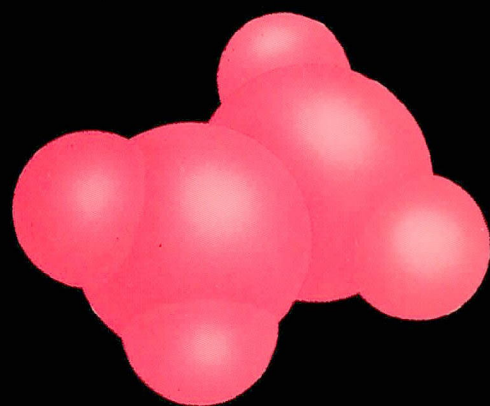




分子研レターズ

1989・9 No.21



分子科学研究所

INSTITUTE FOR
MOLECULAR SCIENCE
ISSN 0385-0560

目 次

新流動研究部門の発足

平成元年の分子科学研究所	所 長 井 口 洋 夫	1
界面分子科学研究部門の発足にあたって	分子研 佐 藤 眞 理	2
新流動研究部門に着任して	分子研 松 島 龍 夫	4

受賞者紹介（井口洋夫所長，高谷秀正助教授・現京大工教授）	6
------------------------------	---

南実験棟完成	9
--------	---

研究室紹介

物性化学研究部門（薬師グループ）	分子研 薬 師 久 弥	11
------------------	-------------	----

総合研究大学院大学第一回入学式行わる	13
--------------------	----

学長式辞，新入生紹介

分子研を去るにあたり

筑紫の国の奇人変人学部から	九工大情報工 柏 木 浩	16
分子研を去るにあたって	広大理 春 日 俊 夫	17
分子研を離れて思うこと—研究のヒントと方法の序説—	三重大工 篠 原 久 典	19

新任者紹介	22
-------	----

新装置紹介	28
-------	----

岡崎コンファレンス報告

第32回岡崎コンファレンス

Theoretical Chemistry of Excited Molecules

阪大基礎工 笛野高之，分子研 諸熊奎治	29
---------------------	----

第33回岡崎コンファレンス

Prebiotic Syntheses of Biomolecules and the Origins of Chirality

筑波大 原田 馨・下山 晃，分子研 花崎一郎・西 信之	35
-----------------------------	----

第34回岡崎コンファレンス

Chemical Kinetics in Combustion

……………京大工 神野 博, 東大工 幸田清一郎,

分子研 小谷野猪之助, 名大工 林 光一 …… 40

国際協力事業報告

日英共同研究 n+n ミーティング ……分子研 吉 原 経太郎 …… 45

研究会報告

スピン化学の新展開……………京大理 広田 襄, 阪市大理 伊藤公一 …… 48

生体機能に対する分子科学的アプローチ

……………広大理 (分子研) 今村 詮, 分子研 柏木 浩 …… 51

錯体の高分子化および知能化による複合機能の発現……………東工大 戸 嶋 直 樹 …… 55

水素・電子結合系における諸問題……………分子研 三 谷 洋 興 …… 58

固体化学と錯体化学の接点……………分子研 磯 邊 清 …… 60

課題研究報告

タンパク質中の電子移動とプロトン移動……………分子研 北川禎三, 小倉尚志 …… 63

孤立分子集合体の光励起緩和過程研究の新展開……………京工繊大繊維 平山 鋭 …… 68

分子研コロキウム …… 73

平成元年度 (前期) 共同研究採択一覧 …… 74

昭和63年度 (後期) UVSOR 施設利用・施設利用採択一覧 …… 79

国 際 交 流 …… 83

海外からの招へい研究者

海外からの訪問者

海 外 渡 航 …… 86

人 事 異 動 …… 89

編 集 後 記 …… 93

新流動研究部門の発足

平成元年の分子科学研究所

所 長 井 口 洋 夫

「創設の精神を忘れるな」と言う合言葉の中で14年目を迎えた分子科学研究所では、その間に70%以上の研究・技術者が転出入し、更に客員研究部門には累計95名の教官を迎え、分子科学に於ける人事交流の一つの拠点となり得た。勿論それは、日本全国の大学・研究機関が人事選考に当って、研究所の人材を迎え入れられた結果である事を、吾々は肝に銘じている。

新しい研究組織として流動研究部門が昭和59年度に発足し、その第一号が錯体合成研究部門である。大学・研究機関の研究部門が、本制度では期間を限って研究所に流動し、その間研究所側は、研究環境（勿論研究者個人の生活環境も含める）を整え、大学側は、その期間の教育・研究の調整の対策を立てていただいている。

この流動研究部門は既に3代目。所側としては出来るだけの対応をしているが、なお多くの解決すべき問題がある。しかし、当事者、研究所、大学が共にこの制度を定着させて成果を上げるべく努力を重ねている。現在の教授グループは広島大学、助教授グループは名古屋大学から流動し、錯体化学実験施設の中核を構成している。この制度の期するものは流動教官自身の研究推進に資すると共に、新しい研究組織としての形態を築くことにある。

