USA), "Counterion Distributions and Dynamics in DNA/Salt Solutions"

10 : 00—10 : 30 Coffee Break

T. Radnai Presiding

10 : 30—11 : 10 I. Ohmine * and H. Tanaka (IMS), "A Theoretical Study of Water Dynamics"

and Photochemical Reactions”

- 11 : 10—11 : 50 I. Okada (Tokyo Inst. Technol.), “The Chemla Effect in Molten Salt Mixtures Studied by Experiments and Molecular Dynamics Simulation”

S. Kida Presiding

- 11 : 50—12 : 30 K. Hashimoto, N. Yoda and S. Iwata * (Keio Univ.), “Theoretical Studies of the Hydrated Be Ion”

- 12 : 30—14 : 00 Lunch

M. Iwaizumi Presiding

- 14 : 00—15 : 00 J. M. G. Barthel (Regensburg Univ., FRG), “Transport Properties of Electrolyte Solutions from Infinite Dilution to Saturation”

T. Dodo Presiding

- 15 : 00—15 : 40 H. Nomura (Nagoya Univ.), “Dynamic Studies of Ion-Ion Interactions by Means of Raman and Ultrasonic Spectroscopies”

- 15 : 40—16 : 10 Coffee Break

K. Tanaka Presiding

- 16 : 10—16 : 50 M. Nakahara (Kyoto Univ.), “The Effect of Dielectric Friction on the Electrolyte Dynamics”

- 16 : 50—17 : 30 Y. Masuda (Tokyo Metropolitan Univ.), “Microdynamics of Hydration Studied by NMR Relaxation Method”

- 17 : 30—18 : 30 A Tour in IMS: UV Synchrotron Orbital Radiation Facility and others

May 28 (Thursday)

M. Tanaka Presiding

- 9 : 00—10 : 00 Y. Ducommun (Lausanne Univ., Switzerland), “Mechanisms of Solvent Exchange and Complex Formation on Metal Ions: The High Pressure Approach”

M. Yokoi Presiding

- 10 : 00—10 : 40 S. Funahashi (Nagoya Univ.), “Activation Volumes and Mechanisms for Complexation in Solution”

- 10 : 40—11 : 10 Coffee Break

T. Tominaga Presiding

- 11 : 10—11 : 50 S. Ishiguro (IMS), “Preferential Solvation and Complexation of Copper (II) Ion in Nonaqueous Solvent Mixtures”

11:50-12:30 K. Sawada (Niigata Univ.), "Structure and Bonding of Metal-Ligand Complexes of Transition Metals with Pyridine Bases"

S. Ishiguro Presiding

12:30-13:10 K. Hiraoka (Yamanashi Univ.), "Gas-Phase Solvation of Halide Ion: Across the Gas Phase into the Solution"

13:10-13:30 K. Saito (IMS/Internatl. Christian Univ.), "Closing Remarks"

招待講演者のひとりであるブリストル大学の G. W. Neilson 博士は特に同位体を用いた中性子回折法によるイオンの周囲の水分子の配向に関してすぐれた成果を挙げており、共同研究者の J. E. Enderby 教授（現在グルノーブル，ラウエ・ランジェヴァン研究所長）とともに世界的に知られた研究者であるが、同博士は中性子回折法を用いた電解質水溶液の構造に関する最近の成果をまとめて発表された。特に中性子回折法のメリット及び他の研究法との比較，理論及びデータ解析上の問題点について卒直に意見を述べられ，この分野に関心をもつ研究者は多く，沢山の質問がとび出し，討論は活発であった。

山口敏男氏は水の構造に関して100℃以上の領域において中性子回折法が用いられたことがない点を指摘し，高温（加圧）領域において測定した中性子回折法の結果を示した。水分子の配位数等の結果から，水構造に対して従来提案されているモデル構造のうち，連続体モデルよりは水素結合が切断されるモデル（2状態モデル）の方がよく結果を説明できると述べた。

大瀧仁志氏はX線回折法と分子動力学法を併用し，両者から得られた結果を比較しながら Li^+ ， Cl^- ， Co^+ ， Be^{2+} ， I^- などの水和構造及び $(\text{LiCl})_n$ 及び $(\text{CsI})_n$ イオン対（クラスター）の構造を考察した。特に Be^{2+} イオンはのちの講演にある岩田教授（慶應義塾大）の研究と密接な関係があることを述べ，同教授による理論的考察が実験とよく一致したことを述べた。

市川和彦氏は Neilson 博士らと同様の手法を用いて Al^{3+} 及び Li^+ を含む塩化物融体中の金属イオンの周囲の構造を中性子回折法により検討し， Li^+ イオンの周囲の Cl^- イオンの数や原子間距離を決定した。また得られた結果を硝酸塩における結果と比較した。

脇田久伸氏は水溶液及びメタノール，エタノール溶液中の銅（Ⅱ）イオンと塩化物イオンの相互作用をX線回折法及びEXAFS法を用いて決定した。非水溶液中のイオンの溶媒和構造に関する知見は極めて乏しいので，この成果は貴重である。

西信之氏はノズルから噴出された液体が瞬時に低温にまで冷却され且つクラスター程度の微小粒子にまで分散されることを利用し，質量分析法を組み合わせたユニークな方法で液体クラスターの組成を決定し，水分子間及び水-アルコール分子間相互作用の強さを比較検討した。エタノールが40-45%（体積）の際にもっとも強い相互作用があることを見出している。

P. J. Rossky 博士は分子動力学法に関する第一人者のひとりであるが、今回は DNA の周囲に存在する対イオンの分布に関するシミュレーションの結果を発表した。複雑な DNA 分子をやや単純なモデルに置きかえ、DNA と Na^+ あるいは Mg^{2+} イオンとの相互作用を論じた。

大峯巖氏は光化学反応に及ぼす溶媒分子の挙動と水における分子間相互作用を分子動力学法を用いて検討した。特に水の分子間相互作用に関しては美しいスライドとビデオテープによってその動的挙動を視覚化し、参加者の注目を引いた。

岡田勲氏は混合塩融体中で半径の大きいイオンがむしろ速く移動する場合がある、いわゆる Chemla 効果について、実験と分子動力学シミュレーションの両面から考察し、従来しばしば誤った解釈がなされている Chemla 効果に対して明解な回答を提出した。

岩田末廣氏は分子軌道計算により、ベリリウム (II) イオンの 4 水和構造が安定で、6 水和構造をとらないこと、また 4 水和構造をとる大きな原因のひとつが水分子から Be^{2+} イオンへの電子供与によること、さらに供与された電子は Be^{2+} イオンの空の p 軌道に入ることを示し、イオンの水和における電子供与の重要性を示した。このことは分子動力学シミュレーションにおける計算法の問題点を浮き彫りにしたもので、重要な指摘であった。

招待講演者中でもっとも重厚味のある J. M. G. Barthel 教授は古典的な統計力学に基づいて新しい実験結果をいかに注意深く導入すべきかを詳細な考察によって示し、統計力学における分子論的考察の重要性を指摘した。ことに熱力学及びイオンの移動過程の考察において、溶質と溶媒との分子レベルでの相互作用がいかに重要であり、また従来しばしばあいまいに放置されている各種パラメータの分子論的意義を明らかにし、溶液の統計力学における今後のあり方を示唆した。

野村浩康氏は LiSCN 水溶液及び DMF 溶液を例にとり、 SCN^- イオンと溶媒分子との相互作用をラマンスペクトル及び超音波法を用いて研究した。 SCN^- の振動スペクトルから水及び DMF 分子は SCN^- イオン中の N 原子の部分に溶媒和し、水よりもむしろ DMF の方が強く溶媒和すること、並びに DMF 溶液中で $\text{Li}^+ \cdot \text{NCS}^-$ イオン対が生成することを指摘した。水-DMF 混合溶媒中での選択溶媒和についても考察した。

中原勝氏は Barthel 教授の講演に密接に関連のある誘電媒体中のイオンの移動について、誘電摩擦の理論に基づいて考察した。従来の理論には十分とり込まれていなかった誘電摩擦の考えを電解質溶液に盛り込み、今後の発展が期待された。

益田祐一氏は NMR 緩和法を用いて溶液中のイオン及び溶媒和分子の並進ならびに回転に関する微視的挙動を測定した。益田氏は今回の発表者の中では最年少で、国際会議での発表ははじめての体験の由であったが、内容はなかなか充実しており、今後場数をこなしてさらに立派な発表がなされることが期待された。

