

ISSN 0385-0560

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

分子科学研究所

分子研レターズ

昭和51年10月

NO.276



* 岡崎市は愛知県のほぼ中央に位置し、平野と西部丘陵地帯との接点、乙川が矢作川へ合流するところを中心にひろがっている。古い城下町の例にもれず、気候の穏やかな、災害の少ない住みよいところである。名古屋ほど暑くない。木々の緑も濃く、大気もよく澄んでいる。乙川をはさんで市の中心部とは反対側にある研究所のまわりはとくにそうである。数多くの野鳥の声が聞かれ、林間では、きじの親子がのんびり散歩しているのが見うけられる。時には、街の中でさえ、すいすい飛んで来るオニヤンマにでくわす。

上の画は、広重の有名な東海道五拾三次の一つで、矢作橋、お城など、古い岡崎の様子を伝えている。

目次

一年をふり返って	分子研 赤松 秀雄	1
研究所の現況	分子研 井口 洋夫	2
評議員会議について	東大物性研 長倉 三郎	4
レターズ		7
分子研によせる私の期待	早大理工 東 健一	7
分子研設立運動への回想	電通大 井 早康正	9
4色問題と分子の計算	お茶の水大理 石 黒英一	12
分子研雑感	北大理 飯 島孝夫	14
分子科学と化学熱力学	阪大理 崎 山 稔	15
共同(利用)研究所への要望	名大理 井 上元道	17
分子研レターズに寄せて	九大理 小 柳元彦	19
分子科学研究所での滞在記	都城高専 中 原祐典	20
岡崎根なし草の記		
— 協力研究員として分子研に滞在して —	城西大 日 野照純	22
岡崎コンフェレンス		25
国際研究集会勧進元をつとめて	電通大 土 方克法	25
昭和51年度岡崎コンフェレンス		26
研究会報告		27
Interstellar Compounds (星間物質)	分子研 広 田 栄治	27
T C N Q 錯体の構造と物性	名大理 田 伸 二郎	29
分子科学研究所における技術研究会	分子研 高 橋 重敏	33
昭和51年度共同研究現況	分子研 吉 原 経太郎	35
外国人招へい研究員 W. Siebrand 博士について	分子研 広 田 栄治・吉 原 経太郎	38

昭和51年度大型研究設備	分子研 広田 栄治・吉原 経太郎	39
装置開発室について	分子研 広田 栄治	41
分子研コロキウム	分子研 坂田 忠良	43
編集後記		44

一年をふり返って

分子研 赤松 秀雄

分子研は発足以来第2年度の半ばを経過しました。分子研は大学附置の研究所とは異なり、官制のうえからはその母体となるものがなく、人についても物に関しても全くゼロから出発したものです。それにもかかわらず、あたかもすでに永年にわたって存在していたかの如く、またつねに多数の同僚のなかに置かれているかの如き安定感をもって発足し今日に至りました。それは専らこの分野の研究者の支持と共感によるものであります。分子研のための永年の準備期間、分子科学研究会、分子科学研究所小委員会さらには特定研究分子科学（昭和46年、47年）の実績など、今日ふり返ってみると、それらの果した意義があらためて実感として評価されるのであります。分子研が共同利用機関としての機能を有効に果しうるのは、このような基礎があるからにほかなりません。初心わするべからずというべきでせう。

この一年は研究所の組織づくりに追われたわけですが、なかでも最も意を用いたのは人事の構成に関することであります。教官の選考は公募によって行ないますが、これまでも極めて多数の方々が応募されたことで、人事選考委員会を驚かせ、よろこばせ、また困惑させているのが実状であります。それは分子研に対して如何に多くの人が期待をよせているかを示すものであります。その期待にそういう確率が極めて低いことを残念に思います。しかし、ここにみられる多数の研究者の期待は、何らかの形の opportunity として実現したいものであると思います。それは共同利用機関の役割でもあるでせう。私はこゝにみられる潜在的ポテンシャルを共同研究の強化によって生かすことを提案します。従来もいろいろな形で共同研究が行われてきました、しかし、いま一步もの足りない感じが残ります。共同研究を鼓舞する新しい形式の機構を求めるとともに、それに必要な環境条件の整備をはかるべきでありませう。分子研は単に「共同利用」の機関であるばかりでなく、進んで「共同研究」の中核となるべきものと思います。

この一年は創設期の多忙のなかに明け暮れました。そこには未だ生活のリズムというものが生まれていません。研究所自身の研究活動が軌道にのり、共同研究の機構が整い、それらがリズムカルに運営される日を一日も早く実現したいものと思います。

(1976年9月)

研究所の現況

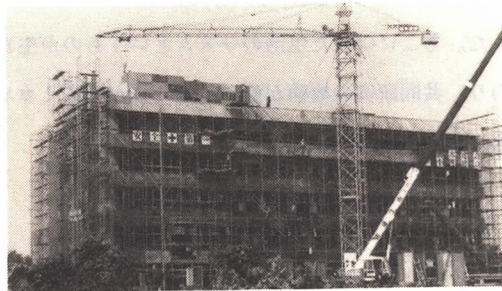
分子研 井 口 洋 夫

愛知教育大学の旧図書館を改修した分子科学研究所仮庁舎の3階の窓から眺めると、緑の中に5階の枠取りを終えた実験棟（約5200m²）の建設現場の中で、数十人の人が忙がしように動き廻っている姿がみえる。来年1月には完成移転して、その中での研究が開始出来るようにと、エネルギーセンター（700 m²；2階建）・貯水槽等の工事が先行して、その隣接場所に完成を急いでいる。一方、化学実験を主体とする化学試料棟の建設も、早期完成を期待して、精力的にその準備を進めて来ている。

1年半に亘って全国の分子科学研究者の献身的協力を得た協力者会議（所内外の研究者18名）の任務を、教授・助教授（専任・客員共）より構成する教授会に移行する日を11月1日として、準備を進めている。

51年度に新しく就任する教授会メンバーは、理論研究系教授2名（専任・客員各1名）、助教授2名（専任・客員）、相関領域研究系教授1名・助教授1名（いずれも客員）及び化学試料室助教授（専任）1名の合計7名。50年度の定員10名を加えて総計17名。創設1年半を経て、いよいよ離陸の感深しと云った所である。

教授会の下部機構である人事選考専門委員会、共同研究専門委員会も、創設の特殊事情で任期を約1ヶ年半に延期（通常は1年）して作業を推進してもらっているが、上記教授会発足と共に、新委員による委員会を構成する予定である。中でも人事選考の第一期委員会は、創設準備室時代以来、「研究は人なり」の精神で、何回もの日曜日を返上して人事選考の努力を積み上げられた。その作業は、非常に大変なものであったことを、特に記させて戴きたい。なお、51年10月に開催する最終委員会は第20回である。



実験棟

管理部は、岡田部長の許で既設の機関では考えられないような最少の人員で、懸命に創設の作業をつづけている。本レターズ1号にも書いたように、次々と盛込まれる新しい施策を発展させながら実施していくことと、日々押寄せる“すぐに処理しなければならない仕事”で、昼夜の別なく激しい勤務が続けている。一方、8月東海地区の

共済組合主催の野球大会があり、それに参加出来る所までになった。その野球に象徴されるように、チーム・ワークの良さは、所内の一員として、大いに自慢出来るものである。

研究部門は、51年度設置された理論研究系の教授・助教授及び化学試料室助教授が間もなく決まり、電子計算機センター、極低温センターの共通研究施設の設置を残して、研究所としての骨格が出来る所までになった。その肉付けは、52年度を正念場として大きい発展を期している。

技術課は、高橋課長の許で、まずは機械工作を中心に、その充実をはかっている。定員のきびしい折から、研究部門建設を直接支援する機械工作について、所内として許される範囲で最優先に充足しようとしている。

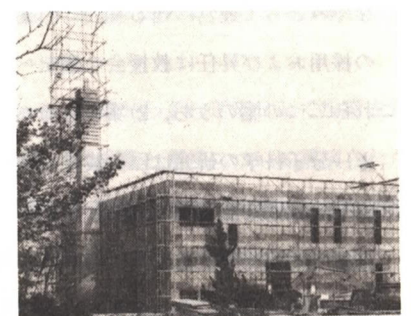
研究者と技術担当者の協力の基本は、「仕事の内容を相互に充分理解し合うことである」との方針に従っており、仕事は多忙をきわめている。名古屋大学理学部で永い歴史を持つ技術研究会——技術担当者、研究者間で技術向上をめざして行う討論会——の一端を荷なって、既に2回の研究会を分子科学研究所で開催し、参加者より実り多しとの評価を得ている（2月26日及び7月20日：本レターズ33頁参照）。参加者は九州から東京までの広範囲に亘って居る。機械工作と共に、エレクトロニクスを含む装置開発室の充実は、旧図書館の中で機械類が舐舐相摩す状態になった。新しい施設を求めることや切である。

共同研究は、この4月から共同研究・協力研究・研究会及び施設利用の4本の柱を立てて発足している。施設利用や研究討論による研究機関の高度の活用は無論であるが、是非とも、その各々の特異性を生かした他大学・研究機関との間の大規模な共同研究の実があげられることを期待している。

岡崎コンフェレンスは第3回を迎えることとなった。第3回は、「分子性結晶に於ける運動自由度」、第4回は、「共鳴及び非線型ラマン散乱」が予定されている。第10回岡崎コンフェレンスの開催時の分子科学研究所はどんな状況であろうかと夢みている。

発足後1年半、全体構想の大凡4分の1の時点に到達した状態と云えようか？ 来年度（昭和52年度）は、創設過程の正念場であろう。しかし、世の中の環境は、「創設過程だから」と云う言葉に甘えたり、言訳け出来る状態ではなく、研究所職員全員に懸命の努力が求められている。

所外の方々の暖かい支援と、率直な批判をかみしめて、第2年目の建設を押し進めている。



エネルギーセンター

分子科学研究所評議員制度について

東大物性研 長 倉 三 郎

分子科学研究所の設立計画が進められた初期の段階から、外に開かれた研究所としての機能を果たすために、研究と運営両組織の面でいくつかの機構をもうけることが考えられていたが、そのなかの一つである評議員の性格と構成や運営の問題が具体的に関係者の間で議論されはじめたのは、設立の曙光がみえはじめた昭和46年以降であったように思う。とくに、大学附置の共同利用研究所でなく、国立大学共同利用機関として設立する方向が固まりつつある段階で、日本学会会議化学研究連絡委員会の中に設けられた分子科学研究所小委員会を中心にして、関係資料（たとえば国立大学共同利用機関である高エネルギー研究所その他国立研究所の運営の現状に関する資料など）の収集や検討、分子科学研究所の運営組織の具体案の作成とそれに基づく意見交換が熱心に行なわれた。その詳細は省略するが、主な問題点は、以下に述べる二つの案の比較検討とそれぞれの案における評議員の位置づけにあったように思う。

- 1) 国立大学共同利用機関として最初に設立された高エネルギー研究所と同様に、研究の管理運営に関する重要事項について所長に助言するため評議員制度を設ける他、共同研究計画その他研究所の運営に関する重要事項について所長の諮問に応ずるため運営協議員を置く案。この案によれば、所長の任命は評議員の構成する会議（評議員会議）が推薦した者について行ない、教授、助教授、助手の採用および昇任は運営協議員で構成する会議の議をへた上で所長の推薦する者について行なうこととなる。
- 2) 1)と同様に評議員制度を設ける他、教授会が運営の実質的主体となり、広く外部研究者の意見をくみとして運営に当る案。この案によれば所長の任命は1)と同じであるが、教授、助教授、助手の採用および昇任は教授会の議をへて所長が推薦した者について行なうこととなる。

これら二つの案のうち、2)案をとることになったが、その理由は次の四点に要約される。

- I) 分子科学の研究は巨大装置を中心とする研究と異なり、多様な単位の基礎研究の積み重ねとその成果の総合化を必要とする。こうした分子科学の学問分野としての性格からみて、最も高度の研究成果をあげるためには、共同利用研としての本来の趣旨を逸脱しない範囲で、内部の研究者の自主性を尊重する方向に運営の基礎を置くことが望ましい。
- II) 内部および外部研究者の研究所の活動に対して負うべき責任とのバランスからみて、研究所の運営に対する外部研究者の関与の仕方は、客員教官として教授会に加わることや教授会の下部機構としての小委員会に加わる形が妥当であろう。