平成元年、文部省及び本機構管理局の尽力によって、新たに二つの流動研究部門が発足した。界面分子科学研究部門と有機構造活性研究部門である。

研究所には、創設の精神にもとづいて絶えざる見直しが求められている。この二つの流動部門の発足もその一環である。界面分子科学研究部門は、二つの相－固相と気相、或いは固相と固相と云った一の境界にその研究対象を向けたもので、第一期は北海道大学の新生の研究センターである触媒化学研究センターからの流動である。研究所では極端紫外光実験施設 (UVSOR) もその研究推進に深く関係している。

分子科学研究所は、当初からの組織として分子科学と他分野との研究協力を行う関連領域研究系を持っている。有機化学はその重要な一分野であるが更に、有機構造活性研究部門が発足することとなった。これによって有機化学と分子科学との間に新しい研究の橋を架ける事を期している。具体的には九州大学理学部化学科からの流動によっている。

化学の学問体系の一端を受持つ分子科学研究所の役割の一つとして、他の分野と相携えて全体

系を発展して行くことがある。第一号の錯体化学分野の流動部門と同じように、これらの研究分野の飛躍的發展を求めつつ、太い分子科学の柱が築かれることを期している。

界面分子科学研究部門の発足にあたって

分子研 佐藤 眞理

今年度、北海道大学触媒研究所が全国共同利用の触媒化学研究センターに改組されました。そして、その研究センターの一つの研究部門が分子科学研究所に流動研究部門として転換され、私もその一員として2年間ほど分子研にお世話になることになりました。昨年の夏ごろからこの計画を具体化する運びとなり、所内での人選で私たちが選ばれ、新たな流動研究部門の分子集団研究系界面科学研究部門にやってきた次第です。大幅に遅れていた今年度予算案もようやく成立し、5月29日より正式に発足いたしました。分子研で私たちは極端紫外光(UVSOR)施設を使う研究をすることになっています。私はこれまでの約10年間、半導体光触媒の研究をしてきましたのでSOR光を使うことに興味を持ったのですが、実際にどのように使ったらよいものやら今だに模索しているところであります。それはとにかく、流動することによって新しい知識が得られることは確かですし、なによりも分子研というたいへん良い研究環境の中で仕事をできる機会を与えられたわけですので、この2年間を有意義なものにしたいと思っております。

さて新しい流動部門の発足にあたって私が書くことはこれ以上ないのですが、これでは与えられた紙幅をうめることはできませんので、私の研究に関する思い出話を書いて責めを凌ぐことにします。私が光触媒などという新しい分野に首をつっこむことになったのは、約10年前、テキサス大学に留学中のことでした。私の行った所は化学科のWhite教授の研究室で、ここには私の前に同僚の松島助教授、その後、分子研協力研究員だった角田君(現豊橋技科大講師)、分子研客員の豊橋技科大 上野教授などもいっていたところです。この研究室は表面科学が専門でしたから、私も何かその関係のことをするつもりだったのですが、当時、窒素を光還元してアンモニアを合成したとか、炭酸ガスを光還元してメタンを合成したとかいう報告が有名学術雑誌に発表されて関心を集めており、そちらの方をやってみないかということになりました。近くに電気化学の大御所のBard教授の研究室があり、ここで半導体光触媒の研究をしていましたから、最初はそのところから試料を少しもらってきて、炭酸ガスの光還元を半信半疑ながら始めたわけです。一時

はメタンができて喜んだのですが、 $^{13}\text{CO}_2$ を使っても $^{12}\text{CH}_4$ しかできないことから、触媒中にあった有機物が分解してメタンができたことがわかり、がっかりしたことでした。窒素の光還元もいろいろ調べましたが、可能性のかけらすらも見いだせませんでした。今から思い返してみると、かなり胡散くさい結果に魅せられて、私を含めてかなり多くの人が光触媒の研究を始めたのではないかと思います。しかし最近の常温核融合騒ぎほどでは、もちろんありませんでした。

そうこうしているうちに、偶然、白金を担持した酸化チタン粉末で水を酸素と水素に光分解ができることを見つけました。これは有名な本多-藤嶋効果によるものですが、半導体光電極ではバイアス電圧をかけなければ起こらないのに、光触媒では光だけでかなり高い量子収率で起こったので驚きました。面白いもので、同じ頃に同じようなことを思いつく人が結構いるようで、分子研の坂田助教授（現東工大総合理工学研究科教授）らのグループも酸化チタン光触媒で水分解に成功し、両グループの論文は同じ雑誌の同じ号に、しかも隣合って掲載されました。他にも少なくない人々が似たような試みをしたようですがうまくいかなかったようです。水素しかできないという報告は山ほど、というのは大袈裟としても、ざっと数えても25以上あります。これは白金を付けた半導体粉末による水の“完全”光分解にはちょっとした仕掛けが必要なためです。たいてい人は光触媒を水中に懸濁して光照射していますが、これでは普通、ごく微量の水素が発生するだけです。半導体の粒径が酸素や水素の気泡よりもはるかに小さいために、気泡が成長していく過程で混合し、白金上で再結合して水に戻ってしまうからです。わかってしまえば当然のようなことなのに、案外、気づかれずにいることです。そういうわけで、生成物が触媒上で気泡を作らないように、溶液層の厚さを気体が拡散によって容易に通り返れるほど薄くすると、はじめて“完全”光分解ができるという仕掛けになります。水酸化ナトリウムなどの潮解性の電解質を用いますと、これが水を表面に保持する役目をして、この仕掛けをわりと簡単にしてくれます。ちなみに最近では、半導体の構造を制御して、溶液中に懸濁しても水の完全光分解ができる光触媒が東工大の堂免さん達によって開発されています。