招待講演者中の最年少者であるローザンヌ大学の Y. Ducommun 博士は Merbach 教授との共同

研究の成果を発表したが、高圧 NMR 法による溶媒和分子の交換反応機構を活性化体積の測定から考察した。高圧 NMR 法という、多くの測定上の困難さを伴うこの方法を開発した Merbach 教授らのグループは、溶液内反応機構を研究する人々にとっては敬意の的であるが、今回はその結果の中から Be^{2+} , Sc^{3+} , In^{3+} , Ga^{3+} などの溶媒和イオンの溶媒交換反応機構及び各種 2 価遷移金属イオンの錯形成反応の機構についての最近の結果が紹介された。活性化体積と反応機構との関連についてはまだ明確な理論が確立されていないが、いくつかの質問に答えて、Ducommun 博士らは現在理論グループと共同で、その理論の確立に努力しているむねを明らかにした。

舟橋重信氏は Ducommun 博士らと同様な方法により、溶液内反応の活性化体積を測定して反応機構の検討を行っているが、溶液内反応において活性化体積に及ぼす種々の因子を明らかにし、イオン及び配位分子の大きさ、配位子の立体効果、活性化状態における結合長の変化が特に重要な役割を果していることを例を挙げて説明した。

石黒慎一は DMF, DMSO などの非水溶媒及びアセトニトリルとの混合溶媒中で Cu^{2+} イオンの選択溶媒和及び銅 (II) イオンのクロロ錯体の反応についてカロリメトリーと X 線回折法を併用して得られた結果を紹介し、陰・陽両イオンの溶媒和状態及び溶媒の各種物性が錯形成の逐次反応に大きく影響することを明らかにした。

澤田清氏はハロゲン化物イオンとピリジンを同時に含む混合配位子錯体の生成反応を分光光度法及びその他の測定法により検討し、錯形成反応の途中における構造変化、配位子の電子供与性の変化に伴う平衡定数の依存性などについての結果をまとめて報告した。

平岡賢三氏は気相におけるイオンの溶媒和という、もっとも基本的な問題について研究しているが、今回は気相におけるハロゲン化物イオンに対する水及びアセトニトリルの溶媒和反応に関する結果を発表した。また溶媒和水分子と他の溶媒分子との変換平衡についてもその結果を示した。このような研究は日本では殆ど手がつけられておらず、世界的にも極めてわずかな結果しか報告されていないので、今後の発展が大いに期待される場所である。

最後に齋藤一夫が今回のコンファレンスを総括し、出席者特に海外からの参加者に対し、謝意が述べられた。

第29回岡崎コンファレンスは上記のように溶液系における分子間相互作用について討議されたが、従来にはなかった企画であったせいもあり、討論は極めて活発で、外国人講演者に対しても遠慮なく日本人参加者から沢山の質問が浴びせられた。外国人招待者からお世辞抜きで「今回のコンファレンスは極めてレベルの高い、すばらしい学会であった。」「日本人の講演の内容も充実しており、参加して本当によかった。」「岡崎コンファレンスで随分新しい研究が日本で行われていることがわかった。」など多くの賛辞が寄せられた。

今回の参加者は外国人 9 名 (うち招待者 4 名, 在日外国人 2 名, 分子研外国人研究者 3 名),

分子研関係者（上記3名の外国人研究者を含む）29名，総計86名の参加があった。日本においては比較的伝統の浅い溶液化学が世界一流の学問領域として認められた今回の岡崎コンファレンスの意義は誠に大きい。分子科学研究所の理解と協力なしには開催し得なかった国際会議ではあるが，その成果は従来どのコンファレンスにも負けない立派なものとなり得たと自負している。内外参加者の御協力並びに分子研関係者・事務局に対し，深く感謝したい。



国際協力事業報告

JAPAN-ANGLO (5+5) Workshop on Molecular Material Chemistry

分子研 丸 山 有 成

日英協力事業の一環として、昭和58年度から始められた第5番目の課題である「物質（材料）化学」に関する（5+5）ミーティングが、昭和62年5月24～26日に分子研において開催された。今回は、主として分子エレクトロニクス（分子素子）に関係する材料を中心に、両国の現状紹介及びカレントトピックスの紹介・討論が行われた。

英国側は、オックスフォード大学の Peter Day 教授を団長とする計7名、日本側は分子研井口洋夫所長以下（16+ α ）名が参加した。まず、プログラムを以下に示す。

5月24日（日）

- | | |
|-------------|---|
| 9:30—9:45 | Opening Address
Prof. H. Inokuchi, IMS |
| 9:45—10:30 | The UK Strategy for Molecular Electronics,
Prof. P. Day, FRS, Oxford Univ. |
| 10:30—11:15 | Recent Topics on Dinuclear Mixed-Valent Iron and Manganese Complexes,
Prof. S. Kida, IMS |
| 11:15—12:00 | Crystalline Organic and Metal Complex Molecular Conductors,
Prof. A. E. Underhill, Univ. College of North Wales. |
| 12:00—13:00 | Lunch |
| 13:30—14:15 | High Temperature Oxide Superconductors,
Prof. M. Sato, IMS |
| 14:15—15:00 | Many-Polaron Theory for superconductivity in Quasi Two-Dimensional
Strongly Coupled Electron-Phonon Systems,
Prof. K. Nasu, IMS |
| 15:00—15:30 | Tea or Coffee Break |
| 15:30—16:15 | Pulsed Photoconductivity Study with Organic Crystals, |

Prof. M. Kotani, Gakushuin Univ.

- 16 : 15—17 : 00 Theoretical Research on Electronic, Optical and Dielectric Properties of
Molecular Solids in the UK,
Prof. R. W. Munn, UMIST
- 18 : 00— Reception

5月25日 (月)

- 10 : 00—10 : 45 Conducting Polymers in Britain,
Prof. P. Calvert, Univ. of Sussex
- 10 : 45—11 : 30 Preparation, Property and Applications of Conducting Polymers,
Prof. K. Yoshino, Osaka Univ.
- 11 : 30—12 : 00 Preparation of Semiconducting Polymers and Their Photovoltaic Properties,
Prof. Y. Shirota, Osaka Univ.
- 12 : 00—13 : 30 Lunch
- 13 : 30—14 : 15 Molecular Engineering for Opto Electronics,
Dr. S. Allen, ICI Electronics
- 14 : 15—15 : 00 Optical Studies of Conjugated Polymer Polydiacetylenes,
Prof. T. Koda, Univ. of Tokyo
- 15 : 00—15 : 30 Tea or Coffee Break
- 15 : 30—16 : 15 Liquid Crystal Research in Britain. Molecular Flexibility and Liquid
Crystallinity,
Prof. G. R. Luckhurst, Univ. of Southampton
- 16 : 15—16 : 45 Switching Process in Surface Stabilized Ferroelectric Liquid Crystals—
Zig—Zag Defects and Internal Dislocations,
Prof. A. Fukuda, Tokyo Inst. of Technology
- 16 : 45—17 : 15 Design of Novel Mesomorphic Compounds,
Prof. Y. Matsunaga, Hokkaido Univ.

5月26日 (火)

- 10 : 00—10 : 45 Molecular Electronics—LB Films,
Prof. M. C. Petty, Univ. of Durham
- 10 : 45—11 : 15 Molecular Organization in Langmuir-Blodgett Films with Functional

Groups,

Dr.H. Nakahara, Saitama Univ.

11 : 15—11 : 45 A Comparative Study on Photonic Energy Transport in Biological Antenna
and LB Multilayers,

Prof. I. Yamazaki, IMS

11 : 45 Concluding Remarks,

Prof. H. Inokuchi, IMS

英国における分子エレクトロニクスに関する研究は、SERC（英国科学技術会議）が音頭をとって予想以上に組織的に開始されているようである。即ち、P. Day 教授の総合報告によると、その戦略の主なターゲットは以下に示すとおりで、これらを各研究機関で分担して遂行しているとのことである。

The UK Strategy for Molecular Electronics (P. Day)

(1) Low-Dimensional

Measurements

Fabrication

Theoretical

} → largely confined to semiconductors

(2) Quantum Non-Linear and Solid State Optics

Novel optical sources

Optical physics

New materials

(3) Synthesis of 21st Century Materials

Ceramics

Optical properties, Organometallic

Magnetic and Electrical Properties

Microporous solids

(3) Electroactive Polymers

Photon and electron beam resists

Liquid crystal polymers

Highly conducting polymers

(4) Computer Modelling of Molecular Materials

(5) Molecular Materials Performing an Active Function in the Processing, Transmission and

Storage of Information

又、新物質合成の立場からは、特に

Synthetic Opportunities for Unusual Combinations

(1) Organic Molecular and Inorganic Continuous Lattices

Molecular composite

Organometallic

'Bio'-mimic

(2) Combinations of Physical Properties

Metallic liquid crystals

Chiral metallic conductors

Luminescent liquid crystals

Chiral phosphor

等々を考えているとのことであった。実用性を強く意識した複合材料的な系をかなり重視しているとの印象をうけた。但し、これらのプロジェクトのそれぞれの重みはかなり差はあるようで、これから先はやはり個人の興味が結局は優先するのではないかと思われる。又、それぞれの進行状況も勿論一律ではあるまい。