III) 研究所の運営機構は、内部の研究者ができるだけ研究活動に専念できるよう簡素なことが望ましい。

IV) 運営協議員の役割のうちとくに重要なものについては評議員会議で審議することが可能であり、その方向にそって評議員会議の性格、構成、開催頻度などを考えることは、評議員会議の審議を活発にする上にも有意義であろう。

上記四つの項目のうち、とくにIV)の項目について、さらに具体的に言えば、評議員の総数15名内外のうち、分子科学または周辺領域から選ばれる評議員の数を若干多くし、また評議員会議開催回数を多くする等の措置により、運営協議員制度を設けなくても、外部に開かれた研究所としての実質的な運用が行なわれ、また評議員会議の審議も活発に行なわれる可能性があると考えたわけである。

上に述べたような基本的な考えの上に立って、分子科学研究所の評議員制度が作られたわけである。とくに、分子科学研究所が当該分野の国際的研究センターとして活動することが期待され、したがって国際的視野に立った研究所の運営が重要であるという認識のもとに、外国人有名科学者を評議員にお願いできるようになったことは画期的なことで強調しておく必要があろう。この外国人評議員制度の実現は当時の木田学術国際局長、笠木審議官をはじめ関係者のなみなみならぬ御努力によるもので改めて深く感謝したい。

分子科学研究所が発足後、評議員の具体的な選考が進められ、外国人評議員として西独のFritz Haber (Max-Planck 協会) 研究所長 Gerischer 教授とカナダの国立研究所 Herzberg 教授 (1971 年度ノーベル化学賞受賞者) をお願いすることになった。また15名の国内の学識経験者から選ばれる評議員も決定し、本年1月17日に第1回評議員会議が岡崎市の分子科学研究所で開かれた。第1回会議で、「分子科学研究所評議員規程」ならびに「分子科学研究所評議員会議運営規則」が審議承認され、また小谷正雄東京理科大学学長が議長に選ばれた。その後第2回および第3回評議員会議がそれぞれ3月27日および6月19日に開かれた。

第1回会議にはGerischer 教授が、第2回会議にはHerzberg 教授がわざわざ来日して出席され、それぞれMax-Planck 協会およびカナダの国立研究所 (NRC) の組織と運営について講演された。これら二つの国際的に広く知られた研究組織の現状や改廃、新しい組織の設置など運営上の重要問題についても、基本的な考え方も含めて、詳しいお話をうかがうことができて有意義であった。¹⁾ また評議員会議の前後に短期研究会が開催され、両教授の他に、内外の専門分野の研究者が集まって討論の場をもつことができた。研究、交流の面からも成果がえられたといってよい。外国人評議員制度は、研究所の整備が進むと共に、研究推進と学术交流の面でも、ますます重要な役割を果たすようになるものと期待される。

分子科学研究所評議員制度は、スタートして間がないので、その構成や運営について具体的に意見を述べるには時期尚早というべきであろう。ただ、上記Ⅳ)の項目と関連して、現段階でも評議員会議の構成や運営について考えてみるべき点があるように思われる。評議員会議が実質的に審議を行なうためには、たとえば、審議内容に応じて専門分野の研究者に専門委員として加わっていただくとか、評議員会の前または後に所内教官も一緒に懇談会を開くなどの方策が考えられてもよいであろう。

(1976年10月、評議員会議副議長)

1) これらの講演要旨は分子研リーフレットNo.1およびNo.2にまとめられている。

レターズ

分子研によせる私の期待

早大理工 東 健 一

I

1878年3月11日にフランス科学学士院で、Edison が発明したばかりのロウ管式蓄音機の実験を行った。少し前に録音した会員の物理学者 Du Moncel の言葉をこの蓄音機が見事に再現したので出席していた会員は全部びっくりした。なかでも Jean Bouillard という医学の老大家は席を立って演壇にかけのぼり Du Moncel をつかまえて“お前は腹話術で我々をだましたな”と叱責した。この老大家は同年9月30日の学士院の会合でも蓄音機と称するインチキは実は腹話術だとする自説を主張し、死ぬまでその説を変えなかったという。

上のエピソードは、この出来事をみていた人の記録によったもので、独創的な発明というものは如何に常識を超えるものかという一例と思われる。

森野さんと分子研の将来について語ることの多かったのはもう十数年も前になるが、分子研では本当の独創的研究ができるようにしたい、Achievements ではだめで、Break through でなければだめだ。いままでのように海外の研究の延長線上の仕事だけではだめだなどと夢のようなことを語り合ったものである。

II

分子研の第一目標は物質研究の新しい方法論の開発と新しい分子概念である。そしてこの大目標への道を切り開いた先駆者は John Dalton (1766-1844) だった。

Daltonの原子説の起源についてはいろいろの説がある。1789年に Lavoisier が質量保存の法則を見出し、1799年には Proust が定比例の法則を確立した。Daltonは1803年に両法則が成立するのは物質が原子から成るからだと帰納した。そしてこの考の演繹として倍数比例の法則を予見し1804年実験で確めることに成功した。この思考経路は教育的であって判り易いが、本当のところは誤りであった。

科学研究で新しい突破口を見出す過程として

- 1) 直観的洞察で瞬間的に真相を把握する場合
- 2) 予期しなかった実験結果から示唆をうけた着想、それからはじまった思考の新しい連鎖による場合

の二つが有名である。しかしDalton研究者として知られる Thackray¹⁾によれば、Daltonの場合には

以上の二つの過程のいずれでもなかった。天才の閃きというものがなくて彼は原子説に到達し、これによって近代化学がはじまったのである。(Dalton にも何かの形でBreak throughがあったとする一つの憶説を私は別のところ²⁾で書いた)

ここで強調したいことは次のことである。Dalton の例でみられるように独創的な研究は必ずしも個人の天才の輝かしい閃きによって成就されるものでないこと、目標にたいする執拗で組織的な攻撃でしばしば達成されることである。Dalton はまことに頑固で執拗な自説を固守する人物であった¹⁾。

III

分子科学研究所の特色の一つは研究設備と研究者の点で現在の日本で許される最高最善であることである。20世紀後半で研究設備に莫大の費用がかかることになった。イギリス人の云うように、“中級国”では核物理の研究はだめだ。自国に特色のあるテーマを選んで、そこに許される最高最善の設備をする以外に方策はない。日本では分子科学が世界でトップクラスの唯一の分野である。ここに莫大な費用をつぎこんでもタックスペイヤーは損をしないことになる。殊に分子研は国際的に開かれた研究所である。我国の上で咲いた花がはじめて世界の文化の中心に送られることになる。これは日本の将来のため最も喜ぶべきことではないか。

第二の特色は研究所の所在地に関するものである。東京近傍ではなくて、岡崎市におかれたという点である。換言すれば東海道に沿う長大なベルト都市の中間に存する地点におかれたということである。

この特色についてはこれをすぐれた利点とみる人と欠点とみなす人とが存在する。私は、いまは長期間の視野でみなおし、これをすぐれた利点とみる一人である。分子研は設立準備に15年を要した。その輝かしい成果をうるにはおそらく10年か20年の期間を要する。第二の特色が真に日本の科学のために誇るべきものであったか否かを判定するためにはやや長い時間の経過が必要となるのではなからうか。

IV

分子研は第二年を迎え、本年さらにスタッフの増充が行われる。私事にわたって恐縮であるが、戦争中北大に超短波研究所³⁾が新設された第二年目に化学部門が増設されて私と竹田政民氏が赴任することとなった。札幌についてみると研究所の建物はあったが、部屋のなかつカラッポで部門新設費はすべて建物の費用に化けていた。丁度戦争末期の食糧不足のころであったので、東京から移った外来者には豚の飼料しか配給されなかった。今から考えると研究できる状況ではなかったが竹田助教授の超人的努力で不可能が可能となったりして、気持だけは研究所を発展させることに全力をつくしたのであった。

分子研という最も恵まれた大研究所を地方の大学の微小な研究所と比較することは、月とスッポ

ンの類であろうが、共通な現象は創立時における多くの困難の存在である。研究の才能に卓越した人が研究所の運営にたずさわったために研究所の下積みとして1日24時間の勤務をするということは誠に悲しいことであるが、長い研究所の生命を思うと、これは最も高貴な事業の逐行というべきである。

分子研に美しい研究の花がさく日の近きを祈ると共にその下地を作るために毎日下積みの御仕事をなさっておられる方々にたいして心よりの敬意を表したい。

(1976年8月15日)

- 1) A. Thackray ‘John Dalton, Critical Assessments of His Life and Science,’ Harvard University Press, 1972.
- 2) 東健一, 化学教育 24, 8月号 (1976).
- 3) 戦後応用電気研究所と改称した。

分子研設立運動への回想

電通大 井 早 康 正

分子研発足にあたって心からうれしく思うと同時に、思えば長い道程であったという感じで一杯でもある。長い歳月をかけた夢が現実のものとなったとき、よろこびよりもむしろ虚脱感に陥いるのが人間の常なのかも知れない。今から15年前といえ、私自身まだ30代前半の頃で、思えば夢多き時代であった。ちょうどその頃は3年にわたる外国留学から帰ったばかりで、まわりの同年代の友人たちを見渡してもそうであったように記憶する。当時の就職難といえ大変なもので、とくに大学にはほとんど空席がなかった。分子研設立運動をはじめて間もなく、いわゆるベビー・ブームの落し子といわれた大学の学科増、講座増がはじまったのは全く皮肉なことであった。

分子研設立計画の流れについては前号に長倉教授がかなり詳細に書かれており、また分子研小委員会が設置されてからの経緯は分子科学研究会報にしばしば報告されていて周知のことであると思われるので、この機会をかりて設立運動のごく初期の事情に触れてみたい。15年前のことであるから、当時関係しておられた諸氏もほとんど忘れてしまわれたかとも思う。私自身かなり記憶はあやしくなっているので、戸棚の片隅から古いファイルを取り出してみた。ひどく古ぼけたノートを見つけ、このなかに日誌のようなものが記されていたのである。そのなかに、‘昭和36年9月某日、電子状態懇談会(物性研)で講演、帰途長倉氏らと会食、席上大学附置研(注、分子研のこと)の話あり、設立運動を依頼さる’というのがあった。これは多分その前の某日に、帰国のあいさつのため長倉先生を訪ねた際、私が化学の分野にも物性研のような研究所がほしいというような話題を

出して（これは私自身外国滞在中に望んでいたことであったが）、長倉先生が自分も前から考えていたのだが、新設の物性研にいたるために設立運動をやりにくい位置にあると言われたことと関連している。要するに、その時点から分子研設立は私の執念となった。設立運動といっても一体何をしたらよいのか皆目見当がつかないと、またはじめのうちから偉い先生方に笑われるのが恥しかったので、第1回の会合は在京の若手のみに集ってもらった。日時は昭和36年10月6日、場所はお茶の水女子大学の学生会館と記録されているが、残念ながら出席者は明確でない。というのは、私のノートに書かれた出席者の項に次回に招く人たちの名前が入り混じっており、当日の出席者のみを正確に拾い出し得ないからである。記憶にも頼って抜き出してみると、坪村 宏（現阪大）、奥田典夫（現公害研）、前田史朗（現工大）、青野茂行（現金沢大）、森 雄次（工大）、森田利文（現群馬大）の諸氏は確実に出席されていたと思う。この仲間のほとんどは30代の半ばで、上記電子状態懇談会の常連であった。ついでながら、この会は昭和26～7年頃から長倉先生の主催ではじめられたもので、当時の電子状態若手在京研究者の唯一の拠りどころであり、その点に関してわれわれは同先生に負うところ大であった。

ところでこの第1回目の会合では、研究所の形態についてはじめての討議がなされたのであるが、当時は大学附置一辺倒であった。ただし、流動性をもたせるために客員の講座（部門）をたくさん作ること、博士研究員制度をとり入れること、同じ講座に属する教授、助教授は協同研究もできた独立に研究できるようにもすること、装置開発のためのセンターを作り技官を優遇する道を講ずること、国外との交換、交流を活発にすること、の5本の柱はすでにこの第1回の会合でまとめられており、今日分子研でこれらすべてが実現されたことはまことに感慨が深い。この最初のプランによる講座編成は理論6、実験15の計21講座であった。現在の分子研の部門編成とは名称が異なるけれども、基本的、内容的にはほぼ同じであり、この極く初期の発想が基本的には現在の分子研の性格をきめる上に極めて重要な影響を与えていることに改めて驚く。同じような第2回目の会合を同月中に虎の門の共済会館（学生会館かも知れない）において開催している。