私たちより少し遅れてスイスのグループが酸化チタン微粒子を使って極めて高い量子収率で水の光分解ができたという有名学術雑誌に発表し、全世界的な注目を集めました。ところが彼らはその後、水素だけが生成する、酸素は酸化チタンと過酸化物を作るという内容の論文をたくさん出し、多くの人がそれを信じるに至っています。おかげで私の投稿した水の“完全”光分解に関する論文はレフェリーの批判にさらされることになりました。この道の権威に一人で細々とやっている研究者が立ち向かうのは容易なことではないということを思い知らされました。それはさておき、どうして私の所ではできない“過酸化物”が彼らの所ではできるのでしょうか。不思議に思っていたところ、彼らに近い筋が、彼らが使っているのと同じと思われる試料を送ってくれました。早速、これを水の光分解に使ってみると水素しかできないのです。どうやら試料中に真空ポンプ

油のようなものが含まれていて、これが犠牲還元剤の働きをして水素が効率よく発生するのです。この結果を先方に書き送りましたがナシのつぶてです。彼らがこれを認めることはおそらくないでしょう。現代のような情報過多社会では、きわめて初歩的なミスにもとづいて多くの論文が生産され、その結論がまかり通っていく可能性が多分にあるといえるでしょう。

これまで水の光分解を手始めに、光水性ガス転換反応、気相光コルベ反応、光酸化反応、酸素同位体光交換反応、光水素・酸素発生反応、酸化物半導体の光触媒活性比較、などを手がけてきましたが、ほとんど一人だけでの自転車操業で最近はいささか内容がマンネリ化してきた感がありました。太陽光による水の光分解ができる光触媒の開発もできませんでしたし、ここで区切りをつけて少し違った方面へ転進してみるのもよいかと思います。分子研では、固体表面に吸着した有機金属錯体の UVSOR による光分解とその応用、VUV 光触媒などを研究する計画です。前回の転進では偶然から結構面白い分野が開けたわけですが、今回、はたして UVSOR の柳の下にドジョウはいるでしょうか。

新流動研究部門に着任して

分子研 松 島 龍 夫

分子研では既に多くの人をご紹介いただき、人物の判別が難しい程です。ここでは皆が似たお顔になっていると感じています。外国の研究機関で仕事を始めたとき、周囲の人の顔が皆同じに見え、判別が難しかったことを思い出しました。私にとって分子研はその位に縁の遠いところでした。平成元年度に北海道大学に触媒研究所の改組による触媒化学研究センターの発足があり、その初年度に一つの流動部門が設けられました。そのメンバーの一人として分子研にお世話になることとなりました。着任してみてその研究環境には感心しました。まだ僅かな期間ですが強力な技術陣の存在は素晴らしく感じました。既に幾つかの助力を受けました。

電気化学の分野で私は化学の研究を始めました。電極でのガス発生反応の素過程を同位体を使って解析することに大学院時代を含めてほぼ8年間従事し、得られた結果は従来の説を全く否定するものでした。しかし一人の理解者も得られず今でも残念な思いがあります。研究は基本的には個人の活動であり、その喜びも悲しみもその胸に秘められると感じ、協同研究はその後にあると思うようになりました。この系は固相、液相、気相の共存系であり、しかも表面の規定が困難

な時代でした。現在からみても難しい反応系であり、当時は巨頭のみが結論できるまさに「巨人の時代」でありました。

表面反応の素過程の研究が50年代の末から始まった表面科学において展開されるであろうとは60年代の半ばには衆知のことでした。私は70年代半ばにこの分野で仕事を始めましたので遅い出発でした。貴金属触媒表面上の一酸化炭素の酸化反応を中心として、表面反応の素過程構成、それらの速度の解析をしました。これらは同じ金属の清浄表面でも表面原子の配列の違いで異なります。したがって、素性の分かった単結晶表面上の反応を扱うようになりました。10年ほど前のことです。

表面が規則的で欠陥のない場合でも、その上に吸着した化学種の分布は一樣ではないことが多々あります。その分布は二次元素系の状態図で表現されます。単結晶表面を使っても吸着種の反応性は同一ではなく、反応場も一種ではなく、それらは一樣にも分布しない。この不均一な分布は素過程の速度を吸着量、温度の関数で論ずる chemical kinetics の限界を示しています。表面反応研究の基本テーマの一つは「表面上の反応場とそこでの反応の動力学」です。これらは新しい機能を持つ表面の設計に必要な情報なのです。ここには表面での反応をもっとミクロに覗ける新しい角度からの手法が必要です。数多く開発されています表面分析法の殆どは反応していない表面上の原子、分子からの情報に基づいています。反応場の情報としては間接的です。反応そのものから見る直接的手法がみいだされるべきです。気相反応では state to state chemistry が一般化し、分子科学者にとっては chemical kinetics から molecular dynamics への変遷は昔話となりました。しかし表面反応では始まったばかりなのです。