その他の講演者も、それぞれの専門分野での英国又は日本の現状を示すいろいろなデータを示しつつ、各人の研究紹介あるいはレビューがなされ、相互理解を深めるのに有益であった。特に、導電性高分子やLB膜の研究が、英国においても大変盛んであるとの印象をうけた。

2日半の討議を終えたのち、英国人一行は東京に向い、5月28日に東大物性研究所における“Japan-Anglo One-day Meeting in Tokyo”に出席したのち、2～3の研究機関を訪問し、大変忙しい日程を終えて帰国された。

なお、この分野の日英協力は今後具体的には研究者の相互交換という形で進められる予定である。御協力をお願いする次第である。

最後に、岡崎地区、東京地区のそれぞれのミーティングに御参加下さいました日本人研究者の皆様の御協力に深く感謝致します。

研究会報告

「短寿命分子の高分解能スペクトル」

分子研 廣 田 榮 治

放電，熱分解，光分解等の方法により短寿命の分子を生成し，これをマイクロ波，赤外レーザー等の高分解能分光法により検出，同定，構造決定を行う研究が活発に行われるようになってきた。分子科学のみならず，化学反応論，天文学，環境科学など多くの分野に対するこれらの研究の意義を考慮し，現状を把握するとともに将来への発展を模索するため本研究会を開催した。具体的な目標は，(1)フリーラジカル，分子イオンに関する分光研究の現状を詳しく分析するとともに近い将来における展開を予測する。(2)高分解能分光法に時間分解の因子を取り入れ，化学反応等の動的過程を高分解能性を保ちながら追究する可能性を探る。(3)フーリエマイクロ波分光法をふくむ時間分解フーリエ分光法の手法を開発し，パルス分子線あるいはパルスレーザー励起などとの結合による新しい時間分解高分解能分光法の展開の可能性とその動的過程への応用，である。プログラムを以下に示す。

昭和62年3月12日（木）

13：30－13：35 廣田 榮治（分 子 研）：あいさつ

13：35－14：20 遠藤 泰樹（分 子 研）：反応中間体のマイクロ波分光とその反応機構の研究への応用

14：30－15：00 山口 一郎（上智大理工）：ベンゾトリアゾールおよびその誘導体の熱分解反応生成物とその反応機構

15：10－15：40 川嶋 良章（幾 徳 工 大）：寿命の短いホウ素化合物の赤外・マイクロ波スペクトル

15：50－16：10 休 憩

16：10－16：40 田中 桂一（九 大 理）：遠赤外サイドバンドレーザー分光法による不安定分子の検出

16：50－17：20 山本 智（名 大 理）：準安定電子励起状態のマイクロ波分光

17：30－18：00 大橋信喜美（金 沢 大 理）：DSO の 16500cm^{-1} 領域のレーザー励起スペクトルと $\bar{A}$ 状態の力場

18:15～ 懇 親 会

昭和62年3月13日（金）

- 9:00—9:45 山田 千樫（分 子 研）：ダイオードレーザー分光によるフリーラジカルの研究
- 9:55—10:25 川口建太郎（分 子 研）：分子イオンの赤外レーザー分光
- 10:35—10:55 休 憩
- 10:55—11:25 大野 啓一（広 大 理）：炭素—リン多重結合を持つ短寿命分子の赤外スペクトル
- 11:35—12:05 上原 博通（城 西 大 理）：長波長赤外領域における半導体レーザー分光器による不安定分子の観測
- 12:15—13:25 昼 食
- 13:25—14:10 斎藤 修二（名 大 理）：星間分子のマイクロ波分光
- 14:20—14:50 清水 忠雄（東 大 理）：高振動励起状態分子のレーザー分光
- 15:00—15:20 休 憩
- 15:20—15:50 土屋 莊次（東 大 教 養）：多原子分子の高振動状態励起と緩和
- 16:00—16:30 松村 知（化 技 研）：赤外ダイオードレーザー分光による CO₂ レーザー誘起反応の解析
- 16:40—17:10 金森 英人（分 子 研）：時間分解赤外半導体レーザー分光法による反応中間体の高分解能分光
- 17:20—17:35 川口建太郎（分 子 研）：BH₃ 分子の赤外分光

昭和62年3月14日（土）

- 9:00—9:45 高木光司郎（富 山 大 理）：短寿命分子の二重共鳴分光
- 9:55—10:25 田中 武彦（九 大 理）：ダイオードレーザー分光の方法論あれこれ
- 10:35—10:55 休 憩
- 10:55—11:25 浜田 嘉昭（東 大 薬）：FTIR による不安定新分子種の捕捉とその同定
- 11:35—12:05 佐々田博之（慶応大理工）：光通信半導体レーザーによる分子分光
- 12:15—12:20 廣田 榮治（分 子 研）：まとめ

もっとも重点がおかれたのは短寿命分子，とくにフリーラジカルや分子イオンの検出で，中でも斎藤による CCS, C₃S が注目を集めた。一つの顕著な傾向は化学反応など時間に依存する現象

を、高分解能性を保ちながらリアルタイムで直接的に追究するもので、金森、遠藤、松村らの成果は特筆に値する。高振動励起状態における分子の特性、ダイナミックスに関連して、清水は NH_3 高振動励起状態における色素レーザー・マイクロ波二重共鳴信号観測の成功を報告し、土屋は stimulated emission pumping の方法を SO_2 に応用した結果を紹介した。新しい光源として遠赤外レーザー線（固定波長）に周波数可変のマイクロ波サイドバンドを発生させるもの（田中桂）、通信用近赤外半導体レーザーの分子分光への応用（佐々田）が報告された。高分解能分光学は“静かな”学問であったが、いろいろな意味で動的なものへと発展しつつあり、本研究会はその方向を示唆する有意義な会であった。

非断熱遷移をともし原子・分子衝突 と化学反応

都立大 金子 洋三郎

小林 信夫

分子研 中村 宏樹

分子科学の諸問題において動力学の諸現象の重要性が増している事は間違いないと思われる。動力学的過程の基本である原子・分子衝突過程における各種メカニズムが単なる衝突過程にとどまらず、もっと広い分野での動力学の現象の基本的メカニズムと概念上の共通性あるいは同等性を有している場合が多々ある。非断熱遷移はその典型的例である。これは、衝突過程に限らず、化学反応過程、固体表面における動的過程、凝縮系での動的諸問題等々における状態変化の最も基本的メカニズムの1つである事が認識されてきている。

以上の様な意味で、原子・分子衝突過程における非断熱遷移に関する最近の研究成果を検討し、化学反応過程における非断熱遷移の理解を深めると共に、他分野との接点をさぐる事を目的として本研究会が企画された。

原子・分子衝突関係の研究者を核として、化学反応、固体表面、クラスター、超微粒子などの諸分野で第一線の活躍しておられる方々をお招きし、交流を深めると同時に、原子・分子衝突研究自身の新しい飛躍をもたらす為の1つの転回点となる事を期待した。

講演内容は、上述の考え方にに基づき、以下の4項目に分けられた：(1) 原子・分子衝突過程、

(2) 化学反応素過程, (3) 原子及びイオンの固体表面での散乱, (4) クラスター及び超微粒子。

(1)では、原子の衝突というよりも分子の関与する衝突諸過程に重点が置かれ、イオン・分子衝突における電荷移行、非弾性過程、解離過程等の議論が行われた。新しい話題として、超励起状態の関与する諸過程の話があった。

(2)では、近年可能となってきたイオン・分子反応や分子・分子反応のビームによる詳細な実験的研究の報告や原子移行反応動力学のメカニズムの理論的解明に関する話などに加え、ファンデルワールス分子内での反応を利用して配向依存性を調べようとする野心的試みの紹介があった。

(3)では、Heの固体表面での回折の詳細な解析と多価イオンを固体に衝突させ電子放出を起こさせる事によって固体に大きな変化をもたらす可能性のある事など興味ある発表があった。

(4)では、最近非常に盛んになってきているクラスターや微粒子に関する世界における研究の現状について、特に、クラスターの生成法、その構造と物性、及び超微粒子の構造安定性の理論的解析などの興味ある話題の紹介があった。

小さな輪ではあったが、それなりに交流の輪を拓ける事が出来たのではないと思われる。今後も機会ある毎に、分野間交流を深め、個々の衝突過程にとどまらず、広い視野で動的現象をとらえる努力をしていく事が大切であると考え、本研究会がその為の第一歩となれば幸いである。

個々のすぐれた発表について説明を加えるだけの頁数の余裕はないが、講演者及び討論をもり上げて下さった参加者の皆様にここで改めてお礼を述べておきたい。最後に、研究会プログラムを掲げておく。

2月23日(月) 13:30~17:00

1. 開会あいさつ 金子洋三郎(都立大理)

2. 希ガスイオンと分子の衝突による非弾性過程(30分) 小林 信夫(都立大理)

3. イオン・分子反応——飛行時間分析法による微視的反応機構——(30分)