このときの記録はどういうわけか手許にない。その後もこのような会合をくり返し、一方私自身小谷先生、森野先生、長倉先生を個別に訪問して情報をつかみながら、もっと出席者を拡大することとした。その結果が昭和37年6月5日の分子科学小委員会設立準備会の開催となったのである。場所は東大理学部化学教室の会議室で出席者は青野、赤松、奥田、小谷、島内、千葉、坪村、中川（一郎）、長倉、中島（威）、宮川、森（雄次）、森田の各氏であった。森野先生と朽津氏は所用があって欠席されたが、まったく出欠通知も出さないし出席もされない方もおられた。この出欠の通知状もファイルに発見された。この会合が本当の意味で分子研設立への Step out となったものと思う。ここでは、小委員会を学術会議の化学研究連絡委員会の下部機構とするか、または化学会

のなかに作るかが議論の焦点となったが、結局前者を採ることとして交渉することになり、当時化研連委員長の水島先生のお骨折りで小委員会が昭和41年1月に設置されたことはご承知の通りである。この席上分子研の形態について種々の議論が交換されたが、とも角設立趣意書を作成することを決定し、小谷先生、青野さん、それに私がその起草を依頼されることとなった。

この趣意書の起草は大変むづかしく、その頃は毎日この問題に頭を悩ませていた。ひとつには、“分子科学”の定義が人によってまちまちで統一しにくいこともあったが、それよりも分子科学以外の分野にアピールするように書かなければならず、悪戦苦闘したものである。

何回も書き直し、小谷先生、長倉先生、青野さんと相談して、二種類の趣意書が完成した。ひとつはかなり詳細で11ページあり、他方はあっさりしていて8ページであった。当時はゼロックスがまだ普及しておらず、複写には苦勞したことを記憶する。また、一人で設備備品や建物の計算などをしていたので、まるで地下運動のアジトのような気分を味わったことも記憶にある。事実、この頃はまだ本気で考えてくれる人が少くて、ずい分批判的な声も間接的に耳に入ってきたので、余計にその感があったのかも知れない。この趣意書をもとにして重だつた分子科学研究者にアンケート調査をしたのが昭和38年9月であった。

このアンケートは72名の方に出したが、返事がきたのは24名のみであつていささかがっかりしたものである。しかし、大勢は賛成という風に理解してよいという自信がついたのもこのアンケートの結果からであった。その後、39年末に分子科学研究会が結成され、小委の設立と相まってこの運動は軌道に乗ったという感があつたものである。

ふり返えてみると、当時相当の時間をこの運動のために取られたが、よくあれだけの時間を作れたものだと感じる。今ならばとてもあれだけの暇はとれない。長倉先生も前号に書いておられたが、私もとくに長倉先生との数限りない長時間にわたる対話がいまでも鮮かに記憶に甦ってくる。このことは恐らく生涯忘れることはないであろう。また他の同僚の方々との対話とか、誰それの意見とかもファイルの諸方に見出され、久しぶりに再読してなつかしい想いを味わった。ごく初期のこの種の運動には先輩よりの暖い励ましは何よりもありがたいものである。この点で森野先生は常に私の良きパトロンであった。

国策研究でない純粋な基礎研究の分野ではじめての国立共同利用研究所として分子研が設立をみたのは、ひとえにわが国分子科学研究者の厚い層によるものであつたと思う。それなくして、幾人かの熱心な人たちが走りまわつたとしても到底実現はおぼつかなかつたであろう。この意味で分子研はすべての分子科学研究者たちのものであり、このことを分子研で研究に従事する方々は忘れないでほしい。

いよいよ分子研も設立2年目を迎え、赤松所長はじめ所員の皆さんのご苦勞は察するに余りある。

あまり細かいことに拘泥せず、常に大きな夢を追っていただきたいと念願するものである。

(1976年9月)

4 色問題と分子の計算

お茶の水大理 石 黒 英 一

8月31日付の朝日新聞の朝刊に、130年来の難問である4色問題が解けたというニュースがのっていた。ロッキード事件にあけていた紙面に、久しぶりの清涼の気を感じられた向きも少なかったと思う。4色問題というのは、御存じのように「球面上（又は平面上）の任意の地図を色分けするのに必要で十分な色数は4色である」という有名な予想問題である。もともと印刷屋さんが気がついた経験則であって、5色をつかえば十分であること、および、53ヶ国以下の場合には4色でまにあうことは証明されているらしい。新聞によるとイリノイ大学のウォルフガング・ハーケン教授と、ケネス・アベル教授は、この問題を約2000種類の場合に分類し、それぞれについて計算機を用いてひとつひとつ調べた。最新の大型電子計算機で1200時間を要した。この仕事について以下のコメントが記されている。

- 1) この証明は数学の証明として通用するか。証明が成立するためには、洩れている場合が一つもないこと、および個々の場合についての議論が一つもまちがっていないことが保証されなければならない。計算機にかける前の段階での formulation はたとえ検証できても、計算機を用いた計算の結果については、どうして完全に正しいと主張することができるだろうか。計算機も絶対にミスをしないとはいえない。一方定理の証明には、絶対に正しいということを示さなければならない。
- 2) このような brute force を用いた解法ではたとえ解けたとしても自然のしくみを理解できたといえるか。もつとわかりやすく解きたい。ここで解かれた方法でしかとけないものであれば、興味索然、白けムードもよい所という人も多いだろう。したがって4色問題はまだ完全に解決されたとはいえず、これからも4色問題の解法についての投稿論文のため学会誌のレフェリー氏は悩まされるものと思う。
- 3) 1200時間の計算機時間を多いと考えるか、大したことはないと考えるか、いろいろの考え方があると思うが、現実の問題として、現在の日本で昼夜通して、50日大型計算機を独占する（実はのべ時間でもよい）のは、それ自身一つの事業である。check を十分にするために、別の機械を

いくつか使って調べたりすれば、さらに数倍の時間がかかるだろう。関係方面の理解と協力をうけるために、蘇泰と張儀が協力して懸河の弁をふるったとしても、至難のことと思はれる。

- 4) 4色問題が数学の中でどの程度重要なものであるのかはよくわからない。130年間もとかないでいたのは、それ程重要な問題ではなかったからかも知れない。今回やっとなげたというのは、問題の重要度に値する労力の範囲内でとけるようになったためであろう。計算機のレベル・アップのため、ようやく4色問題をとく時期が来た。もしも1200時間の10倍の計算量があるとすれば、次の計算機時代までまたねばならないだろう。

これまで長々と4色問題をとり上げて来たのは、例えば Schrödinger 方程式をとく問題でも、同様の事情があることをのべたかったからである。

- 1) 計算が正しいと主張できるか。

例えば分子のエネルギーの計算をしよう。普通は厳密解は求まらないのでどうしても近似計算をすることになる。この場合、最後の答はどこまで保証されているか。近似方法による限界の他に、計算機のソフト・ハードのミス、プログラムミス、および丸めの誤差の伝播等が考えられる。これらを神経質に取り上げれば、きりがない。どの程度贅沢に計算の設計をするのが問題である。人事をつくして天命をまつより仕方がない。

- 2) 波動関数の数値解とエネルギーの近似値が求まっただけでは何のことかわからない。ものの道理をのみこませて貰うためにはもっとわかりやすい形の解がほしい。この分野については、まだこれからで、みとおしもつけられない。

- 3) 前述したように、大型計算機を1200時間使用することは、日本の現状では困難である。近い将来、例えば分子研の計算機等でこれが改善されることを希望したい。また4色問題がそうだとまでは云はないが、やや特殊と思はれる問題に対しても計算機時間を確保してほしい。面白い問題か、つまらない問題か、それはある程度時間がたつて初めてわかることであって、初めからきめる訳にはゆかない。初めは純粹に知的な興味からやり出したことの方が、あとで役に立つことが多い。何かに使えそうだとすることでやると案外役に立たぬらしい。そういうことで、あまり初めから何の役にたつのか、費用はいくらかかるのか、いつまでに出来るのか等と根ほり葉ほり穿鑿せず、食客3000人を厚遇した孟嘗君のような大らかな気持で研究者をあつかつてほしい。

- 4) 問題をとり上げる汐時について。1927年ハイトラーとロンドンがH₂分子の有名な理論を考えた直後、その計算を実行してみせたのは、杉浦義勝先生であった。杉浦先生はノイマン展開を使って交換積分を求めることに成功した。もしもこの計算が現在の計算機でも10分もかかるものであったとすればどうなったであろうか。そのような計算は、恐らく1927年頃では「してはいけな

い計算」であり、当時はまだ取上げる汐時がきていなかったことになる。従って、その後の Quantum Chemistry の歴史はかなり書き改める必要がおこるだろう。交換積分が1927年に計算できる汐時にきていたこと、ノイマンの仕事の先行も含めて、杉浦先生の計算はまさに timely であった。

1933年のジェームス・クーリッジの H_2 分子の計算、1957年の小谷先生の O_2 および Li_2 の計算、1960年以後の、コロス・ロータン・ボルニエヴィッツの H_2 の計算等もまたそれぞれの時代での最善の計算技術を用いて、人間の忍耐力と注意力の限界に挑戦して行った計算であって、現在でも十分鑑賞にたえる傑作である。これを現在の計算機に翻訳して考えると、現在の計算機で数100時間～1000時間程度でおさまる計算量をもった問題が現在とりあげるに丁度よい汐時の問題だと云えよう。分子研においてもこのような時代の先端をゆく、しかも時代とあまりかけはなれていない研究を大いに振興して頂きたい。そのためにはまず、現在考えられる最善最大の計算機を導入することが必要であり、大いにこれが実現するように努力して頂きたい。

(1976年8月)

分子研雑感

北大理 飯島孝夫

分子研がいよいよ発足して、すでに岡崎では研究所としての活動が始まっている様子である。まことに喜ばしいことで、10年以上もの長い間苦勞をされてここまでこぎつけた関係者の方々に心から称賛の拍手を送りたい。特に、多数の方々が直接間接に協力して、分子研設立のために時間と労力を割いてこられたということは、実に素晴らしいことだと思う。一般に大学の先生とか研究者とかは、議論だけはいくらでもするけれども実際に体を動かして協力するというようなことになると全然駄目である。しかし分子研に関しては、けっしてそうではないことが示された。

私は邪魔こそしなかったと思うが、協力と云えるようなことは何もなかった一般大衆の一人であるから、これはあくまで外からみた感想に過ぎない。しかし分子科学者の集団としてのこういう体験は非常に貴重なものだと思うので、なんらかの方法で大事にしていければよいと思う。

分子研は、装置開発室などをはじめとして我国としては最高の研究設備を持つであろうし、またそうでなければならない。しかし、研究設備だけでは良い研究環境とは云えない。森、林といった自然環境とともに、リクレーション施設もぜひ充実されることを提言する。もうすでに計画ずみか

も知れないが、野球場、テニスコート、プール、屋内卓球場ぐらいは必ず作るべきである。いうまでもなく、良い研究のためには、精神身体両面での健康が第一に必要なからである。

さて分子研に何を期待するか。私は、分子研のことは分子研に居る方々が一番良いと思うようにやっていただくのが良いと思うので、何も注文をつけないのが本当だが、あえて二三希望を述べれば次のようなことになる。

共同利用研ということのようであるが、外に対するサービスはあくまで中での研究の余力の範囲に留めてほしい。それと同時に、学会とか研究体制づくりなどのいわゆる雑用を極力減らすように、分子研内の人も分子研外の者も留意すべきであろうと思う。研究成果の発表についても、論文の数を多く出すというようなことは全く不必要である。こま切れの論文なら、学生がどんどん入れ替る大学からどうせ出るので、分子研からはそういうものとは異質なものを出してほしい。

要するに、「好きな研究を好きなようにやる以外には何もなくてよい研究所」これが期待される分子研像である。

(1976年8月)

分子科学と化学熱力学 — 分子研への期待

阪大理 崎山稔

分子科学研究者の長年の希望であった分子科学研究所が、いよいよ現実に活動を開始したことは、誠に御同慶の至りであります。「分子研レターズ」に紙面を与えられた機会に、この研究所に対する期待を書いてみたいと思いますが、情報化時代の今日、地域的な立場からの発言よりも専門的な立場からのそれの方が有意義であると考えられますので、そのような立場からまとめてみます。