気相反応で状態選択が容易なのは反応が孤立系で起こるからです。表面は巨大な熱浴であり、反応の始原系あるいは生成系は必ずこれに接しています。このため、state を選択して吸着速度をみる、あるいは脱離分子の state を分析するという、state to surface と surface to state とに分けて調べるのが表面での熱反応では定着しつつあります。私が最近手掛けています仕事は後者に属します。脱離した表面反応生成分子の並進速度が表面温度の Maxwell 分布より大きく、また脱離角に鋭く依存する場合が見いだされています。生成される際表面から反発されて脱離するのです。この反発 potential の形状は反応場の構造を示すはずで、ここから直接に反応場を決めていこうと計画しています。Pd (110) 上での一酸化炭素の酸化で生成脱離する二酸化炭素のフラックスは著しい結晶方位角依存を示すことが見いだされており、その様子は酸素原子（反応場の中心である）の周りの対称性と一致します。確かにこの手法に可能性はあるのです。上記の計画の成否は、速度分布を方位角、脱離角の関数で測定できるかどうかにあります。更に進んで脱離分子の内部エネルギー分布を脱離方向を規定して測定する手法を分子研に滞在中に学びたいと思います。分子研はもとより広く分子科学者のご教示をお願いします。（界面分子科学研究部門）

受賞者紹介

井口洋夫所長に藤原賞



分子科学研究所の井口洋夫所長が平成元年度（第30回）藤原賞を受賞された。受賞の対象は、井口先生がその出発点から終始一貫して進めてこられた「有機半導体，有機導体，有機超伝導体の研究」である。因みに、藤原賞とは、製紙王といわれた故・藤原銀次郎翁の設立した藤原科学財団が、優れた業績をあげた自然科学者に毎年贈っている学術賞で、本年が丁度30回目に当たる。この由緒ある賞を受けられた井口先生に、現在なお日々御指導を頂いている弟子の一人として心からお祝いを申し上げたい。

井口先生は、昭和23年に東京大学理学部化学科を卒業されひきつづき同大学院に進まれ、昭和25年に同大学理学部助手、昭和34年同助教授になられ、昭和35年には物性研究所に転出された。昭和42年には同教授に就任されたが、昭和40年代半ばより分子科学研究所の設立に奔走され、昭和50年分子研創設と同時に同研究所教授に就任され、昭和62年に停年退任されたがひきつづき同研究所長として今日に至っておられる。

受賞の対象となった研究内容は次の4つに大別されている。

- (1) 有機半導体の発見と概念の確立。
- (2) 新しい有機半導体の構築。
- (3) 導電性電荷移動錯体の創始と有機超伝導体の開拓。
- (4) 有機固体のイオン化電圧の集大成。

有機半導体発見（昭和25年）については、井口先生の大学院時代からの炭素，黒鉛の導電性の研究がその発端であったことはよく知られている。多環芳香族分子は黒鉛の切れはしであるという見方に立ち、そのような分子からなる固体中では分子間の π 電子雲の重なりを介して電気が流れるのだということを多数の実験を通して確認され、昭和29年に“有機半導体”の概念を提案された。さらに、その後昭和40年代までの膨大な物性研究を通してその概念を確立された。

又、新しい型の有機半導体の構築としては、チトクロム C_3 の特異な導電性の発見、分子ファスナー効果と命名された新しい構造を持つ分子の合成、及び擬共有結合性分子間結合の導入が特記すべきものである。



一方、二成分系からなる電荷移動錯体の非常に高い導電性の発見（昭和29年）は、今日の有機導体、有機超伝導体の研究の出発点であったことはあまりにも有名である。

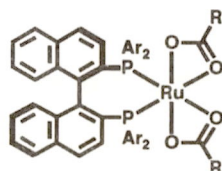
さらに、物性研時代に開始された有機固体のイオン化電圧の光電子分光法による測定は、その後の30年間に及ぶ膨大なデータの集大成を導き、それは物質設計の基本データとしても極めて有用なものとなっている。

井口先生は、現在でも自分は現役の実験研究者であると常々言っておられ、事実分子研所長としての超激務下にも拘らず“所長研究グループ”を組織され、先生の研究の特徴である全く独創的な発想に基づく新しい作業仮説の設定展開と、それを綿密な実験によって実証していく作業を強力に推進しておられる。これは、先生御自身の研究の新たな展開であると同時に、我々にとっては先生の無言の叱咤激励であると受けとめている。先生の益々の御発展と御健康をお祈りしてお祝いの言葉としたい。