小谷野猪之助(分子研)

(15:30~15:45) 休憩

4. 表面におけるHeの回折現象(30分) 酒井 明(東大物性研)

5. 多価イオン衝突による固体表面からの2次電子放出(30分)

大谷 俊介(名大プラズマ研)

18:00~ 懇親会

2月24日(火)

午前(9:30~12:00)

6. 超励起状態の解離過程(30分) 旗野 嘉彦(東工大理)

7. イオン・分子衝突による電子励起をともなう解離過程(30分)

北 重公(東北大科研)

(10:50~11:05) 休憩

8. 電子・分子衝突による解離過程(30分) 島村 勲(理研)

(12:00~13:30) 昼食

午後(13:30~17:00)

9. 交差分子線法による $F_2 + C_6H_6$ の反応散乱(30分) 正畠宏祐(分子研)

10. ファンデルワールス分子の分子内反応— $O(^1D) \cdot N_2O \rightarrow 2NO$ —(30分)

本間 健二(東大教養)

11. 軽原子移行反応の量子論(30分) 大崎 明彦(分子研)

(15:30~15:45) 休憩

12. 希ガス2価イオンと希ガスの衝突による準安定状態の脱励起(20分)

伊藤 陽(城西大理)

13. 高電離イオンによる水素原子・分子からの電子捕獲(30分)

木村 正広(阪大理)

2月25日(水) 9:30~12:00

14. 質量分析計による金属クラスターの研究(30分) 交久瀬五雄(阪大理)

15. 金属半導体超微粒子における理論研究の現状(30分) 里子 允敏(分子研)

(10:50~11:05) 休憩

16. クラスター研究の最近の動向(30分) 近藤 保(東大理)

17. 閉会あいさつ 小林 信夫(都立大理)

電子状態の理論研究

分子研 諸 熊 奎 治

電子状態理論の世界的権威である米国ノースカロライナ大学の Robert G. Parr 教授が評議員としてはじめて来所されたのを機に、日本における電子状態理論の現状を知っていただくと同時に、国内研究者との交流を深めることを目的に、昭和62年3月9日午後、半日のミニ研究会を開催した。学年末のことで都合がつかず御参加頂けなかった研究者も多かったことは残念だったが、結果的には小粒でもピリリとした研究会となった。プログラムは下記の通りである。

- 13:00 Welcome Message K. Morokuma (IMS)
- 13:10 K. Ohno (Hokkaido Univ.)
"Idea of Composite Natural Orbital"
- 13:30 S. Iwata (Keio Univ.)
"Numerical Techniques in Quantum Chemistry"
- 13:50 H. Fukutome (Kyoto Univ.)
"A Riemann Geometrical Formulation of the Principle of the Least Electron Motion in Chemical Reaction"
- 14:10 S. Kato (Univ. of Tokyo)
"A Theoretical Study on the Mechanism of Internal Conversion of S₁ Benzene"
- 14:30 K. Yamashita (IMS)
"A Theoretical Study on Spectroscopy during Collision: K+NaCl"
- 14:50 Coffee Break
- 15:20 R. G. Parr (The Univ. of North Carolina)
"Electronic Structure Theories from the Density Matrix, and the Concept of Local Temperature Within a Molecule"
- 16:20 I. Ohmine (IMS)
"Large Fluctuation in Water"
- 16:40 N. Koga (IMS)
"Theoretical Studies on Catalytic Cycles of Organometallic Compounds"
- 17:00 H. Nakatsuji (Kyoto Univ.)

17:30 Reception at Faculty Club

Parr 教授は local density functional 理論において、運動エネルギーと交換エネルギーに対する種々のモデルを、系の“エントロピー”を極小にするという条件の下で比較検討した結果を報告した。この場合、運動エネルギーが“局所温度”ともいうべき量と密度行列とで定義できることを示した。

研究会のあと、学会、共同研究などで顔なじみの深い参加者が Parr 教授をかこんで歓談のひとときをたのしんだ。

新機能物質としての無機／有機 中間化合物の探索

分子研 井 口 洋 夫
丸 山 有 成

新しい機能を求めての新物質開発研究の途上には、数多くの新しい有機物質、無機物質が誕生したり再発見されたりしてきた。その結果、物性的にはもはや両者の区別は実質的に存在しないような状況も出現している。そこで、本研究会は次世代の新物質系として、両者の特徴を活しつつミクロな意味での無機／有機複合系あるいは中間化合物を開発していくことの意義及びその方法を探ることを目的として計画された。そこでは当然、次の新機能とは何か、全く新しい合成法とはなにか、等の問題を基礎研究の立場から追求せねばならない。

そこで今回の研究会では、異った分野で研究を行っている者がその各々の研究のプライオリティを尊重しつつ横断的分野の開拓をめざす一つの対象として上記の無機／有機中間化合物をとりあげ、それぞれの立場から期待される新機能について話し合った。

なお当日は年度末（3月19日）の大変忙しい時期であったため、一日研究会として実施された。以下にそのプログラムを示す。参加者は約20名であった。

昭和62年 3 月19日

- | | |
|---------------------------------------|--------------|
| 1. はじめに (主旨説明) | 井口 洋夫 (分子研) |
| 2. S-, Se-, Te-TTF 化合物 | 斉藤 軍治 (物性研) |
| 3. 有機セレン, テルル化合物の合成と反応性 | 植村 栄 (京大化研) |
| 4. 新しい有機伝導体の探索 | 小林 啓二 (東大教養) |
| 5. 有機導体 | 森 健彦 (分子研) |
| 6. 有機強磁性体 | 岩村 秀 (分子研) |
| 7. ジアチレン化合物の固相重合 | 竹田 研爾 (東大工) |
| 8. 光学活性物質の直截的合成を可能にする新遷移金属
錯体触媒の合成 | 高谷 秀正 (分子研) |
| 9. 黒リンの超伝導 | 川村 春樹 (姫路工大) |
| 10. コメントー黒リン層間化合物 | 丸山 有成 (分子研) |
| 11. フッ素, フッ化物ーグラファイト化合物 | 東原 秀和 (京大工) |
| 12. コメントー GIC · Hydrogen | 榎 敏明 (分子研) |
| 13. 超微粒子の磁性 | 木村 啓作 (分子研) |

有機合成から物性物理までにわたる広い構成で、物質も有機物からグラファイト、黒リン、金属微粒子までが話題となった。今のところ、無機／有機中間化合物の候補としては、TTF 系の Se, Te 化合物、金属錯塩、有機金属化合物などであったが、ポリマーなども含めてこれからの発展が期待される。新機能を探るところまで十分話し合う時間的余裕はなかったが、物質に対する新しい観点をみつける事の重要性を確認でき、新しい物質系を開拓する一つの糸口になったと思われる。

「孤立分子集合体の光励起緩和過程」

分子研 正 畠 宏 祐

京都工繊大 平 山 鋭

昭和62年3月31日午前9時より午後5時まで標記の分子研研究会が開催された。所外及び所内参加者数がそれぞれ15名、12名のミニ研究会であった。討論時間を講演時間と同じだけ取ることによって、討論を活発にすることを目論んでプログラムを作った。参加者の活発な討論への参加を促すうえで、この方式は見事に成功したと考えている。

さて、研究会報告の本題に入る。孤立分子及び分子間化合物の電子状態の研究においては、我が国には歴史がある。この分野の研究の進歩はめざましいものがあり、実験的にはレーザーと超音速自由噴流法を用いて、以前では考えられなかった様な正確さで単一励起状態にある分子や分子間化合物の振舞を観測することができるようになり、励起分子の緩和過程に関する知見が飛躍的に増大した。以前には「見えなかった」ものが「見える」ようになったのである。これには、我が国の研究者の寄与はまた大きい。ところが、多くの化合物・分子間化合物の電子励起状態の緩和過程への現象論的な理解が進むにつれて、intersystem crossing, internal conversion, エキシマー生成、分子内振動エネルギー緩和等の真の理解にはまだまだ、ほど遠いことを認識し始めた。すなわち、非断熱遷移を伴うこれらの現象の理解には、関与する複数のポテンシャル面に関する知識が全く欠けており、現在、3原子系の断熱的化学反应動力学において得られる知見の信頼性と比較すると、解明できる筈の知見もまだ多量であると考えられる。そこで、種々の理論的・実験的手法を用いてこの分野で活躍しておられる研究者の方々に参加していただき、常に次に来たるべき新しい実験的・理論的手法の開発・導入を念頭に入れた上で、これらの問題を解明するにはどうすれば良いかを徹底的に討論していただくという目的で、インフォーマルな研究会にした。したがって、下記のプログラムの演題は、むしろ話題提供のためのものと考えていただきたい。しかし、この題目から何が話されたかを容易に想像いただけると思う。

午前9:00-12:00

- (1) 吉原経太郎 (分子研) (15分)

「励起ベンゼンの振電モードダイナミックス」

- (2) 茅 幸二 (慶応大理工) (15分)