私が所属する大阪大学理学部関研究室は化学熱力学の研究を主要なテーマとしており、私自身はその中でも燃烧熱を中心とする反応熱測定、すなわち熱化学が専門です。日本の化学熱力学研究は、戦前において欧米諸国に比して大きく立ち遅れ、確固たる伝統を形成するには至りませんでしたが、戦後の発展によって、毎年秋に開かれる熱測定討論会の研究発表にも反映しているように、諸外国に比して遜色のない研究成果が挙るようになりました¹⁾。私共の研究室でも、高精確度高分解能熱容量測定装置や1 K以下の温度領域における高確度極低温熱容量測定装置が開発され、熱化学グループでも回転式精密ボンベ熱量計を用いてチッ素や塩素を含有する有機化合物の燃烧熱測定が高い精確度でできるようになりました。熱化学分野の尖端的な仕事の一つに装置の小型化と試料の少量化による測定可能試料範囲の拡大がありますが、私共のグループでもセミマイクロ高精確度燃烧熱測定と

低蒸気圧（～0.2Pa）物質のマイクロ昇華熱測定を具体化させつつあります。云うまでもなく、燃焼熱測定などによる標準生成エンタルピーの決定と蒸発熱、昇華熱の測定によって、他の方法では決められない自由分子の全エネルギーを決定することができます。測定のミニチュア化によって、個性豊かな種々の分子の全エネルギーが新たに次々と決定されるものと期待されます。熱化学分野の中で、高精度測定という点ではまだほとんど未開拓の対象に有機金属化合物があります。この種の化合物について主要な問題点は化学的側面²⁾にありますが、チャレンジしたい気持ちをそえられる対象です。

熱容量測定であれ、反応熱測定であれ、化学熱力学的研究によって得られる量は、ぼう大な数の分子から成る集団に関する統計力学的平均であることが一つの特徴です。このことは個々の分子の個性をさぐる上で不利な点になることもあります。逆に熱力学量が分子内のすべてのエネルギー準位に関わりを持つ点を利用して、分光学的方法では得られない重要な知見が得られる場合もあります。分子集団の研究にとって分子間力に関する化学熱力学的研究は重要な位置を占めています。また、適当な対象を選ぶことによって、統計力学的平均であることをほとんど顧慮することなしに分子の個性そのものにせまることができる場合もあり、熱化学的研究はこのタイプの系に最もよくなじみます。

化学熱力学的研究は、現実には多少とも安定に存在する系を主な対象として多くの場合構成分子の電子状態は基底状態です。最近の Chemical Reviews に共鳴エネルギーと高歪分子を扱ったレビューが相次いで掲載され、これらの古典的とさえ云える問題が今日の観点から、分析、総合されていますが、有機化学において今日なお興味の対象とされる上記の問題はいずれも電子的基底状態に大きく関わる問題です。もつとも化学熱力学的研究が励起状態と全く無縁ということではなく、例えばUV-E S C Aによって実験的に決められる軌道エネルギーと熱化学的に決められる全エネルギーの関係には興味があります。

熱化学データを解析する際に通常用いられる方法論は、結合エネルギーあるいは分子を構成する基本的な原子団の寄与の加成性と転用性を仮定して、何らかの（仮想的な）基準構造に対する全エネルギーを求め、実測値との比較において現実の分子の安定化あるいは不安定化のエネルギーを見積るものであります。基準となる理想化された構造あるいは状態を設定すること自体は、例えば理想気体概念の場合に見られるように、現実の系を取り扱う上で合理的かつ有用な発想ですが、分子エネルギーの場合には理想気体のように一義的に定義されていない点に一つの問題があります。従って、安定化エネルギーといい、不安定化エネルギーといい、設定した基準構造の定義に準拠した相対的な量であるという点で限界性があります。しかし、同様の事情は分子の全エネルギーを分子軌道法や分子力学の方法で計算する場合にも存在し、熱化学的方法のみに固有のものではありません。

ともあれ、たとえ任意性があるにしても、合理的に設定された基準構造を用いる限り、それに基いて求められる安定化あるいは不安定化のエネルギーの有用性は失われることはないだろうと思われまます。分子の全エネルギーの理論的算出に関しては、半経験的分子軌道法と分子力学が炭化水素を中心にかなりの成功を収めていますが、この面での実験的研究と理論的研究のからみ合いは今後への期待の一つであり、わが国でもこの面における理論的研究の一層の発展を期待するものであります。

以上、分子科学研究所に対する期待というよりは、分子科学研究一般に対する化学熱力学の立場からの期待のような内容を書きつらねましたが、これは分子科学研究所が日本の分子科学研究のセンターとして広い視野に立ち、上記の問題を含めた多様な問題を内外での活動を通じてとりあげてほしいと念願するからであります。もとより狭い専門的な見方からの発言であり、多くの誤謬、独断を含むことを怖れるものであります。大方の御叱正を頂ければ幸いです。

(1976年8月31日)

- 1) 但し、これは学界レベルでの話であって、わが国全体としての熱力学に対する理解と認識は、残念ながら、まだ高いものではありません。1974年にアメリカで National Academy of Sciences 主催で開かれた国内シンポジウム「熱力学とエネルギー問題」では、熱力学データの重要性がくどい程強調されていますが、わが国ではこの観点がまだ弱く、エネルギー問題の議論でも応用的側面のみが先行している印象を受けます。
- 2) いかに純粋な化学反応を実現するか、あるいは副反応の寄与をいかに正しく見積るかという問題を熱化学的研究の化学的側面といえます。

共同(利用)研究所への要望

名大理 井 上 元 道

「分子研への要望」というテーマの原稿を書くことになって、分子研レターズNo1を読みかえした。大きな目標と多くの画期的構想とに驚き、分子研設立の意義をあらためて認識した。新構想の研究所が多くの方々の御努力で物理化学の分野にいち早く実現したことは、その分野の一研究者として、大変慶ばしいことである。建設は早くも軌道に乗り新しい構想も着々と実現しているようである。

新研究所がその機能を十分発揮するには、「指導者」あるいはそのグループの性格が反映した個性ある機関となることが第一条件であると思う。新しい試みは、その開始の時点では、ある少数の人に思いきり腕をふるってもらうことが実現の早道である。おか目八目という言葉もあるけれども、それは「評論家の発する雑音」である場合も多い。当事者の熟慮の方が勝るのが普通である。

分子研の現段階では、設立運営に関与している方が、豊かな経験と見識のある方でなければ、有

効な「信号」は送りえないように思う。その意味で、私がここで雑言を発するのは適当ではない。この原稿を引き受けた軽率さが悔やまれる。私の分子研とのかかわりは、研究会に出席および出席予定であることとレターズを読んだこと位である。私が微弱な信号を送りうるとすれば、この二つを通してしかない。

もう一度分子研レターズを読みかえすと気になることが一つだけあった。「国立大学共同利用機関」という文字である。活字をみてもストレスのある場所はわからないから、読む人が勝手につけることになる。部外者としては、利用という文字にストレスを置きたくなる。私のように岡崎から1時間たらずの所にいる研究者としては大変魅力ある文字である。研究施設の共同利用は理念としてはどの機関でもやらねばならないことだが、理念がよければ実際の運用もうまく行くわけではない。研究設備の共同利用は大学の学部や学科の単位で行なっている所は多い。うまく機能をはたしている所は次のどちらかの条件を満たしている所である。1) 管理している研究者が献身的奉仕をしているか。2) 研究者が育てた優秀な技術者がいるかである。分子研が全国の研究者に奉仕するのは本来の姿とは思えない。共同研究以外の単なる施設利用は当初から控え目に計画すべきではなかろうか。2) の条件が整ったものに限るべきである。また、他人が保守している設備を安易に使用できるという状況は、研究者の墮落につながる。この際、利用の二文字をカッコで括えることにしてはどうだろうか。

分子研の研究会はすでに何回か開催されており、私も一度出席させていただいた。大変有意義な会であった。室の関係で20~30名の参加者に制限されている。今後も、この程度の規模の会にして欲しい。出席の機会均等は、一回当りの参加者数の増加ではなく、分子研には御迷惑であろうが、会の回数を多くすることで果たすようにして欲しい。分子研では、すでに技術者のための会が催された。地理的条件から、名古屋から多数の技官が出席した。これは研究における装置開発の重要性を考えると大変有効で画期的試みである。このような特色ある会を今後も期待したい。

もう一つの研究会に関する要望は出席者のための宿舎である。どうせ1, 2泊だから、国鉄の寝台車なみに三段ベットでもかまわない。そのかわり、食堂車に当る居心地のよい室を作り、そこで二次会を開く。ここでは、研究会の続きの討論もよいが、実験屋の間なら、たとえば、「ガラスと金属との接着剤」とか「アセトニトリルのたれ流し以外の効率よい処理法」など、研究の本筋からはずれていると思いがちな問題に関する話題が持上ることを期待したい。レターズには研究会の記事がある。

ついでに二次会での話題も入れる。たとえば、「接着剤として××がある。詳細は〇〇氏に」といった程度で十分である。実験では、一見本筋からはずれた所で、難題にぶっかる。二次会およびその記事がこの種の問題の解決のきっかけになれば、これも共同(利用)研究所の機能の一つであ

ると思う。また、たとえ二次会が雑談で終始しても無意味とは思わない。

具体的提案としては、末梢的なことしか思い浮ばずはざかしい限りである。もし、抽象的な要望が許されるなら、分子研がその機能を十分発揮して欲しいということにつける。そのためには、最初に書いたように、分子研が個性ある研究所になることである。誰からも批判されないような玉虫色のものは、なんとなく皆が満足感を抱くけれども、そのような無性格なものは決して進歩にはつながらない。

(1976年9月18日)

「分子研レターズに寄せて」

九大理 小 柳 元 彦

スタッフが決まり、分子研レターズがこうして刊行され出したのをみると、長年の分子科学研究者グループの夢であった「分子科学研究所」という木が根づき、芽ばえ出したことが実感として伝わって来て、グループの一員として同慶にたえない。分子科学という言葉が人々の口の端にのぼり出した初期の頃、学生でよく分らないままに分子構造総合討論会の懇親会や説明会などに出席させてもらい、諸先輩たちの熱い議論に会場で励起された感触を今でもしばしば思い出すことがある。話の具体的内容は残念ながら殆んど失念してしまったが、その場の熱気だけは強く脳裡に焼付けられている。それから10余年、土壌は充分に耕され、種子は蒔かれるばかりになっていたというべきである。

分子科学の将来のビジョンについては既に幾人かの人が書き、幾人かの人が熟っぽく語りかけているので、それを重複させずに書くことは殆んど不可能である。そしてまたその時期は終わった。日進月歩のこの学問分野で、世界に伍し、世界をリードして行くためには、良かれ悪しかれ、最新の情報の交換は不可欠であろう。筆者は1970年8月から満2年間米国ニュージャージー州立Rutgers大学¹⁾の化学教室に学んだが、そこで最も驚いたことは各研究分野に対する情報交換の速さであった。経験がないから東京周辺のことははっきりとは分らないが、とてもアメリカ北東部の情報網にはかなうまい。そういう意味で岡崎コンフェレンスがもたれ、また外国人招聘の制度が認められていることは素晴らしいことだと思う。許される範囲内で、日本から留学中の方々や帰国後間もない方々へ分子研レターズへの寄稿をお願いし、協力をいただくことも大切なことであろう。

Born-Oppenheimer近似のやぶれが言われだして久しい。電子状態関係ではまた最近この言葉が使用される頻度が多くなっているように感じる。同じ言葉でもそのもつ内容や意識は時代と共に着

実に拡がり、深まっている。歴史は繰返すという陳腐な言葉があるにしても、歴史は閉じた系を繰返しているのではなく、例えばラセン軸上を進行する如くにその意味あいを異にしつつ繰返している。いつの頃からか討論会などで分子構造関係と電子状態関係とで相互討論の場の少いものになったのか分らないが、学問の深化と共にまた相関を強めはじめる傾向にあるのは喜ばしい。一昔前とは違った具合にお互いの分野の知識が必要となる時代が来ているであろう。その相関の最たる場所に分子研があって欲しいと秘かに願っている。