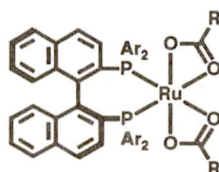
（丸山有成記）

高谷秀正助教授，現京大工教授に Fluka 賞

本年度の Fluka 賞 (Reagent of the Year 1989 と称される) がもと分子科学研究所化学試料室高谷秀正助教授 (現京都大学工学部教授) と名古屋大学理学部野依良治教授の両氏に贈られた。Fluka 賞はスイスの世界的試薬メーカー Fluka 社がスポンサーとなり，1987年に創設された比較的新しい賞で，有機化学，生物化学，および分析化学の分野で重要な新しい試薬，反応剤，あるいは触媒を開発した研究者に毎年 1 件授与されるものである。同氏らが初めて合成した BINAP-Ru (II) 錯体 **1** が不斉水素化反応の触媒として先例のない優れた



$\Delta\text{-(R)-1}$



$\Delta\text{-(S)-1}$

機能をもつことを明らかにした業績に対し授与されたものである。本触媒は，これまで高いエナンチオ面選択的水素化が極めて困難とされていた各種のプロキラルなオレフィンやケトン類の不斉水素化の触媒として高い機能を発揮する。その結果，生理活性物質や液晶材料として有用な光学活性有機化合物やそれらの合成中間体を一段階で効率よく合成する新しい，実用的手法が確立されることになった。すなわち，本法は各種の抗性物質，鎮静剤，抗炎症剤などの医薬品をはじめ，ビタミン類，あるいは次世代の農薬として注目される物質やそれらの合成中間体の高効率合成に応用できる。たとえば，本法によって得られる香気成分シトロネロールは天然由来のものよりはるかに高い光学純度をもつ。これまで，ある種の光学活性有機化合物は生物あるいは生物化学的手法によってのみ製造されていたが，純化学的不斉増殖法によっても前者の手法と同等あるいはそれ以上の効率で合成できることを実証した意義は極めて大きいと言える。

創設 3 年目にして本賞が早々に日本の有機化学者のグループに与えられたことは，本分野の日本における研究が世界的レベルにあることを示すものとして喜ばしいことでもある。

(真島和志記)

南実験棟完成

本実験棟は、錯体化学実験施設の3部門（昭和59，61年度）と外国人客員部門の2部門（昭和58年度）の増設に伴う建物であり，竣工は平成元年2月28日であった。実際の部屋割に当たっては，南実験棟及び従来の実験棟・研究棟を一体として考え，分子研にとって最も機能的な態勢がとれるように配慮した。

1. 建 物

この建物は，地上4階，地下1階のRC構造で，1フロア当たりの面積は768 m^2 である。外壁は実験棟及び研究棟と同種の磁器質タイル張り（レンガ色）である。この建物は分子科学研究所の南斜面に建築したため，1フロア分低くなっている。つまり，実験棟と研究棟の1階が南実験棟の2階に相当する。実験室及び研究室等の間仕切りは，極力，構造壁とせず，必要によって取り外せるようにし，実験室及び研究室の大きさが変えられるような構造がとってある。



南実験棟東側外観

2. 実験室

実験室は地階、1階、2階に配置した。1階と2階の実験室にはドラフト・チェンバー、化学用大型実験台を適時に配置し、有機合成や無機合成の実験ができる。

地階実験室には、X線回折装置、蛍光分光光度計、質量分析装置等が設置され、主として試料の構造分析、化学分析等ができる。

3. 研究室

研究室、ゼミナール室、共同利用者室、図書室、電算端末室等は3階及び4階に集中している。分子科学研究所には、実験室は実験棟に、研究室は研究棟に集中させるという考え方が、創設当初よりあった。この考えをこの建物にも部分的に取り入れている。特に、研究室の集中設置というのは、孤立しがちな部門間の壁を破り、研究者の交流を密にするため採用された方式である。無論、建築上のコストの軽減化も、これによって計られた。

おわりに

この建物の建築に当たった管理局をはじめ関係各位の努力に深く感謝する。また、当初から分子研の意向を集約しながら、部屋割に当たってきた建物委員会の努力にも感謝したい。

(木村克美, 内田 章記)

研究室紹介

物性化学研究部門（薬師グループ）

分子研 薬 師 久 弥

分子集団研究系物性化学研究部門の教授として、1988年7月より筆者が分子研に赴任してから約一年が経過しようとしています。なにしろ、同部門の前任者は分子研創設の際の柱であり、有機固体物性という研究分野の生みの親である井口先生ですので就任決定の知らせを受けたときは喜びよりも「えらいことになった」という気持ちの方が先に立ち身の引き締まる思いでした。研究テーマとしては迷わず「導電性有機固体物質の合成と物性研究」を發展させて行く事に決定しました。この分野はここ10年足らずの間に急速な進歩があり、最近では金属的な挙動を示す物質を作り出すための処方箋がある程度書けるようになっていきます。しかし現在認められている常識を打ち破り更に物質の範囲を拡大する事が可能であろうと思っています。さらに超伝導発現のための処方箋にいたっては五里霧中といった状況です。超伝導発現のために必要な大ざっぱな指導原理が書ける所まで持って行ければといった夢を持っているわけですが、見果てぬ夢に終わるかも知れません。しかし導電性フタロシアニン塩その他物質の研究を通して、手がかり程度の物は掴みたいと思っています。