「電子励起7-アザインドール二量体におけるプロトン移動」

- (3) 加藤 重樹 (東大教養) (15分)

「コメントー電子励起緩和過程に於ける多重ポテンシャル面の役割」

{休 憩 10:30-11:00}

- (4) 平谷 篤也 (分子研) (15分)

「光解離励起過程における重水素置換効果」

- (5) 長岡 伸一 (分子研) (15分)

「サリチルアルデヒドの高位電子励起状態からの蛍光」

{昼 食 12:00-13:30}

午後13:30-17:00

- (6) 三上 直彦 (東北大理) (15分)

「水素結合体イオンの光解離」

- (7) 小林 徹 (東大教養) (10分)

「ベンゾニトリルを含むファンデルワールス分子の光励起ダイナミックス」

- (8) 伊藤 道也 (金沢大薬) (10分)

「フルオレンファンデルワールス錯体の励起状態」

- (9) 木村 克美 (分子研) (10分)

「Internal Conversion と励起状態光電子スペクトル」

{休 憩 15:00-15:30}

- (10) 田中富士雄 (大阪府大総合) (15分)

「9, 10ジクロロアントラセン及び希ガスクラスターの蛍光寿命」

- (11) 梶本 興亜 (東大教養) (15分)

「Bi-アントリル-アセトン錯合体の光励起ダイナミックス」

- (12) 平山 鋭 (京都工繊大繊維) (15分)

「9, 10-ジシアノアントラセンの過剰エネルギーに依らない蛍光寿命」

以下、主な論点を述べる。吉原は、主として時間分解蛍光法を用いた研究によって励起ベンゼンの振電ダイナミックスが解明されつつある現状を報告した。第三チャンネルが大きく関与するポテンシャル面について討論された。これに関して、加藤は、電子励起緩和過程に於ける多重ポテンシャル面の役割がまだ明らかにされていないまで、実験研究者が研究を進めていることに対して警鐘をならし、断熱ポテンシャル面を考察に入れて討論を進めるべきであることを強調した。この点は、他のすべての講演に対して適用されることが認識されたが、断熱ポテンシャル面を考慮に入れて討論するには余りにも情報量が少ないことも参加者全員が認識したと思われる。

最もよく研究されているベンゼンの励起状態のダイナミックスについてさえ、信頼できる励起状態ポテンシャルの理論的計算が最近始ったばかりである。他の孤立分子や分子間化合物の励起状態緩和過程の知見においては、実に研究が始まったばかりと言って良いであろう。その他の講演についての個々の説明は省略するが、プロトン移動、光解離励起過程、分子間化合物の振電状態の緩和や振動前期解離、エキシマー生成反応、蛍光緩和の溶媒和・重原子効果等の新しい発見が発表された。これらは、盲人が新しい象を発見したことに相当すると思われる。ところが、それぞれの象の全容を明らかにするには、いくつかの方法を駆使することが必要であろう。時間分解蛍光スペクトルの測定は、ほぼルーチンに用いられるようになった。ところが、更に他の方法、例えば、木村によって述べられ多光子イオン化光電子分光法や時間分解光電子イオン化法のような緩和状態をプローブする方法を利用することの重要性が認識されたというのが印象である。この分野の更に一層の発展が楽しみである。(以上敬称略)

共同研究採択一覧

昭和62年度（前期）共同研究

課 題 研 究

◎タンパク中の電子移動とプロトン移動

○分 子 研	北川 禎三	分 子 研	小倉 尚志	京 大 理	前田 章夫
自 治 医 大	大野 宏毅	横浜国大工	阿久津秀雄	京 大 医	折井 豊
自 治 医 大	曾根 勇史	阪 大 産 研	二井 将光		

◎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 二郎	東 大 理	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
名 大 理	田仲智津子				

◎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	又賀 昇	分 子 研	阿部 晴雄
金 沢 大 薬	谷本 能文	岡崎研究機構	長倉 三郎	筑波大化学系	桜木 宏親
東大教養	土屋 莊次	東大教養	務台 潔	神 戸 大 理	加藤 肇
東 北 大 理	藤村 勇一	阪大基礎工	平田 善則	奈 女 大 理	岩井 薫
分 子 研	山崎 巖	分 子 研	中垣 良一		

◎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	正畠 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	城 西 大 理	中川 邦明	分 子 研	中村 宏樹

協 力 研 究

イオン・分子衝突における電荷移行反応	東北大計測研	楠 勲
分子振動の旋光強度の理論計算	阪大蛋白研	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
燃焼の素反応に関する理論的研究	名大理学研究科	青柳 睦
多チャンネル量子欠損理論による分子の自動イオン化の	九大総合理工学研究科	中島 慶治

研究

有効交換相互作用系の一般化 Mo 計算	阪大基礎工	山口 兆
希ガス酸化物イオンの高分解能分光	東大理	増田 彰正
赤外・マイクロ波分光による HBNH と BN の検出	幾徳工大	川嶋 良章
NO ₃ ラジカルの電子構造の解明	東工大理	石渡 孝
時間分解赤外半導体レーザー分光法による SiH ₃ ラジカルの反応速度定数の決定	化技研	菅原 孝一
HNO 分子の光・マイクロ波二重共鳴	富山大理	高木光司郎
ミリ波・光二重共鳴による高振動励起状態の緩和過程の研究	東大理学系研究科	松尾由賀利
シトクロム P-450SCC の共鳴ラマン散乱	香川医大	鐸木 基成
フラボン誘導体の時間分解共鳴ラマンの研究	金沢大薬	伊藤 道也
チトクロム酸化酵素反応機構の時間分解共鳴ラマン分光法による研究	甲南大理	吉川 信也
Al-Mn 基準結晶物質の局所構造解析	東北大選鉱研	松原英一郎
水素吸蔵により作製したラーベス相非晶質合金の局所構造解析	東北大選鉱研	早稻田嘉夫
アニオン-カチオン界面活性剤混合ミセルの研究	都立大理	加藤 直
励起フラビンの緩和過程の研究	群馬大工	閑 春夫
有機固体粉末のピコ秒時間分解拡散反射スペクトル	京都工芸繊維大織	池田 憲昭
多原子分子の分子内振動エネルギー再分配機構の解明	東北大理	藤村 勇一
炭酸ガス、一酸化炭素の高効率メタネーション (ad-atom 賦活金属電極、半導体電極を用いて)	山梨大工	渡辺 政廣
半導体光触媒を用いた有機化学反応の研究	明星大理工	原田 久志
MPI 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
ベンゼン誘導体のヴァンデルワールス錯体の電子的励起状態	東工大理	市村禎二郎
液体流から生成したクラスターの研究 (Ⅳ) アミン類のクラスター	北九州大文	竹之下芳也
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

振動状態を規定したイオン-分子反応: $(\text{NO}-\text{C}_6\text{H}_6)^+$	東大教養	本間 健二
$(\text{NH}^{3+}, \text{H}_2\text{O})$ 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
高分子を溶液中で配向させ得るラマンセルの開発	いわき明星大理工	坪井 正道
MPI および光電子分光法による励起三重項状態の研究	京大理	広田 襄
分子ビーム LIF 法によるアントラセン化合物の緩和過程の研究	大阪府立大総合科学	田中富士雄
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
層状物質の層間場における化学反応	熊本大理	佐野 瑞香
新無機導体における電荷密度波と超伝導	金沢大教養	藤下 豪司
無機化合物超伝導体に関する研究	東北大金材研	細谷 正一
超音速自由噴流中の水銀光増感反応の研究	慶應大理工学研究科	小沢啓一郎
MPI 光電子分光法によるプロトン移動反応の研究	慶應大理工	富宅喜代一
ミセル上での光増感電子移動と基質可溶位置の検討	名大工	高木 克彦
カルベン反応での隣接基関与の解明	三重大工	富岡 秀雄
2, 2'-ジベンズイミダゾレートを架橋配位子とする新しい混合原子価 Ru および Os 多核錯体に関する研究	三重大教育	芳賀 正明
ビス (β -ジケトナト) パラジウム (II) および白金 (II) を出発とする新錯体の合成	和歌山大教育	桶矢 成智
白金 (III) 複核錯体の ^{195}Pt NMR	大阪市立大理	木下 勇
ライオトロピック液晶系の自己拡散と金属イオンの効果	奈良女大理	飯田 雅康
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	斎藤 稔
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 寧世
多層構造分子集合体の光物理化学	基生研	山崎トモ子
芳香族オレフィンの回転異性体の光挙動	筑波大	新井 達郎
LB 多層膜における光エネルギー伝達	山口女大家政	松尾 洋
オキサチタナシクロペンタンと一酸化炭素との反応	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	愛工大	井上 眞一
新しい不斉錯体触媒の合成とその機能開発	埼玉大工	宮下 晃