蒔かれた「分子科学研究所」という木は今芽吹き、根を上げ、生長をはじめた。これからスタッフにより水や当を得た肥料が与えられ、また将来の木の姿が描かれつつ、その時その時に応じて、どの枝が伸ばされどの枝が剪定されるかが検討され実行されるだろう。喜びは実際に現場で手入れを行なうスタッフに多いかも知れないが、同学の多くの人達にとっても年々歳々大きくなり、新しい枝を出し幹となって生長していくその姿を眺めさせて貰い、新しい手入れの方法を学ぶのも少なからざる楽しみであろう。将来、その木がどのような花をつけ、実を結ぶかは土壌がいかに深く耕やされ、改良され、時間を得た水やりや肥培がいかに丹念に行なわれたかに強く依存しているけれども、結ばれるであろう花や実を一目なりとも見させてもらうのは、われわれにとって大きい楽しみであり、その生長を暖かく見守ろうではないか。

(1976年8月)

- 1) あまり知られていないから敢えて付記させてもらうことにするが、日本人で初めてアメリカの大学に留学したのは肥後実学堂の横井小楠の甥・横井佐平太、太平兄弟で1866年秋この Rutgers 大学に入学している。以後20年間に約300名の人達がこの大学に留学しており、またこの大学の関係者が多数来日している。この大学の日本の近代化に果たした役割りは甚大である。

“分子科学研究所での滞在記”

都城高専 中原祐典

分子科学研究所（以後分子研）が岡崎に開設されたその年度にこの研究所で研究活動に参加できたことを誠に幸いに思います。まず本紙上を借りて感謝の意を述べさせていただきます。同時にまた分子研レターズへの寄稿を依頼されましてこの上なく幸いに思っています。分子研に滞在した期間(昭 51. 8～昭 52. 3)は短かったけれども創設期の基本土台ができ上がる過程に出合ったのは私にとって非常に有意義なことだったと思います。次に滞在中に経験したことや感銘したことについて簡単に触れてみようと思います。

私は昭和51年4月にちょうど分子研のスタートと同時期に井口先生の御好意で東京大学物性研究

所に留学して勉強させてもらうことになりました。ここでは、数年前から研究の一つのテーマとなっているチトクロムC₃、ピドロゲナーゼ関係のグループに参加させてもらうことになりました。私に与えられた題目はヘム蛋白の薄膜を作製し、その薄膜の光学的、電気的物性を調べることでした。これらの蛋白の電気伝導を薄膜状態で測定しようという動機はチトクロムC₃の還元過程で吸収スペクトルに異状ピークが現れるという事実が発見され、この異常ピーク時にヘム間を電子が動くためではないかとい仮定からであった。その電気伝導度を測定するためには一様できれいな薄膜をつくる必要があり、私達はまずチトクロムCの酸化型と還元型の両方で薄膜をつくるという実験に取り掛った。物性研究所に滞在しているときはチトクロムC薄膜合成に対する実験で失敗の連続でどうしてもきれいな様な薄膜をつくることができなかった。このような状態の時、実験室の都合により物性研究所より分子科学研究所の方に舞台が移されたわけです。この移行したことがこれらの実験を進める上で非常にプラスになったようです。なぜなら分子研に移って来たときには実験室には測定装置は何一つなくいままでの既定概念を根底から変えて考えることができたからです。

私が分子研に来たときは研究者は2人で、管理部の方が10数人というだけでした。本拠地は旧図書館を改修したもので実験室には不向きな建物でした。その実験室には、クーラーの設備と配電用のレースウェイがあるだけで電話は床の上に置かれたままの状態で伽藍堂の状態でした。そのような状態の中でも実験はすぐにでもできそうな気持ちを与えてくれ外部から来ている私には先行きの不安は全く感じられませんでした。実際何もなかったはずの実験室が1ヶ月後には実験室の機能を持つに到り、薄膜作製にも成功することができました。そして2ヶ月後には電気伝導のデーターも取れるようになりました。このように驚くべき速さで実験室が整備できたのは管理部の機能の敏感さにあるのではなかったかと思います。とにかくここでは即行動と言った状態で私のように外部から来ていて短期間しかいないものにとってはまさに気持ちの良い対応でした。また共同利用研究所としての機能を十分に備えているように感じられた次第です。そんな状態の中でも一番悩まされたのは工作室がなく、また相談できる人もいない5ヶ月間でした。例えば電気伝導用のシールドケース(10cm×10cm×20cm)を作ろうとしても思うように工作できず無細工なものが1週間してでき上るという有様でした。しかしこれも5ヶ月後には装置開発室が動き出し、またたく間に便利になり新しい装置も開発されるようになりました。私にとって印象深く残るのは電気伝導用の真空装置を作ってもらったことです。この装置は真空排気ができ、光学的実験、電気的実験、蒸着といろいろの実験が液体窒素温度から高温までできる万能型で取り扱いが簡単でしかも簡便にできています。ここでもまた共同利用研としての一面を感じることができました。

分子研での人間味溢れる対応と自然環境は素晴らしいものがあります。分子研での慰安旅行（下

呂温泉)にも参加させてもらい皆さんに親切にもらったことも印象的ですが、さらに分子研の中の銀杏の実狩りをしてリヤカー一杯の収穫をあげたというのは忘れられない思い出になりそうです。その銀杏の実を宮崎に持って帰って植えてみたら10個のうち10個とも芽を出して育っています。自然環境にも素晴らしいものがあり、四季の変化を強烈に伝えてくれます。この自然環境はこのままに残して欲しいと思うくらいです。

最後に、実験室によくこれ激励して下さった所長以下分子研の方々に深く感謝致します。

(1976年9月)

岡崎根なし草の記 — 協力研究員として分子研に滞在して —

城西大理 日 野 照 純

今から三年ばかり前、私が分子科学若年の会で事務を取扱っていた頃、何故若手の会なるものが、そしてその上部構造(?)である分子科学研究会というものが設立されたのかを色々な方に尋ねてまわった事がある。その結果、若手の会は若手研究者間の親睦や相互の啓発のために作られ、一方研究会の方は早い話が分子科学研究所を創設しようという目的のために作られたらしいという事がわかった。「実に十余年の長きにわたって研究所設立にむかって、種々の努力が払われてきたとは……」というのがその時の私の偽らざる感想であった。

そして現在、その分子科学研究所が設立されて一年数ヶ月。この新しい研究所に協力研究員として何度も訪れるようになるとは不思議な巡り合わせだと感じている次第である。

さて前置きはこれ位にして、私の岡崎での何回かの滞在記を記すと……。

はじめて分子研を訪れたのは去年の十月、分子構造総合討論会へ行く途中に立ち寄ったもので、その時は分子研というのは一体どんな所にあるのかなといった、見物がてらのものだった。小高い丘の上に建っている旧愛知教育大の図書館は、「なかなかモダンで良さそうだな」っていうのが第一印象だった。実は、この第一印象はいざ仕事をはじめてみると、見事に裏切られる事になった。

本格的に仕事のために分子研を訪れたのは、まず今年の一月下旬、東大物性研の井口研究室にあった真空紫外の分光器などを分子研に移管し、それらの装置類を設置・調整するためだった。この時は、この冬一番の寒波が日本全土をおおった時で、底冷えがして岡崎という所はずい分と寒い所だナァと思った。しかし、東京に帰ってみると東京も多少暖かいかといった程度で寒さにはそれ程の相違はなさそうだという事がわかったが、これは後日談になる。この時は分子研の研修所(とい

う名の宿泊施設)に泊ったのだが、ここで一つのエピソードが生れた。というのは、この研修所には立派な応接室や浴場・台所といったものがあるのだが、台所にはコップぐらいしかなかった。これでは、「毎日水でも(ビールでも?)飲んでいろ」という事らしく、満足に食事できない。そこで翌日、すぐに用度掛の熊谷さんの所へ飛んで行って、食事をするためのナベや食器の類を買って欲しいと頼み込んだ。その成果が、現在の研修所の台所というわけで、ここに泊られる方は是非これらの食器類を使用して戴きたい。

ところで仕事の方は、ガランとした実験室——実の所、今は仮住いの建物であるため、床は悪く、電源の容量不足など余り使い良い部屋ではない——に、配線をするためのハンダのコードを作る事から(正に、ゼロから)始めて結構実験室らしい雰囲気になり、予定の二週間のうちにだいたいの調整を終る事ができた。ただ、この時は測定機器の出力コネクターがなかったりしたため、二月にもう一度測定系のチェックのために分子研にやって来なければならなかった。

次に訪れたのは、三月下旬。本郷で学位記を授与された直後、同じ井口研の鈴木・佐藤両君とはじめて車に乗って岡崎へ行ってみた。東京台東区の我家から、約320 km。時間にしておよそ4時間で分子研に着く。新幹線を利用すると、3時間半ほどかかるから、時間的にはマアマアだが、費用の方は乗員数に応じてマチマチになる。現在の所、疲労度などを考えれば、新幹線を利用した方が better というのが、数回、岡崎・東京を往復した者の感想である。

車の話のついでに記すと、四月の交通ゼネストの時、赤松所長を分子研から鎌倉のお宅までお送りした事がある。流石に、この時は一人で運転して来る時と違い、極力安全第一にと心掛けて運転したが、それでも途中30分程休憩を入れても4時間で、無事お宅へお送りする事ができた。所長は、車内で克明にメモをとられ、今度は御自分で運転したいとおっしゃっていたが、この八月に鎌倉・岡崎間の往復をなさったそうである。

話は、大分脱線したが元に戻すと。3月下旬から4月上旬にかけての岡崎での仕事は、機器センサーの共通機器として購入した Perkin Elmer の P S18型光電子分析装置の操作について、同社の Lempka 氏の Lesson をうける事だった。この時は、常に2・3人が彼につきっきりで operation についての説明を聞きながら、実際に操作してみるといった事を連日十時間ばかりやった。それだけでは余り能率があがらないので、研修所に帰っては Manual を読むといった具合で、結構きつい数日間だった。しかし、P S18は——まあ装置というものはそういうものだが——慣れてしまうと非常に使いやすく便利にできている。ただ難点といえば、専属の Operator がいないということだろうか。

この時以来、これまで何度となく分子研を訪れているが、分子研の、それも現在一番の大所帯で

ある井口研の近況を伝えてこの小文を終えることにしよう。この夏の井口研のメンバーは協力研究のため短期間訪れる人を含めて9人で、大体三グループに分れて研究を行なっている。もっとも三グループとはいっても、全員が一階のフロアーを占めているので、食事に行くのや帰宅するのほとんどが全員一緒という事になる。特に昼食の時などは、技術課の高橋課長や鈴井君も混って、岡崎の町へゾロゾロと一小隊が繰り出す事になる。また帰宅するの、大体が4・5人以上一緒に12時を過ぎる事もままある。これは職住接近も良い所で、通勤時間が徒歩5分内外といったためもあるが、皆——特に一人住いの連中は——岡崎にやって来てから数ヶ月の根なし草のため、早く帰宅してもする事がないせいかもしれない。こういった生活は、日本の分子科学発展のためには好ましいとも思えるが、研究者の健康管理という点から考えると疑問を感じざるを得ない。もっとも、このようなオーバーワークも分子研についている研究者の人員が少な過ぎて、一人一人に過大な負担がかかるためとも思われる。新しい研究棟の完成を心待ちにすると共に、人員の増加を早急に望みたい次第である。

(1976年9月10日)



一階実験室



分子研仮庁舎（愛知教育大学の旧図書館）

岡崎コンフェレンス

国際研究集会勧進元をつとめて

電通大 土方克法

すべての学会は楽しいものでなければならない。学会で研究成果を交換し合うことは、われわれにとって最高の楽しみであり、拡大された雰囲気の中でわれわれはその生き甲斐を新たに感ずるのである。学会を楽しむために、世話役は細心の注意をはらい、周到な計画を立てなければならない。わが国の学会の多くは単なる講演の寄せ集めであるが、物理学会・化学会の年会ならいざ知らず、ある特別な目的で開かれる小規模な学会には、もう少し工夫が欲しいものである。