現在研究室のメンバーは私を含めて4人ですが、研究室に入ってきた順に紹介しますと、私が1988年7月に着任し、同年9月に東京大学大学院生の山門英雄君を研究協力者という形で迎え、同年10月に鶴川彰人君を助手として、また翌年4月に井田隆君を技官として迎えて現在に至っています。なお山門君は1989年4月より総合研究大学院大学第一回大学院生として分子研に所属しています。

物性研究を行う手段としては様々な方法がありますが、周波数ゼロから始まってラジオ波、マイクロ波、遠赤外、赤外、可視、紫外にわたる広い範囲で電気伝導度（あるいは誘電関数）を測定するための実験設備を整備したいと思っています。これらの波長領域ではそれぞれ実験技術が異なっていますので、一つの試料（小さな単結晶）についてこれだけ広い範囲で分光研究がやれる研究室はそう多くありません。分子研なら可能でないと期待しつつ、長期的な整備計画を立てています。この中で直流電気伝導度は新物質の発見に是非必要であろうと思います。赤外より短波長領域の分光法は分子間相互作用の異方性やその絶対値を探る方法としては強力な方法であり、また分子の電子構造と分子間力との関係を探る上でなくてはならない方法です。このような

情報は分子設計の指針を得るための有力な手法になると思っています。また高周波電気伝導度測定法は電極不要な電気抵抗測定技術として特色を発揮できると共に、とくに周波数依存性は電気伝導の機構を解明する上で力を発揮するだろうと思っています。

昨年より設計を始めたマイクロ波領域での電気伝導度の温度依存性を測定するための装置が鶴川、山門両君の努力で現在動き出しつつある段階にあります。第一号機ですので感度の向上等まだ改良の余地は残っているのですが、まもなく自動測定が可能な状態に達する事になるでしょう。現状では9.4GHzでしか測定できませんが、周波数依存性の測定を可能にする方向へ持って行きたいと考えています。ともあれ現在はこの装置がわれわれのグループの唯一の専用実験装置です。この種の実験装置は国内にはありませんので、分子研の特色ある装置の一つになればと期待しています。現在この装置を使って導電性フタロシアニン塩、DCNQI 塩、BEDT-TTF 塩について測定を行い、解析法の確立やこの実験法のノウハウを蓄積している段階です。この方法を用いる事によって、フタロシアニン塩の電気抵抗測定で我々をさんざん悩ませた抵抗ジャンプという現象から解放されました。抵抗ジャンプは有機導電体の電気抵抗測定の実験でしばしば経験する現象で、その原因は結晶内に発生するミクロな亀裂のせいではないかといわれており、低温での正確な電子状態を探る上での阻害要因となっていました。

私達は今年(1989)3月に入って、新築された南実験棟の2階に移動しました。新しく明るい実験室をいただき、感謝しております。またこれを機会に南実験棟1階にドラフト付きの化学実験室を設けることができました。この部屋から新しい物質が生まれてくるよう努力したいと思っています。2階の実験室には直流及び高周波電気伝導度測定装置を設置しました。となりの部屋では結晶成長を行っています。温度制御された5台のオイルバスの中でアルゴンガス雰囲気下10本の結晶成長用電解セルが動いています。

井田君は4月から私達のグループに参加しました。種々の導電性フタロシアニン単結晶とくにメタルフリーフタロシアニンのラジカル塩の単結晶の育成に取り組んでいます。私達は金属フタロシアニン塩の電子構造が高圧下(10Kbar)で大きく電子構造を変えることを発見しましたが、メタルフリーフタロシアニンラジカル塩の実験は高圧下での電子構造の変化に対する我々の仮説を立証するための実験の一つであり、なんとか成功させたいと思っています。

最後に研究室を立ち上げるに当たり、井口所長を始めとして、分子研内外の方々にひとかたならぬ御支援をいただきました。この場をかりて御礼申し上げます。

総合研究大学院大学第一回入学式行わる

昨年10月に開学した総合研究大学院大学の入学式が、平成元年4月24日、学士会館本館にて举行された。分子科学の分野では、数物科学研究科構造分子科学専攻及び機能分子科学専攻の学生11名が入学した。ここに、長倉学長の式辞を紹介する。



学 長 式 辞

総合研究大学院大学長 長 倉 三 郎

本日第1回入学者46名を迎え、来賓各位の御臨席のもとに入学式を举行致しますことは、総合研究大学院大学にとりましてこの上ない喜びであります。入学者各位に対し心から歓迎の意を表します。

総合研究大学院大学は、御承知のように、国立大学共同利用機関の7研究所を母体として、昨

年10月に創設されました。本学の創設は関連する国立大学共同利用機関の長年の悲願でありましたが、共同利用機関関係者の熱意の結集と文部省はじめ関係方面の御理解御協力によって実現したものであります。このことを思い起し、共同利用機関の先輩関係者と関係方面の御努力に対し、この機会に敬意と感謝の意を表したいと存じます。