有機電荷移動錯体結晶の相転移	東大工	国府田隆夫
一次元金属錯体における電荷密度波の研究	横浜国大工	栗田 進
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	斎藤 軍治
コバルト（Ⅲ）－シッフ塩基－アミノ酸混合錯体の配位 子間疎水相互作用の研究	茨城大理	藤井 有起
硫黄酸化物とシッフ塩基を混合配位した遷移金属多核錯 体の合成と磁性	琉球大理	普久原朝喜
μ -オキソ- μ -ビス（カルボキシラト）架橋をもつ二 核遷移金属錯体の構造と物性に関する研究	金沢大理	鈴木 正樹
^{113}Cd -NMR による水溶液および非水溶液中の Cd (II) チオシアナト錯体の構造学的研究	東工大総合理工学研究科	高椋 利幸
金属錯体の関与する分子間相互作用の研究	金沢大薬	山内 脩
クロム（Ⅲ）ポルフィリン錯体の配位子置換反応の反応 機構の研究	愛教大	稲毛 正彦
モリブデン（Ⅴ）およびタングステン（Ⅴ）複核錯体の 動的挙動	東北大理	永澤 明
超電導体単結晶の構造と性質	大阪市大理	大井俊一郎
オルソキノロン類の励起三重項状態に対する金属イオンに よる消光反応	東北大理学研究科	下石 平巳
配位子光励起による中心金属反応場の活性化	東北大理	伊藤 翼
混合金属クラスター錯体の X 線光電子スペクトル	東北大理	佐々木陽一

招へい協力研究

ピコ秒拡散反射分光法の開発	京都工芸繊維大織	増原 宏
新型ドデカポールイオンビームガイドの開発	都立大理	奥野 和彦
時間分解分光計測システムの改良	北大応電研	進藤 善雄
ルテニウム錯体触媒を用いる有機合成	京大工	渡部 良久

研 究 会

酸化物高温超伝導体の合成と物性	東大物性研	武居 文彦
レーザー誘起固体表面過程の分子論的アプローチ	京都工芸繊維大織	増原 宏

UVSOR 課題研究

◎ H^{2+} イオンへの Cs 原子からの電子移動による H^- イオン生成の H_2^+ イオン振動準位依存性

○阪府大総合 杉浦 俊男 分子研 小谷野猪之助 阪府大総合 早川 滋雄
分子研 鈴木 信三 分子研 長岡 伸一

◎有機固体における光誘起現象の分光学的研究

○分子研 三谷 忠興 東大理 腰原 伸也 名大大学院 伊藤 千尋
都立大 阿知波洋次 筑波大 舛本 泰章 分子研 山崎 巖
分子研 高木 芳弘 分子研 山中 孝弥

◎SOR 光電子分光法による分子集合体の電子状態の解析

○広大理 関 一彦 千葉大工 上野 信雄 千葉大工 杉田 和之
熊本大理 佐藤 直樹 茨城大 東 美和子 埼玉大理 中原 弘雄
分子研 渡辺 誠 分子研 森 健彦 分子研 藤本 斉

◎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 都立大 阿知波洋次 都立大 城丸 春夫
慶應大 茅 幸二 慶應大 富宅喜代一 富山医薬大 北川 泰司
公害研 鷺田 伸明 いわき明星大 勝又 春次 三重大 佐藤 博保
三重大 川崎 昌博 京大化研 伊吹 紀男 東工大理 旗野 嘉彦
東大理 近藤 保

◎超高压下における遠赤外分光装置の開発

○東北大大理 難波 孝夫 東北大大理 池沢 幹彦 東北大大理 里井 孝至
分子研 渡辺 誠 分子研 福井 一俊

UVSOR 協力研究

超音速分子ビーム中の分子の吸収・発光スペクトル	新潟大理	徳江 郁雄
状態選択した NO_2^+ イオンの分解過程	東工大理	渋谷 一彦
基礎的な分子の高励起状態と光解離に関する研究	京大化研	伊吹 紀男
酢酸二量体などの真空紫外吸収スペクトル	富山医薬大薬	北川 泰司
多原子分子の VUV 領域における光イオン化部分断面積の測定	東工大理	旗野 嘉彦

UVSOR 招へい協力研究

ストレンジリングによる自由電子レーザーの研究	東大物性研	宮原 義一
------------------------	-------	-------

BL3A2 観測システムの建設及びそれを用いた分子のイ オン化解離過程の研究	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）の建設と立上げ	京大化研	伊吹 紀男
高分解能斜入射分光器の設計	大阪市立大工	石黒 英治

分子研コロキウム

- 第363回 昭和62年2月18日 芳香族オレフィンの光異性化反応 (桜木 宏親)
- 第364回 2月25日 Synchrotron Radiation Studies in the Time Domain –A Review of Present Status and Future Prospects– (Ian Munro ; Daresbury Lab.)
- 第365回 3月4日 色素化クラウンのイオン選択錯化と呈色 (三角 莊一)
- 第366回 3月11日 層間化合物における物性の制御 (寿栄松 宏仁)
- 第367回 3月25日 大気化学研究における最近の話題 (鷺田 伸明)
- 第368回 4月15日 Crossed-Beam Reactive Scattering of F₂ plus C₆H₆ (J. Robb.Grover ; Brookhaven Natl. Lab.)
- 第369回 4月22日 μ -メチレン錯体 (磯辺 清)
- 第370回 5月6日 酸化物高温超伝導体 (佐藤 正俊)
- 第371回 5月13日 Spectroscopic Detection and Kinetic Properties of C₂H₅S and i-C₃H₇S Radicals. (Graham Black ; SRI International)
- 第372回 5月21日 CARS Studies of State-to-State Chemical Dynamics (James J. Valentini ; Univ. of Calif.)
- 第373回 6月10日 化学反応のポテンシャル面——反応の理論制御への夢 (諸熊 奎治)
- 第374回 6月17日 UV 光化学の一断面, ホット分子の生成と反応 (中島 信昭)

国際交流

海外からの招へい研究者

(62. 3. 1～62. 6. 30)

1. 評 議 員

R. G. Parr (アメリカ ノースカロライナ大学教授) 62. 3. 7-62. 3. 15

2. 外国人客員研究部門

E. Tiemann (西ドイツ ハノーバー大学教授) 61. 6. 1-62. 3. 11

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

A. L. Verma (インド ノースイースタンヒル大学教授) 62. 1. 5-62. 12. 28

G. Black (アメリカ SRI International 上級研究員) 62. 4. 15-62. 9. 14

P. G. Wolynes (アメリカ イリノイ大学教授) 62. 6. 29-63. 1. 20

H. Toftlund (デンマーク オデンセ大学講師) 62. 7. 18-63. 3. 17

3. 文部省招へい外国人研究員

王 萍 (中国 中国科学院化学研究所助手) 61. 10. 29-62. 10. 27

P. -S. Song (アメリカ ネブラスカ大学教授) 62. 1. 5-62. 3. 31

S. -O. Oh (韓国 慶北国立大学教授) 62. 1. 6-62. 3. 5

I. Munro (イギリス ダーズベリー研究所主幹研究員) 62. 1. 22-62. 4. 30

Seung C. Park (韓国 江源国立大学助教授) 62. 6. 22-62. 8. 22

Dongho Kim (韓国 韓国標準研究所主任研究員) 62. 7. 1-62. 8. 31

Hasuck Kim (韓国 ソウル国立大学準教授) 62. 7. 6-62. 9. 5

章 立 (中国 中国科学院化学研究所研究員) 62. 11. 1-63. 10. 31
(予定)

M. D. Newton (アメリカ ブルックヘブン国立研究所主任研究員) 62. 12. 1-63. 3. 31
(予定)

4. 日本学術振興会招へい外国人研究者 (* 二国間交流)

A. J. Dann * (イギリス ノッティンガム大学研究員) 62. 5. 1-63. 4. 30

R. D. Mckelvey (アメリカ ウィスコンシン大学教授) 62. 5. 27-62. 11. 1

H. C. Wolf	(西ドイツ シュタットガルト大学教授)	62. 8. 25-62. 10. 24 (予定)
D. Luneau *	(フランス ツールズ大学研究生)	63. 1. 15-65. 1. 14 (予定)

5. 岡崎コンファレンス

P. J. Rossky	(アメリカ テキサス大学オースティン教授)	62. 5. 24-62. 5. 30
J. Barthel	(西ドイツ レーゲンスブルグ大学教授)	62. 5. 26-62. 5. 28
Y. Ducommun	(スイス ローザンヌ大学研究員)	62. 5. 26-62. 5. 28
G. W. Neilson	(イギリス ブリストル大学研究員)	62. 5. 26-62. 5. 29