本年2月15日～18日に分子研で行なわれた第二回岡崎コンフェレンスは理論化学討論会という極めて漠然とした主題であったが次のような諸点を考えて立案が進められた。

- 1) 出席者全員が討論に参加し、活発な発言をすること。
- 2) 限られた予算内で出来る限り豪華な雰囲気を作り上げること。

第一の点については、外国人出席が、P. W. Atkins (Oxford), P. S. Bagus (IBM), C. Moser (Paris) の3名に対して、日本人出席者が27名という集団を4日間英語で維持することが可能だろうかという心配があった。それで、先づ日本人出席者に“*What is Theoretical Chemistry?*”というEssayを予め書いてもらい、お互いの立場と意見の相違を知った上で会議に臨むという方法をとった。このEssay集は今読み返しても興味深々たるものがある（赤松所長もお気に召したらしく何部か分子研に保存されていると聞く）。そして外国人には前以ってこれを手渡して、なるべく日本人に発言の機会を与えるように頼んでおいた。また討論の焦点を少しでも絞るために、Sessionを、Computationalと、Non-computationalに分け、前者にはBagusと日本人Speaker3名、後者にはAtkinsと日本人Speaker2名を当て、それぞれ最新的话题を提供した上で討論に入った。心配したようなことは全然なく、3時間余りの討論はあっという間に過ぎてしまった。今にして思うと、英語を苦にしない日本人が10名居れば十分討論の形をなすようである。

予算とは常に不十分なものである。殊に旅費についてはわれわれはそれを薄めて使うことに熟練している。しかし経済大国日本の恥を外国人に曝したくないので、出席者全員から夕食代を徴収することにした。だがいざふたをあけてみると、事務局の方々が並々ならぬ努力をされて、リセプションパーティーや、お茶の時間など、想像していた以上に立派なものを開いていただいた。事務局にもいろいろあるものだと感じ入った次第である。結局徴収した金額の一部は出席者に返却した。

今回の会議を一応成功と見るならば、その原因はわが国の理論化学研究者が分子研に寄せる関心

と期待であろう。また分子研の全員が持つ創立の熱意であろう。ただ何としても国際研究集会と言いつつながら外国人を1,2名しか呼べないのは本当に残念である。今後の岡崎コンフェレンスが、その規模・内容共に無限の発展をするよう、所長はじめ所員各位の一層の御努力をお願いしたい。われわれも及ばずながら常に一臂をお貸しする用意があることを申し添えておく。

(1976年9月3日)

昭和51年度岡崎コンフェレンス

第3回 岡崎コンフェレンス

「分子性固体における運動自由度」について

好評だった第1・2回岡崎コンフェレンスのあとを受けて、第3回は、「固体における運動自由度」と云う表題で昭和51年12月上旬に開催すべく準備を進めている。

その具体的な内容は、固体内における核の運動に焦点をあてた研究会となる。転移や融解をひき起すような大振幅運動（自己拡散を含む）の研究の発展を含めて、異なる運動モード間の相互作用や、分子間力を基礎とした運動状態の解析、他の性質への運動の影響等が討論の中心となるであろう。

たとえば、「n-パラフィン回転相の分子間相互作用と相転移」とか「ポリエチレン結晶中のプロトントンネル効果と誘電損失」などの話題が提供される予定である。世話人には提案者の千原秀昭教授、所内から井口洋夫教授があたり、ケント大学からJ. G. Powles 博士を招へいする予定である。

第4回 岡崎コンフェレンス

共鳴および非線形ラマン散乱

昭和50年度、田隅三生氏（東大理）より提案のあった標記会議は、昭和51年度第4回岡崎コンフェレンスとして採択された。世話人は坪井正道氏（東大薬）、広田栄治氏（分子研）である。

招待講演者としてはProf. T. G. Spiro (Princeton 大)を予定しているが、この他にDr. W. Siebrand (NRC, カナダ)、Prof. F. A. Miller (Pittsburg 大)も参加の見込みである。会期は明年1月20日前後で、共鳴ラマン効果の実験とその理論的解釈、電子励起状態の分子構造などについて討論する予定である。

研究会報告

「Interstellar Compounds (星間物質)」

分子研 広田 栄治

外国人評議員 Gerhard Herzberg 博士 (カナダ NRC, Herzberg Institute of Astrophysics) の来日を機に、昭和51年3月26日標記のテーマで one-day discussion が行われた。

赤松所長の挨拶に始まり、以下のような招待講演とコメント、討論があり、高柳和夫教授（東大宇宙航空研）のまとめで閉会した。参加者は S. H. Bauer 教授 (Cornell 大学)、J. I. Steinfeld 教授 (MIT) をふくめて29名であった。講演者、講演題目と講演の主な内容は次の通りである。

G. Herzberg : Recent Spectroscopic Studies of Interstellar Molecules

先ず星間空間で、そのスペクトルから同定された分子を歴史的に概観し、マイクロ波スペクトルによる研究の最近の一例として Oka らの $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$ の発見 (Sgr B2 における) が紹介された。紫外スペクトルでは前期解離、とくに Auger 過程について詳しく論じ、星間分子の生成消滅に対するその意義に触れた。現在、 $30\text{\AA}$ にも及ぶ幅広い星のスペクトルが26本も観測されているが、明確な説明が与えられた例はほとんどない。最後に NRC で精力的に進められている分子イオンの分光学的研究が紹介された。実験室で紫外吸収が観測されたのは CH^+ のみとのことである。また星間空間 (NGC 7027) で観測された赤外スペクトルが HeH^+ ではないかという推測が述べられたが、これについては未だ異論もあるようである。

Herzberg 博士の講演は、主題が博士のもっとも興味をもっておられることでもあり、非常に力のこもったものであった。

藤田良雄 (東海大学) : Search for HCN, CH_2 , and C_2H_2 in the Photographic Infrared

Spectral Region of Carbon Stars

炭素星の可視部のスペクトル ($7800-8400\text{\AA}$) の解析から標題の分子と CN, C_2 , H_2O , 金属類が同定された。CN については $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ 存在比も推定した。藤田先生が今も研究の第一線で活躍しておられるのが印象的であった。

森本雅樹 (東京天文台) : Millimeter-wave Molecular Radioastronomy at Tokyo Astronomical Observatory

オリオンAのホルムアルデヒドのスペクトル (2mm, 4mm) にはじまる東京天文台での健闘ぶりが次々と紹介された。最近のヒットの一つはメチルアミン (Japanese molecule !) の発見である。

メチルメルカプタンは見出されなかったが、 $\text{HC}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{N}$ 、 SiO (振動励起状態)、 CH_3OH などが観測された。星間分子の生成についてもふれ、 N_2H^+ を除いて $\text{O}=\text{O}$ 、 $\text{N}=\text{O}$ 、 $\text{N}=\text{N}$ などの二重結合をもつ分子が見出されていない事実を指摘した。

海部宣男 (東大理天文) : コメント

SiO のスペクトルにはメーザー作用があり、現在振動第2励起状態の回転遷移まで観測されている。これらのスペクトルを出す星は一定の型 (Mira late type) に属するもので、スペクトル強度の時間変化は赤外線フラックスの増減と相関がある。一方電波望遠鏡で観測されいながら実験室でのスペクトルと対応しないものがいくつか知られており、実験室における研究、とくに不安定分子についての測定が要請された。

中野武宣 (京大理物理) : Star Formation in a Magnetic Interstellar Cloud

重力による星の凝縮生成を妨げる要因としては、気体の圧力 (運動エネルギー)、攪流 (turbulence)、回転などがある。これらに加えて磁場の影響が無視できないことを指摘し、詳細な解析を行った。

清水幹夫 (東大宇航研) : コメント

コメットにおける分子の存在をレビューした。コメットの核は“汚れた氷”から成立っているものと思われ、実際 H_2O^+ が同定されている。この他では CH_4 、 NH_3 が多く、 CO 、 N_2 、そして恐らく CO^+ 、 N_2^+ も存在していると推定される。

斎藤修二 (相模中研、分子研) : Laboratory Observation of Interstellar Molecules by Microwave Spectroscopy

実験室における不安定分子、フリーラジカルのマイクロ波分光の成果がまとめて紹介された。とくに相模中研における最近の輝やかな成功として HNO 、 IO 、 CHO 、 $\text{CH}_2=\text{CHOH}$ 、 HO_2 の検出が詳細に述べられた。

高木光司郎 (富山大文理) : コメント

星間空間におけるメチルアミンの回転準位分布を 2.7 K の輻射場との相互作用、水素分子の衝突による励起を考慮して計算し、観測されたスペクトル強度を見事に説明した。メタノールについての同様の計算結果も併せて報告された。

星のスペクトルは、可視部を中心として古くより研究され、実験室での分子分光学の結果に基づいて解釈されてきた。Herzberg 博士も戦前からこのような分子分光学の天体への応用に関心をもたれ、多くの輝やかな業績を挙げられてこられた。その後赤外部、紫外部、さらに近年ではマイクロ波領域へと研究が拡張され、分子分光学と天体物理学の交流はますます盛んになってきている。

このような背景の下に、今回のシンポジウムも非常に内容豊富な、また興味深いものであった。

最後にこのシンポジウムを企画していただいた高柳和夫教授に厚くお礼申上げる。

(1976年9月7日)



前列左から 朽津、パウアー、ヘルツベルグ、赤松、藤田
後列左から 井口、清水 (忠雄)、スタインフェルド、高柳

「TCNQ 錯体の構造と物性」

名大理 田 仲 二 朗

本年7月7、8、9の3日間、上記の研究会が分子研における“共同研究”のカテゴリーに属する研究会として開かれた。

御承知の通り、分子研では、二つの特別研究テーマの一つとして「興味ある物性を持つ分子設計の研究」として新物質の研究がとりあげられているが、本研究会の主題はこの特別研究テーマと密接に関係するものである。この会のプログラムは、TCNQ 錯体の示す興味ある物性をそれぞれの分野の専門家に解説していただき、他の研究者との議論を通して、電導性TCNQ 錯体の構造と物性についての見通しのよい、イメージを得て、将来の発展の基礎としようという希望でもって計画

した。

低次元電導性物質として、最近特に注目されているSNポリマーと、一次元白金錯体の物性についても、それぞれ第一線の専門家に詳しい解説をいただいて、電導性TTF・TCNQなどの示す物性が他のTCNQ錯体との関連よりもむしろこれらの低次元導体と、極めてよく類似していることに驚いた。

将来この分野が、我国でどのように発展するかについて予想することは勿論出きないけれども、これ迄に培ってきた研究者の厚みが、将来必らず花開くものと期待したい。以下簡単に研究会の内容をプログラムの順に報告する。

7月7日

田仲二郎（名大理）「電導性TCNQ錯体研究の現状」

各種の電導性TCNQ錯体の電子構造と電子スペクトルの関係を実験結果と電子構造のモデルについての対比とから論じた。TTF・TCNQ, NMP・TCNQなどの電導性錯体の性質がドナーからTCNQへ不完全な電子移動によっていることを示した。TCNQとTTFの際立った特質は、それらが中性分子としてもイオンとしても安定に存在しうることによって来している。

小林速男（東邦大・理）

「電導性TCNQ錯体の結晶構造とその特長」

ごく最近に研究された電導性TCNQ錯体約20種の結晶構造の特長について、報告し、それらが、すべて、TCNQ部とカチオンの部分とが、分離したコラムを形成していること、また TTF・Br_{0.71-0.76}に示されるように、必ずしも整数比ではない組成のものがあり、結晶周期としても、超周期構造を示すものがあることが報告された。

鹿児島誠一（電総研）「TTF・TCNQのKohn異常」

TTF・TCNQのX線散漫散乱を各温度で測り逆格子点の間に見出されるピークの解析から、0.29b^{*}, 0.41b^{*}, 0.59b^{*}の新しい周期が生じていること、それらがLA或いはTAモードの格子振動のソフト化に伴うKohn異状ではないかということを示した。ピークの温度変化の様子からは、これらが一つの起源の現象であるかどうかは、なお断定できないようである。

請井一利（東北大・金研）

「NMP・TCNQのKohn異常」

NMP・TCNQについても、TTF・TCNQと同じような散漫散乱が見出され、その周期をPeierls転移のおこる波数とするとNMPからTCNQへの電子移動が0.27であるという。

7月8日

山地邦彦（電総研）

「電導性についての理論の現状」

まづ低次元電導体の示す物性、例えば伝導度などを示した上で、これの解釈についてのFröhlich Bardeen, Lee-Rice-Andersonらの理論の紹介がなされた。

TTF-TCNQなどで問題になっている電荷の部分的移動（fractional charge transfer）については、Madelungエネルギーの計算がTorranceらによってなされている。