本学の第一の目的は、母体となる国立大学共同利用機関と緊密な連絡協力のもとに、その優れた研究環境を大学院教育に生かし、創造性豊かな高度の研究者の養成と先導的学問分野の開拓を積極的に進めることにあります。同時にまた、国立大学共同利用機関の外に開かれた運営上の特色を教育の場に生かし、専攻間、研究科間及び他大学との協力を密にして、幅広い視野と総合性、豊かな学識と国際性を身につけた研究者を養成することを目的と致しております。

本学はまたわが国最初の独立大学院として教育研究体制の面でも管理運営の面でも新しい工夫を積極的に取り入れ、わが国の高等教育に新風を吹き込むと共にその多様化に貢献することが国の内外から期待されています。

こうした目的を達成し、国の内外の関係者の期待に応えるために、総合研究大学院大学は独自の伝統の確立に向って今後長い歩みを続けることとなりますが、その基礎となる最初の歩みが特に重要と存じます。この意味で第1回入学者諸君に期待する所は極めて大きいと言わなければなりません。入学者諸君がこうした点を認識し、本学の重要な構成員であるとの自覚のもとに、本学の基盤の確立と発展のために積極的な役割を果たしてくれることを強く希望致します。

入学者諸君が、本学に在学中、それぞれの専攻の優れた研究環境を十分に生かし深く専門知識を学ぶと共に自ら思いをめぐらし、それぞれの研究において優れた成果を挙げることは言うまでもありませんが、特に困難な課題や既存の知識常識と矛盾する課題を積極的に掘り起し、熱意と勇気、英知と鋭い直感力をもって挑戦することを期待致します。同時に指導教官その他多くの教官との対話や討論を通してまた他大学の学生を含む学生間の相互啓発を通して広い学識と優れた構想力、柔軟な発想と思考力を養い、研究者としての人間形成にも努めることが重要と存じます。

以上申しあげましたように、本学が第1回入学者諸君に期待する所は極めて大きいわけですが、それは単に本学にとどまらず、わが国の学術並びに基盤技術の発展の面からも大きな期待がかけられています。将来そうした面で中心的役割を果たすために必要な知識と力と意欲を入学者各位が在学中に身につけることを希望致しまして式辞と致します。

1989年4月24日

新 入 生 紹 介

専 攻	氏 名	所 属	研 究 テ ー マ
構造分子科学	すぎ 杉 浦 健 一	相関分子科学第一	水素-電子連動型分子性結晶の合成, 及び物性研究
	やま 山 門 英 雄	物 性 化 学	導電性錯体の構造と物性及びマイクロ波による電気伝導度の測定
機能分子科学	おか 岡 庭 香	装 置 開 発 室	水素-電子結合系における物性に関する研究
	お 尾 関 博 之	基 礎 光 化 学	レーザー及び放射光による分子間錯体の光電子分光研究
	Gautier-Luneau, Isabelle	分子集団動力学	分子内水素結合型電荷移動錯体の構造と物性
	さかん 目 喜 直	分 子 動 力 学	ヘムタンパク質の時間分解共鳴ラマン分光
	たか 高 橋 聡	分 子 動 力 学	チトクロム酸化酵素の動的構造と機能, 共鳴ラマン分光法による研究
	てる 照 井 通 文	分子集団動力学	新物質系としての酸化物超伝導体薄膜の構築
	はやし 林 久 史	分 子 動 力 学	X線小角散乱及びX線ラマン散乱による不規則系の研究
	ほん 本 田 数 博	電子状態動力学	ファンデル・ワールス分子の化学反応
	みず 水 谷 泰 久	分 子 動 力 学	共鳴ラマン分光法による光合成反応中心及びモデル化合物の構造化学的研究



杉浦 健一



山門 英雄



岡庭 香



尾関 博之



Gautier-Luneau, I.



目 喜直



高橋 聡



照井 通文



林 久史



本田 数博



水谷 泰久

分子研を去るにあたり

筑紫の国の奇人変人学部から

九工大情報工 柏 木 浩

筑紫なるにはふ^こ見ゆえに東海の三河^{わどめ}娘子の結ひし紐解く

これは分子研電子計算機センターから九工大情報工学部への転勤にあたって書いた挨拶状に引用した万葉集東歌の替歌です。元歌は東海の三河娘子というところが陸奥の香取娘子となっていました。歌の意味は、筑紫の輝くばかりに美しい娘のために、東海の三河の娘がまた逢うまでは解かないようにと結んでくれた紐を解いてしまった、ということです。

ここでは兄や娘子を自然・風土に置きかえてみてください。筑紫の国は平地が千米前後の山で区切られていて、それぞれの部分が人の住みやすい緑豊かな自然環境を造っています。情報工学部は戸畑の工学部（明治専門学校）とは離れて、筑豊盆地の中央部西寄の飯塚市の郊外に建設中です。私の部屋は岡の上の8階建の研究棟の最上階にあって、筑豊盆地を囲む山々の南半分を見渡すことができます。今もこのたよりを書きながら、時々山々を眺めています。

西の龍王山の向うは博多。先日この山の麓で神功皇后が手を洗ったという滝にめぐり合いました。南西の三郡山を越えれば太宰府、南東の修験の山、彦山の向うには宇佐八幡や国東半島という神仏混合の宗教地帯があります。目の下の新飯塚の駅の近くには弥生時代の古墳群があります。その少し東の香春には仲哀天皇や神功皇后の宮殿があったということです。古代史の中に生きているような錯覚を覚えます。