6. 日英 (5 + 5) ミーティング

P. Day	(イギリス オックスフォード大学教授)	62. 5. 23-62. 5. 26
S. Allen	(イギリス ICI エレクトロニクス研究員)	62. 5. 23-62. 5. 26
G. R. Luckhurst	(イギリス サザンプトン大学教授)	62. 5. 23-62. 5. 26
R. W. Munn	(イギリス UMIST 教授)	62. 5. 23-62. 5. 26
P. Calvert	(イギリス サセックス大学教授)	62. 5. 23-62. 5. 26
A. E. Underhill	(イギリス ノースウェールズ大学教授)	62. 5. 23-62. 5. 26
M. C. Petty	(イギリス ダーラム大学教授)	62. 5. 23-62. 5. 26
J. A. Richards	(イギリス ブリティッシュカウンシル科学担当官)	62. 5. 23-62. 5. 26
S. Suzuki	(イギリス 神戸製鋼ヨーロッパ研究員)	62. 5. 23-62. 5. 26

7. 招へい協力研究員

R. S. Becker	(アメリカ ヒューストン大学教授)	62. 3. 3-62. 3. 11
B. Brocklehurst	(イギリス シェフィールド大学教授)	62. 3. 17-62. 3. 21
R. D. Brown	(オーストラリア モナシュ大学教授)	62. 4. 6-62. 4. 11
J. C. Polanyi	(カナダ トロント大学教授)	62. 4. 7-62. 4. 9
A. Fontaine	(フランス バリ大学南教授)	62. 4. 27
R. E. Weston, Jr.	(アメリカ ブルックヘブン国立研究所教授)	62. 6. 4-62. 6. 5
Wang Fu-hua	(中国 国立放射光施設助教授)	62. 6. 15-62. 6. 18
O. A. Anisimov	(ソ連 化学動力学及び燃焼研究所教授)	62. 6. 25-62. 6. 26
Mu Shik Jhon	(韓国 韓国高等科学技術院教授)	62. 7. 15-62. 7. 16
Xian Dingchang	(中国 中国高能物理学研究所教授)	62. 7. 17-62. 7. 20

8. 特別協力研究員

H. Petek	(アメリカ カリフォルニア大学バークレー研究員)	60. 8. 1—62. 7. 31
I. I. Plazibat	(ユーゴスラビア スプリット大学講師)	61. 11. 11—62. 9. 10
I. Roeggen	(ノルウェー トロムゼ大学助教授)	62. 1. 5—62. 6. 30
温 曄	(中国 中国科学院化学研究所研究員)	62. 2. 20—63. 2. 19
金 俗 謙	(中国 北京師範大学講師)	62. 2. 20—62. 6. 14
A. K. Campen	(イギリス サザンプトン大学博士研究員)	62. 4. 4—62. 10. 3
R. F. Curl	(アメリカ ライス大学教授)	62. 5. 2—62. 5. 31
王 金 鵬	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室上級技師)	62. 6. 10—62. 6. 18
蔣 迪 奎	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室技師)	62. 6. 10—62. 8. 20
徐 朝 銀	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室技官)	62. 6. 10—62. 8. 20
徐 錫 林	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室助教授)	62. 6. 10—62. 8. 20
Jong Myung Lee	(韓国 チュンブク国立大学助教授)	62. 7. 1—62. 8. 31
戴 道 榮	(中国 中国科学院化学研究所研究員)	62. 7. 13—62. 12. 13
鄭 世 鈞	(中国 河北教育大学助教授)	62. 8. 1—62. 12. 1 (予定)
謝 瓊	(中国 復旦大学講師)	62. 8. 25—62. 12. 24 (予定)
J. A. Koningsstein	(アメリカ カールトン大学教授)	62. 11. 6—62. 12. 6 (予定)

海外からの訪問者

J. Friedrich	(西ドイツ バイロイト大学教授)	62. 3. 15—62. 3. 16
J. Hautaluoma	(アメリカ 全米科学財団国際組織担当官)	62. 3. 18—62. 3. 21
U. Bardi	(イタリア フィレンツェ大学教授)	62. 3. 23—62. 3. 24
K. E. Gubbins	(アメリカ コーネル大学教授)	62. 3. 23—62. 3. 24
J. Jackson	(アメリカ コーネル大学研究員)	62. 3. 23—62. 3. 24
W. Chapman	(アメリカ コーネル大学学生)	62. 3. 23—62. 3. 24
S. -F. Tan	(シンガポール シンガポール国立大学教授)	62. 3. 30—62. 3. 31
J. Eichler	(西ドイツ ハーンマイトナー研究所研究員)	62. 3. 31—62. 4. 1
J. Boright	(アメリカ 全米科学財団国際部長)	62. 4. 7—62. 4. 8
J. J. Valentini	(アメリカ カリフォルニア大学アーバイン教授)	62. 5. 21—62. 5. 22

K. Kleinermanns	(西ドイツ 物理化学研究所研究員)	62. 6. 2-62. 6. 5
Jiin-Yu Liang	(アメリカ ハーバード大学研究員)	62. 6. 9
D. Wertz	(アメリカ ノースカロライナ大学教授)	62. 6. 9-62. 6. 10
M. K. DeArmond	(アメリカ ノースカロライナ大学教授)	62. 6. 9-62. 6. 10
王 相 纂	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室研究員)	62. 6. 15-62. 6. 18
江 鵬 飛	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室研究員)	62. 6. 15-62. 6. 18
張 国 棟	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室研究員)	62. 6. 15-62. 6. 18
蔣 道 満	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室研究員)	62. 6. 15-62. 6. 18
王 復 葉	(中国 中国科学技術大学同步輻射実験室研究員)	62. 6. 15-62. 6. 18
I. Sasaki	(フランス パリ大学南研究員)	62. 6. 19
A. M. Sargeson	(オーストラリア オーストラリア国立大学教授)	62. 7. 13-62. 7. 14

海外渡航 (62.1~62.6)

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
北 川 禎 三	分子構造研究系 教 授	62. 3. 2 ~62. 3.12	ポ ー ラ ン ド	生物と医学に重要な物質や系の分光学及び構造化学的研究に関する第3回国際スクールに出席のため
柏 木 浩	電子計算機センター 助 教 授	62. 3. 7 ~62. 3.24	アメリカ合衆国	サニベルシンポジウムの招へい講演及びスーパーコンピュータ視察のため
三 谷 忠 興	装 置 開 発 室 助 教 授	62. 3.15 ~62. 3.23	アメリカ合衆国	アメリカ物理学会出席及びベル研究所視察のため
古 賀 伸 明	理 論 研 究 系 助 手	62. 3.15 ~62. 3.24	アメリカ合衆国	「原子、分子、固体の理論、散乱、多体現象、計算方法」に関する国際研究集会（サニベルシンポジウム）出席のため
坂 田 忠 良	電子構造研究系 助 教 授	62. 3.22 ~62. 3.29	アメリカ合衆国	ハイテクノロジー研究のための太平洋国際センター主催の「水素の光製造」のワークショップ出席・講演のため
廣 田 榮 治	分子構造研究系 教 授	62. 3.23 ~62. 3.29	連 合 王 国	分子イオンの分光についての王立協会討論会に出席、招待講演を行うため
吉 原 経太郎	電子構造研究系 教 授	62. 3.26 ~62. 4. 1	アメリカ合衆国	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における日米情報交換セミナー出席のため
岩 村 秀	相 関 領 域 研 究 系 教 授	62. 3.27 ~62. 4. 1	アメリカ合衆国	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における日米情報交換セミナー出席のため
諸 熊 奎 治	理 論 研 究 系 教 授	62. 4. 6 ~62. 4.18	アメリカ合衆国 連 合 王 国	アメリカ化学会春季年会出席、講演及びスーパーコンピュータ国際会議出席・講演のため
高 木 芳 弘	装 置 開 発 室 助 手	62. 4.20 ~62. 5. 6	アメリカ合衆国 カ ナ ダ	量子エレクトロニクス国際会議 CLEO/IQEC '87 に出席・発表及び研究討議のため
吉 原 経太郎	電子構造研究系 教 授	62. 4.22 ~62. 5. 2	アメリカ合衆国	第15回量子エレクトロニクス国際会議に出席・招待講演を行い、また、大学を見学する
井 口 洋 夫	所 長	62. 5.10 ~62. 5.14	アメリカ合衆国	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野におけるスティアリング・コミティー及び計画推進セミナー出席のため
岩 村 秀	相 関 領 域 研 究 系 教 授	62. 5.10 ~62. 5.16	アメリカ合衆国	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野におけるスティアリング・コミティー及び計画推進セミナー出席のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
金 森 英 人	技 術 課 技 官	62. 6. 11 ～62. 7. 1	アメリカ合衆国	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
山 田 千 慊	分子構造研究系 助 手	62. 6. 14 ～62. 7. 1	アメリカ合衆国	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
長 岡 伸 一	分子集団研究系 助 手	62. 6. 21 ～62. 6. 27	アメリカ合衆国	第 5 回シンクロトン放射法会議出席及び研究 打ち合わせのため
佐 藤 正 俊	分子集団研究系 助 教 授	62. 6. 21 ～62. 6. 28	アメリカ合衆国	超伝導の新メカニズムに関する国際会議に出席 するため
井 口 洋 夫	所 長	62. 6. 21 ～62. 7. 7	ポーランド ソ 連	第 5 回「有機固体の電氣的並びに関連物性」国際会議参加 及びポーランド科学アカデミー、ラトビア科学アカデミー において有機半導体に関する講演、研究討論のため
坂 田 忠 良	電子構造研究系 助 教 授	62. 6. 28 ～62. 7. 5	大 韓 民 国	「アジア化学会議ソウル '87」」に出席、講演の ため