上村洸（東大・理）

「(SN)_xについての理論と実験」

(SN)_xについての研究が、この二年ほどの間に急速にイギリス、アメリカの各地でなされた経過について紹介された。Cavendish Lab, と東大・物理のグループとで協同で行われたバンド計算の結果に基づいた実験の解釈、例えばPeierls転移のないことなど、広汎な物性の説明がなされた。

犬石嘉雄・金藤敬一（阪大・工）

(SN)_xを合成し、実験を行った経験について紹介があった。

住斉（電総研）

「TCNQ塩の電子構造とKohn Anomaly」

TCNQイオンの上の電子間相関エネルギーUは、電子移動積分tにくらべて大きい場合が多いので、その時はTCNQアニオンはダイマーを作り易い。いろいろな場合について計算に基づいて考察した。

安西弘行（電総研）

「TTF・TCNQおよびその関連物質の合成」

TTF・TCNQの単結晶を、電総研でTTFの合成から始めて作った体験を基にして、主としてアメリカで、これ迄にどのような新しい錯体が合成されてきたか、また例えばイオン化ポテンシャルや電子親和力、分極率についてどの様に考えられているか紹介された。

城谷一民（東大・物性研）

「新しい低次元電導体物質」

高圧下（30Kbar～100Kbar）における各種TCNQ錯体の伝導度は、加圧しない場合に比してかなり増大し、常圧の単結晶の最高値位になる。混合原子価を持つ各種の白金やイリジウム錯体の場合でも似たようなことが見出される。多くの実験例についての解説がなされた。

飯田陽一（北大・理）

「ラジカル塩の振動スペクトル」

クロラニルなどのイオン・ラジカルの赤外部に見出される振動スペクトルの解析と問題点が示された。

7月9日

長沢博（筑波大・物理）

「一次元白金錯体の物性」

Krotmann らによって研究された白金錯体 $K_2 [Pt(CN)_4] \cdot Br_{0.30} \cdot 2.3 H_2O$ (略して KCP) を中心にして、その構造と各種の物性について詳しい解説がされた。他の白金錯体とはまた桁外れの性質を示すこの錯体は、Peierls 遷移、光スペクトルの研究などが詳しくなされており、一つの優れた研究例と考えられる。

池本勲（東大・理）

「電導性錯体の ESCA による研究」

TTF・TCNQ はじめ、各種の TCNQ 錯体の電子構造、特に表面のそれを研究するのに、ESCA は最も適している。例えば N_{1s} 準位のスペクトルを見て、TCNQ 上の荷電数を推測することができる。

近藤保（東大・理）

QNMP (TCNQ) など、磁性と比熱の研究を行ない不純物の影響をしらべた。

坂田忠良（分子研）

数種の TCNQ 錯体の赤外部の振動スペクトルについて、電子遷移との重なりがある場合には、いわゆる Fano 効果が観測されることを示した。今後さらに赤外部の研究を進めることの重要性が強調された。

丸山有成（お茶の水大）

TTF-TCNQ などについて、電流、電圧微分曲線の解析を行うトンネル分光の方法でバンド構造を推定した。

井口洋夫（分子研）

終りに世話人の立場として、三日間の議論を振り返り、今後進むべき方向についてのまとめがなされた。

(1976年9月14日)

分子科学研究所における技術研究会

分子研管理部技術課 高橋重敏

近年における実験技術の発展変貌は、目を見張る程速やかで著しい。実験装置、測定装置は、単なる精密化や大型化だけでなく、新しい原理に基づく技術や、多様な技術が一つの装置に集約されるなど、質的な変化は特に注目される。化学分野でも、ガラス製の容器の利用分野に、高真空状態に最適のステンレス容器が著しく進出しているのは、その一例である。

このような科学の先端的研究を遂行するため、高度な技術を保有する技術者からなる研究支援組織が必要不可欠である。しかるに、我が国の研究支援技術の体制は、国際的レベルからは未だかなり遅れていると聞いている。こういう事態を招き、かつそれが急速に改善される見込みが一般には見られないというのは一体何に依るのであるだろうか？ ここでは、当分子科学研究所における研究支援技術について私の具体的な考えを明らかにしたい。

当研究所の新設に当っては、上記の問題点を正しく把握し、これを排除すべく、従来と異なって新しい方式がとられた。すなわち、研究者と同数に近い60数名の技術者を擁する研究支援組織が、文部省所轄研究所をしては始めて技術課として発足することになった。個々の技術者は、装置開発室、機器センター、化学試料室、極低温室、電子計算機センター、各研究室等にそれぞれ配属され、組織上は、一応整った体制になっている。有能な技術者を確保するために、処遇面でも配慮がなされている。

さて、このように研究支援組織が行政上確立されれば、すべて有機的に働いて、その力を充分發揮できるか、という点になると大きな疑問があると言わなければならない。大学や研究所における技術者の職場は概して閉鎖的で、技術者間の交流が一般社会の常識からして、大変少ないのである。これは、研究を支える技術の内容が多岐にわたるため生ずる一種の専門分化にも原因がないわけではない。技官を閉じた場所におくことを研究者が望む傾向があったとまでは言わないが、いずれにしても技官が研修を行ったり、技術的交流を行って向上をはかる機会が概して限られたものであったことは事実である。こういう状態では、技術者も独善におちいりやすく「余人を以て代え難い名人」は育っても、近代化された先端の技術を以って機能する態勢を得ることはできない。私が主張したいのは、名人を批判したいのではなく、名人の他に更に「技術者」を必要とするということなのである。当研究所の装置開発室に限って考えても、機械工作、ガラス工作、電気回路工作の三つが、技術の交流討論を通じて常に切磋琢磨して、技術の向上をはかると共に、極低温その他の全技術者との密接な協力関係を保って始めて、有機的な研究支援態勢ができるであろう。新しい技術の進

歩に遅れないように、積極的に技術の向上をはかる必要がある。これを実現する方策として、技術者の研修や相互交流を行って、技術者自身が切磋琢磨する機会を持つべきであろう。

私は名古屋大学理学部在籍中、このような考えから、十数名の技術者と共に一種の研究会を開いてきた。この会では、新しい技術を勉強したり、装置の設計製作上の問題等について相互批判や討論を行って、各人の保有する技術の質と量を拡大するのに大きく役立ったと確信している。この経験に基づいて、分子科学研究所でも同様の趣旨の技術研究会を開くのが望ましいと考えたのである。

当研究所の現状は技術者2名で装置開発室が発足したが完成時の目標にはまだ程遠い段階である。しかし、技官が自ら向上しようという雰囲気や習慣を確立するのには始めが大切だと考えたので、所外からも大学関係の技術者を集めて（約30名）、本年度は技術研究会を2回開催した。研究会で提出された内容は、技術研究会報告としてより多くの人の批判を得たいと考えている。現在、去る7月に行った研究会の報告を技術研究会報No2として印刷中である。

今後の研究所の充実と共に、当研究所の技術者による研究会も充実させ、技術の向上と、技術を支える技官の有機協力の関係の確立をはかるとともに、真に機能する研究支援技術の態勢を築きたいと考えている。

(1976年9月16日)

昭和51年度共同研究現況

分子研 吉 原 經太郎

分子研における共同研究については本レターズ第1号に井口教授が簡単な紹介をしておられる。その後実際に共同研究の公募が前期、後期の2回に亘って行われ、具体的な形をとりはじめたのでこれについて紹介したい。

はじめに共同研究の要領について述べる。共同研究の形態には次の4つのカテゴリーがある。これらは

- (1) 共同研究：数名の研究者により特定の課題について行われる研究で、研究期間は1年以上数年に亘るもの。提案代表者は所の内外を問わないが、提案者の中に少なくとも所内の教授又は助教授1名が参加していることが必要である。
- (2) 協力研究：所内の教授又は助教授と協力して行われる研究で、1ヶ月以上12ヶ月以内となるもの。
- (3) 施設利用：研究所の施設、設備を短期間利用しようとするもので、利用期間は原則として7日以内となるもの。
- (4) 研究会：短期間に原則として分子研内で行われる研究会。

となっている（詳しくは公募要項を参照していただきたい）。本年度は(1)を2月末日締切りで受付け、(2)、(4)を前期（2月）と後期（8月）の2回に分けて公募した。(3)は年間を通じて受付けている。3月11日および9月6日に共同研究専門委員会を開き(1)を3件、(2)を17件、(4)を13件採択した。これらの主な内容を本文の最後に表にして示した。

共同研究については、すでに実際の研究や研究打合せのための小研究会が何回が開かれている。協力研究についても少しずつ研究が進められているが、研究所の設備、装置は現在建設中のものが多いので、年度の後半に盛んになるものと考えられる。研究会ではすでに「TCNQ錯体の構造と物性」についての研究会が7月7日から3日間開かれ、大へんに活発な討論が行われたが、これについては、本号の研究会報告に詳しい。

協力研究には一般的な意味における協力研究の他に後期からは「招へい協力研究」とも云えるものを加えた。これは研究所が研究遂行の必要上、所外の専門家に依頼して研究したり、コンサルティングを受けようとするものである。いくつかの「招へい協力研究」を持つことによって多彩で有効な研究活動ができるようになると期待される。

下表を見て驚くことは、極めて広い分野の研究課題が数多く含まれていることである。全国の分

子科学または関連の分野の方々から寄せられた所に対する期待を知ることができるといえよう。ただ前にも述べたように、研究所としての対応が未だ充分でないので、期待に副えず、不便をかける面が多い。しかし本年度より管理部に共同研究掛の専門職員がおかれたことでもあり、実験棟の6割完成、他の附属施設の完成に伴って今後徐々に態勢が整ってゆくものと考えられる。ことにこれまで手狭であった共同研究のための宿泊施設の他に、旧愛知教育大女子寮を本年度中に一部改修して、新たな宿泊施設を作りつつある。これが完成すると長期滞在、家族の滞在も可能になり、外国人の受入れなども容易になるので大いに期待している。

(1976年9月15日)

昭和51年度共同研究

(1) 共同研究

課 題	提案代表者
1. 光励起による超微細相互作用の研究	千原 秀昭 (阪大理)
2. 不安定分子および分子イオンの分光学的研究	広田 栄治 (分子研)
3. 酵素ヒドロゲナーゼの作用機作とその電極反応への応用	井口 洋夫 (分子研)

(2) 協力研究

1. 蛋白質の光学的・電気的物性の研究	中原 祐典 (都城工専)
2. 緑色植物の光化学反応のピコ秒レーザーフォトリシス	池上 勇 (帝京大医)
3. 光合成の初期光化学反応の研究	森田 茂広 (東大理)
4. 真空紫外光電子スペクトル強度の研究	木村 克美 (北大応電研)
5. ピコ秒パルスレーザーを用いた光合成色素分子間励起エネルギー転移の研究	村田 紀夫 (東大理)
6. テトラベンゾペリレンの光伝導	佐野 瑞香 (電通大)
7. 有機固体の電子的性質：光電子放出及び電子散乱研究	日野 照純 (城西大理)
8. イオン-分子反応による星間分子生成の機構	山崎 秀郎 (東工大理)
9. 有機結晶及び非結晶の電子状態	丸山 有成 (お茶の水大理)
10. 有機結晶の光伝導に対する磁場効果	小谷 正博 (学習院大理)
11. 極端紫外連続光源の放射線	加藤 和明 (高エネルギー研)

12. 極端紫外連続光源の放射能	宮永 一郎 (原子力研)
13. 極端紫外連続光源装置の加速器の諸問題	木原 元央 (高エネルギー研)
14. 軌道放射物性の現状と将来	神前 熙 (東大物性研)
15. ヘリウム液化とその供給方法について	早坂 啓一 (東大物性研)
16. テトラベンゾペリレンの合成	青木 淳治 (東邦大理)
17. IMS-TEPSICOの電子エネルギー分析器の性能向上	脇谷 一義 (上智大理工)

(3) 研究会

1. 相関分子科学と基礎有機化学	桜井 英樹 (東北大理)
2. TCNQ錯体の構造と物性	田仲 二郎 (名大理)
3. 金属錯体の立体化学	山寺 秀雄 (名大理)
4. 極端紫外光源	井口 洋夫 (分子研)
5. 化学における研究動向について	井口 洋夫 (分子研)
6. ピコ秒パルスについて	吉原経太郎 (分子研)
7. 有機分子性結晶における電荷移動機構	丸山 有成 (お茶の水大理)
8. 電子励起状態における分子の動的過程	広田 栄治 (分子研)
9. 光合成の初発反応に関する研究	森田 茂広 (東大理)
10. レーザー誘起化学反応	土屋 莊次 (東大教養)
11. 高励起原子分子の生成と反応	朽津 耕三 (東大理)
12. 化学研究将来計画と分子科学	井口 洋夫 (分子研)
13. 研究機関における技術者の研究推進に対する役割	井口 洋夫 (分子研)