人事異動 (62.2~62.7)

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
62. 2. 28	事務補佐員 (電子計算機センター)	桐 山 久美子	辞職	分子集団研究系技術係
62. 3. 16		社 本 真 一	技官(技術課)に採用	
62. 3. 31	分子科学研究所長	長 倉 三 郎	任期満了	
62. 3. 31	助手(理論研究系)	里 子 允 敏	辞職	分子基礎理論第一研究部門
62. 3. 31	事務補佐員(電子構造研究系)	小 野 厚 子	退職	錯体合成研究部門
62. 3. 31	非常勤の講師 (分子集団研究系)	城 丸 春 夫	退職	
62. 3. 31	非常勤の講師(装置開発室)	和 田 芳 樹	退職	
62. 3. 31	助手(錯体化学実験施設)	御 厨 正 博	辞職	錯体触媒研究部門
62. 3. 31	教授(錯体化学実験施設)	齋 藤 一 夫	停年退職	分子基礎理論第三研究部門
62. 3. 31	教授(理論研究系)	西 本 吉 助	併任終了	分子基礎理論第三研究部門
62. 3. 31	助教授(理論研究系)	中 西 浩一郎	併任終了	分子基礎理論第三研究部門
62. 3. 31	教授(分子構造研究系)	齋 藤 修 二	併任終了	分子構造学第二研究部門
62. 3. 31	助教授(電子構造研究系)	櫻 木 宏 親	併任終了	電子構造研究部門
62. 3. 31	教授(分子集団研究系)	壽 榮 松 宏 仁	併任終了	分子集団研究部門
62. 3. 31	助教授(分子集団研究系)	鷺 田 伸 明	併任終了	分子集団研究部門
62. 3. 31	教授(相関領域研究系)	三 角 莊 一	併任終了	相関分子科学第二研究部門
62. 3. 31	助教授(相関領域研究系)	宮 仕 勉	併任終了	相関分子科学第二研究部門
62. 3. 31	助教授(極端紫外光実験施設)	小早川 久	併任終了	物性化学研究部門
62. 4. 1	教授(分子集団研究系)	井 口 洋 夫	分子科学研究所長に昇任	
62. 4. 1	助手(理論研究系)	高 塚 和 夫	助教授(名古屋大学教養部)に昇任	
62. 4. 1	事務補佐員(総合研究大 学院創設準備調査室)	清 田 貴 子	事務補佐員(電子構造研究系) に配置換	63. 3. 31まで
62. 4. 1		大 山 浩	非常勤の講師(電子構造研究系)に採用	
62. 4. 1		今 城 尚 志	非常勤の講師(分子集団研究系)に採用	
62. 4. 1		細 井 則 子	事務補佐員(分子集団研究系)に採用	
62. 4. 1		安 達 奈 美	事務補佐員(電子計算機センター)に採用	
62. 4. 1		渡 邊 誠	助教授(名古屋大学プラズマ研 究所)に併任	

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
62. 4. 1		春 日 俊 夫	助教授（高エネルギー物理学研究所）に併任	63. 3.31まで
62. 4. 1		木 田 茂 夫	教授（九州大学理学部）に併任	63. 3.31まで
62. 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	63. 3.31まで
62. 4. 1		佐 藤 恵 一	技官（技術課）に採用	分子構造研究系技術係
62. 4. 1		中 根 秀 治	技官（技術課）に採用	極低温技術係
62. 4. 1	極低温センター長（併任）	井 口 洋 夫	併任解除	
62. 4. 1	極端紫外光実験施設長（併任）	井 口 洋 夫	併任解除	
62. 4. 1		丸 山 有 成	極低温センター長に併任	
62. 4. 1		木 村 克 美	極端紫外光実験施設長に併任	
62. 4. 1		岩 村 秀	錯体化学実験施設長に併任	
62. 4. 1	※教授 （大阪府立大学総合科学部）	柳 瀬 章	教授（理論研究系）に併任	分子基礎理論第三研究部門
62. 4. 1	※教授 （豊橋技術科学大学工学部）	上 野 晃 史	教授（分子構造研究系）に併任	分子構造学第二研究部門
62. 4. 1	※研究員（理化学研究所）	阿 部 晴 雄	助教授（電子構造研究系）に併任	電子構造研究部門
62. 4. 1	※教授 （慶應義塾大学理工学部）	茅 幸 二	教授（分子集団研究系）に併任	分子集団研究部門
62. 4. 1	※助教授 （室蘭工業大学工学部）	城 谷 一 民	助教授（分子集団研究系）に併任	分子集団研究部門
62. 4. 1	※教授（京都大学理学部）	丸 山 和 博	教授（相関領域研究系）に併任	相関分子科学第二研究部門
62. 4. 1	※助教授 （金沢大学教養部）	直 江 俊 一	助教授（極端紫外光実験施設）に併任	
62. 4. 14	岡崎国立共同研究機構長	長 倉 三 郎	再任	64. 4.13まで
62. 4. 16		小 林 貴 恵	事務補佐員（錯体化学実験施設）に採用	
62. 4. 30	事務補佐員 （錯体化学実験施設）	岩 瀬 良 子	辞職	
62. 5. 1	※助教授 （東北大学理学部）	藤 村 勇 一	助教授（理論研究系）に併任	分子基礎理論第三研究部門
62. 5. 1	助手（相関領域研究系）	村 田 滋	講師（三重大学工学部）に昇任	相関分子科学第一研究部門
62. 6. 1	助手（理論研究系）	笹 井 理 生	助手（分子基礎理論第一研究部門）に配置換	分子基礎理論第三研究部門
62. 6. 1	教授（相関領域研究系）	岩 村 秀	教授（東京大学理学部）に転任	相関分子科学第一研究部門
62. 6. 1		岩 村 秀	教授（相関領域研究系）に併任	相関分子科学第一研究部門
62. 6. 1	助手（極低温センター）	榎 敏 明	助教授（東京工業大学理学部）に昇任	
62. 6. 1		小 寺 政 人	助手（錯体化学実験施設）に採用	錯体合成研究部門
62. 6. 1	相関領域研究系研究主幹（併任）	岩 村 秀	併任解除	
62. 6. 1	化学試料室長（併任）	岩 村 秀	併任解除	

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
62. 6. 1	錯体化学実験施設長(併任)	岩 村 秀	併任解除	
62. 6. 1		吉 原 經太郎	相關領域研究系研究主幹に併任	
62. 6. 1		吉 原 經太郎	化学試料室長に併任	
62. 6. 1		廣 田 榮 治	錯体化学実験施設長に併任	
62. 7. 1		岩 井 正 博	助手(理論研究系)に採用	分子基礎理論第二研究部門
62. 7. 1	助手(電子構造研究系)	中 島 信 昭	助教授(大阪大学レーザー核融合研究センター)に昇任	基礎電子化学研究部門
62. 7. 1	※助教授(東京工業大学資源化学研究所)	鈴 木 寛 治	助教授(相關領域研究系)に併任	相關分子科学第二研究部門
62. 7. 1	技官(技術課)	田 中 秀 樹	助手(京都大学工学部)に転任	理論研究系技術係
62. 7. 15	事務補佐員(理論研究系)	神 谷 摩 美	辞職	
62. 7. 16		成 瀬 結 美	事務補佐員(理論研究系)に採用	

異動前欄の※印は客員教官で現職を示す。

編 集 後 記

3月31日で長倉三郎所長の任期が満了し、4月1日付で井口洋夫新所長が誕生致しました。さらに、6月には相関分子科学第一部門の岩村秀教授が東京大学理学部に転任されるなどいくつかの重要な人事異動がありました。これらの先生方には是非本号に寄稿をお願い致したいところでしたが、異動直後のことでもあり、御多忙のことと思い、次号以降に寄稿依頼を致すこととしました。

分子研レターズ編集委員会

木 村 克 美

北 川 禎 三

那 須 奎一郎

坂 田 忠 良

高 谷 秀 正 (本号代表)

分子研レターズNo.17

発行年月	昭和62年 8 月
印刷年月	昭和62年 8 月
発 行	岡崎国立共同研究機構 分 子 科 学 研 究 所
編 集	分 子 研 究 レ タ ー ズ 編 集 委 員 会
印 刷	株 式 会 社 荒 川 印 刷