外国人招へい研究員 W. Siebrand 博士

分子研 広 田 栄 治・吉 原 経太郎

昭和51年度外国人招へい研究員に就任を予定している Willem Siebrand 博士は1963年オランダのアムステルダム大学で博士号を取得された。その後主な活躍の場をカナダに移され現在、オタワにあるカナダ国立研究所化学部の主任研究員である。

同博士は大へん幅の広い分子科学の理論家であるが、特に分子および分子性結晶の電子的特性の理論的研究の分野で著名である。分子性結晶の電気伝導の理論、励起子および励起エネルギー移動、ことに最近では振電相互作用、共鳴ラマン散乱、無輻射のエネルギー遷移、光化学反応の研究を行っている。

本年12月末より3月末まで分子研に滞在して、第4回岡崎コンフェレンス「共鳴および非線型ラマン散乱」において中心的な役割を演じていただくことを期待している。その他研究会「有機分子性結晶における電荷の移動機構」や、同じく研究会「電子励起状態における分子の動的過程」においても、特別講演をしていただくことを希望している。

云うまでもなく自然科学の研究は国際的視野をもって行わなければならない。そのためにはできるだけ多く機会をとらえて、国際的な共同研究や研究会が行われることが望ましい。分子研の外国人招へい研究員制度がこのように大きな目的の一端を荷っているわけである。

今回の Siebrand 博士の滞在を機会に分子研では、比較的短期間に彼を中心とした3つの研究会を開くこととした。この他講義などもしていただくことを期待している。何れ国内の各地でセミナーが開かれ、研究者との意見の交換も活潑に行われるであろう。Siebrand 博士の理論家としての広い視野、深い洞察力が我が国の分子科学の進歩に大きく寄与することを期待している。

(1976年9月20日)

昭和51年度大型研究設備

(高精度分光・超高速度パルス観測システム)

分子研 広 田 栄 治・吉 原 経太郎

先に分子科学研究所準備室において、同研究所で行う大型研究の課題を一般より公募し、「研究・設備専門委員会」(主査:田中郁三東工大教授)でとりまとめを行った。その結果標記研究設備を第一にとりあげることになり、昭和51年度に8172万円の予算が計上された。昭和51年5月24日、東工大において大型研究設備検討委員会(委員長:田中郁三、委員:坪井正道、伊藤光男、清水富士夫、井口洋夫、小谷野猪之助、吉原経太郎、広田栄治(敬称略))を開き、次のような設備選定の基本方針を決定した。

- (1) 本年度は、①時間分解スペクトル測定装置、②波数分解スペクトル観測装置を並行して設置する。
- (2) ①、②ともにレーザーを主体としたものとし、完全に完成された機器ではなく、開発を伴うものとする。開発は分子研を中心として行う。
- (3) ①はYAGレーザーを基本機器とし、2, 3, 4倍高調波発生およびパラメトリック発振を行う。ナノ秒およびピコ秒パルス発振はともに3段増幅し、増幅系はナノ秒、ピコ秒で共用する。ナノ秒パルス検出系およびこのパルスによって誘起された化学反応診断用赤外分光系を整備するが、ピコ秒パルス検出系についてはさしあたり既設装置を基本として計画し、ストリークカメラなどについてはひきつづき検討する。

②は高分解能色素レーザーを基本とし、パンピング用レーザー、色素レーザー、波長校正系などを整備する。パンピング用レーザーについては大出力のもの、異なった波長のものを導入する。赤外領域の波長可変光源を用いた分光系についてはひきつづき検討する。

①は吉原が、②は広田が機種選定その他の具体面を担当することとした。

以上の方針は昭和51年6月11日の創設協力者会議で了承された。

① 時間分解スペクトル観測装置を用いた分子研における研究計画(基礎電子化学部門および花崎一郎助教授が主として担当)としては

- (1) ピコ秒パルスによる励起分子の動的挙動の精密測定
- (2) 光化学反応の初期過程
- (3) 気相化学反応の振動励起効果

を考えている。(1)、(2)のためにくり返しピコ秒 Nd³⁺:YAGレーザー、トランジェントデジタ

装置開発室について

分子研 広 田 栄 治

分子科学の分野では新しい実験的方法、装置の開発がとくに重要である。新しい手法の発見、その展開は大抵の場合分子あるいは分子集団の分子論的な性質に基づいており、分子のもつ新しい特性がこれによって明らかにされて行く。一度このようにして分子のもつ未知の機能が解明されると、それに基づいた別の新しい方法論が提出され、従来なかった新分野が開かれる。たとえばレーザーの開発を考えてみよう。一度レーザー発振が成功すると、発振に関与する分子について様々な情報がえられる。CO₂やCOの分子定数の精度が、これらを用いたレーザーの開発によって著しく高められたのはその一例である。また基本的定数の精密化だけでなく、種々の緩和過程についても新しい情報がえられる。

これらのデータは他の型のレーザーの開発を促進し、また分光学の進歩を誘起するといった具合である。このように分子科学では新しい実験的方法の開発がとくに重要で、他の分野には見られないユニークな地位を占めている。

このような重要性を考慮し、分子研ではいち早く昭和50年度に附属研究施設として機器センターと並んで装置開発室を設置した。現在助手に高木芳弘氏が着任している。さらに技術の開発、装置の具体的な製作を重視して、わが国では初めての試みとして技術課がおかれた。幸にも名古屋大学より高橋重敏氏を課長に迎えることができ、工作室の整備が着々と進められている。技術課に所属する技官数は教官の人数を上回る計画であり、分子研が如何に装置開発を重視しているかが御理解いただけると思う。現在分子集団研究系に技官として佐藤直樹氏が、装置開発室技術員として鈴井光一氏がそれぞれ就任している。

装置開発室のうち、高真空装置の製作、その他の機械工作、ガラス工作などは高橋課長、鈴井技術員が担当しており、すでに既設部門の要求に応じて真空系部品、鏡支持台などの装置部品、ガラス器具類その他の製作を行っている。現在は愛知教育大旧図書館の一階の限られた空間で行っているため、工作機械類の設置は充分とはいえないが、すでに大小各種旋盤、コンターマシン、切断機、ガラス旋盤、同研磨機、熔接機、検索機などの購入、据付、調整を終り、作動している。本年9月には分子集団研究系での研究に必要な高真空中の電気伝導測定装置を完成した。装置開発室で新しく作成された第1号装置である。

一方エレクトロニクス関係は高木助手の下で整備が進行している。本年度はシンクロスコープ、信号およびパルス発振器、ボックスカー積分器、ロックインアンプ、増幅器、周波数カウンターな

イザー、光遅延装置、ケルセルシャッター、高調波発生装置などを購入または自作する。主として(3)の計画を達成するためくり返しQスイッチNd³⁺:YAGレーザー、3倍高調波発生装置、パラメトリック発振器などを購入または製作する。なお、ピコ秒レーザーとQスイッチナノ秒レーザーの増幅段は共用することとした。

㊤ 波数分解スペクトル観測装置を用いた分子研での研究計画(分子構造学第一部門および清水富士夫助教授が主に担当)は

- (1) 可視部における吸収および蛍光スペクトルの高分解測定
- (2) 同上スペクトルのマイクロ波照射による変化(二重共鳴)
- (3) 多光子過程の観測とDoppler-free分光を考慮している。

このためにSpectra Physics 580A、Coherent Radiation 599-21高分解能色素レーザーを各1台設置する。さしあたりローダミン6G領域を中心に整備するが、将来波長領域を拡大するため、SPのパンプ用レーザーには171-05アルゴンイオンレーザー(15W)を購入する。不安定分子の微弱な蛍光スペクトルも観測できるよう光子カウンターを用意する。

以上の具体案を検討委員会に提示し、了承をえた。現在機器の発注段階で、昭和52年1月～2月には搬入が完了する見込みである。昭和51年度中には主要機器の調整、各種部品の製作を終え、上記研究を開始できるものと期待している。

(1976年8月)

どを購入予定で、部門の要求に応じ新しい電子回路の設計、製作、調整などを担当する。この他高木助手は原子分子の電子励起状態における磁気共鳴の実験を計画中であり、また他部門との共同研究をも遂次行う予定である。

(1976年 8 月)

分子研コロキウム

分子研 坂 田 忠 良

所内のコロキウムを始めました。今まで話された題目、演者は以下の通りです。

- 第1回 5月26日 Hydrogenase の反応性と物性 (井口洋夫)
- 第2回 6月4日 レーザーによって振動励起された分子の反応性 (花崎一郎)
- 第3回 6月10日 フリーラジカルのマイクロ波分光 (斎藤修二)
- 第4回 6月17日 素反応速度の内部エネルギー依存性 (小谷野猪之助)
- 第5回 6月23日 有機光学反応の初期過程 (吉原経太郎)
- 第6回 7月6日 レーザー・シュタルク分光 (山田千樫)
- 第7回 7月15日 真空紫外光による有機固体からの光電子放出 (関一彦)

編集後記

分子研レターズ第2号をおとどけする。第1号ではとも角も編集方針を決めて、雑誌を発行すること、そしてそれまで“たまっていた”報告を書くことに重点があった。研究所の運営の機構、外国人評議員の制度、「岡崎コンフェレンス」、外国人招へい研究員の制度等々について、簡単に紹介するにとどまった。半年以上経った現在多くの方々の援助を受け、また悪戦苦闘しながらも、少しづつ新しい制度や運営を実地に行いつつある。第2号ではこれらについて多少御紹介することができたように思う。

この冊子がレターの交換を行う場であることから所外の御意見をより多く掲載することを第1号の編集後記で御約束した。多くの方々の御協力により本号はそのような目的をはたすことができたように思う。老壮青の各世代からレターをいただき、研究の理念や揺らん期の記録から現在の生々しい研究所の現場の状況まで極めて多彩な内容を盛込めた事を感謝している。

第1号を編集した本年1月には、実験棟建設の地鎮祭を終えたばかりであった。現在は実験棟の5階のコンクリート打を終わってほぼ完成時の姿を現しつつあるのがここ臨時庁舎の窓から眺められ、分子研の敷地にも大きな変化がおこっている。しかしより大きな変化は、各地から赴任して来た研究者が、まだ数は少いけれど、本来の研究やその準備を着々と進めていることである。来年は建設のピークとなるよう、研究所全体で現在努力している。多くの方々のさらに一層の御協力をお願いしたい。

1976年9月
(吉原、斎藤記)

◎ 交通機関

東京方面より

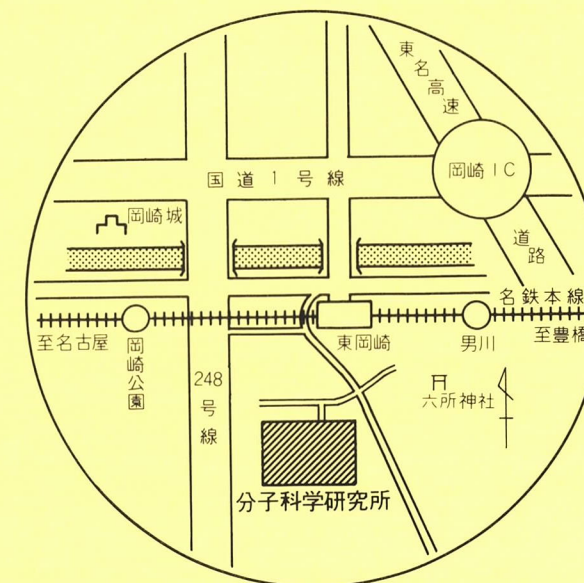
新 幹 線 豊橋駅下車

名 鉄 本 線 豊橋 — 東岡崎 (所要時間 25分)

大阪方面より

新 幹 線 名古屋駅下車

名 鉄 本 線 名古屋 — 東岡崎 (所要時間 35分)



分子科学研究所

〒444 岡崎市明大寺町西郷中38

庶務課 ☎〈0564〉 52—9771

会計課 ☎〈0564〉 52—9770

施設課 ☎〈0564〉 51—1511

技術課 ☎〈0564〉 52—9773

研究室 ☎〈0564〉 52—9774