情報工学部の敷地は分子研と同じく海拔50米程の岡の上にあります。しかし、機構のように狭い岡の上に散在しているのではなく、機構の全面積の2倍程の敷地が一枚あるだけです。そのほぼ中央に建物が集められています。キャンパスの完成度は半分以下、職員、学生の数もまだ予定の半分以下です。

ここには、それぞれ10の小講座からなる5つの教室があります。知能情報工学、電子情報工学、制御システム工学、機械システム工学、生物化学システム工学です。はじめの4つはなんとなく解るのですが、私の属している生物化学システム工学の意味するところがよくわからない。この教室は今年4月に発足したばかり、スタッフもまだ7人しかいないので内容もわからない。昨日、朝日新聞にこの学部を紹介するための座談会があって、そこで生物化学システム工学とは何か説

明しなければならない立場になりました。まず、システム工学とは何か。理化学辞典によると、システムは所望の目的を達成するためにいくつかの要素を組み合わせて構築されたものであり、システム工学はそのようなシステムを設計、運用するための学問分野である、とのことです。システム工学のキーワードはデザインとコントロールらしい。そうすると生物化学システム工学というのは自然が何十億年かけて創りあげてきた生物と分子のデザインとコントロールを研究し、人間にとって何らかの意味のあるものを創り出すための学問分野ということになります。具体的に言いかえれば、脳や遺伝子や蛋白質の構造や機能を調べ、そこから学んだ知識で、バイオコンピュータとか分子素子などを開発し、遺伝子組み換えの応用を行うための分野ということになるでしょう。この教室だけで近未来の広大な領域を対象とすることになります。

先の座談会は各教室から1名づつ、それに学部長と朝日新聞からの司会者の計7名の集りでしたが、情報化時代を前にして未来志向型の発言が目立ちました。重厚・長大・権威的でなく柔軟・軽妙・自由に新しいものを創り出していこうというわけです。情報工学部は奇人変人の集合体と見られているという話が出ました。どうもそのような評価を歓迎している雰囲気です。この席にも奇人変人と言われている人が何人かいるのですが、発言は極めてまともで、まだほんとうの奇人変人かどうか同定ができていません。学生の受け入れについても、偏差値規準でなく奇人変人度で集めようということに意見の一致をみました。この学部がはたして奇人変人学部になるかどうか大変楽しみです。奇人変人故にイタリアルネッサンスのような大発展をとげるか、あるいは空中分解してしまうか興味はつきないところです。

分子研を去るにあたって

広大理 春日 俊 夫

分子科学研究所在勤中は、公私にわたってお世話になり有難うございました。誌面をお借りしてお礼を申し上げます。

広島大学では、HiSORと呼ばれている1.5GeVの放射光用電子ストレージリング施設（一部電子線・γ線利用用）の加速器システムを担当することになりました。この計画は、数年前から提案されており、現在のデザインでも充分世界に通用するマシンが完成すると思われます。私に残されていることは、細部の設計や挿入光源等の検討などです。しかしながら、幸か不幸か種々の

理由より時間はたっぷりありそうです。加速器の担当者としてしなければならないことは現設計を再検討すると共に新たな可能性を追求することだと思っています。建設終了時に最新鋭の放射光源として利用開始されねばなりません。加速器は決して目的ではありません。素粒子実験用であれ、放射光利用のものであれ、利用に最適なマシンを建設するのが加速器担当者の務めと思っています。

分子研を去るにあたって、思うことや反省を述べてみたいと思います。大学院博士課程を中退し、高エネルギー物理学研究所で 8GeV（後に 12GeV に増強）の陽子シンクロトロン建設に携わったのが私の研究歴の始めです。そこでは、約 9 年間電磁石系、加速用高周波系を担当し、主にビーム不安定現象に興味を持ちビーム運動学の研究をして参りました。その間約 1 年ほどジュネーヴ郊外にあるヨーロッパ共同原子核研究所 (CERN) のスーパー陽子シンクロトロン部門及びシカゴ郊外のフェルミ国立加速器研究所 (FNAL) の主リング部で加速器の勉強をしてまいりました。1981年に分子研に移り、UVSOR 施設で 750MeV の電子ストレージリングの建設に参加し、施設の完成後は主にビーム運動学の手法を用いてリングを周回している電子ビームのクオリティ改善のための研究に従事してまいりました。

今から思いますと 8GeV の陽子シンクロトロン建設時は、日本の高エネルギー加速器科学は世界のトップレベルにあったとはいえず、試行錯誤の中で建設を進めたわけです。このことは CERN や FNAL に滞在中強く感じました。特にビーム運動やビーム診断学には深いギャップがあったと思います。その後、フォトンファクトリー、UVSOR、トリスタン等の加速器の建設を通じて日本の加速器も世界の最先端にきています。今後の課題はオリジナリティーとユニークさでしょう。

UVSOR の加速器も諸外国の同種の加速器と比較しても、技術的には決して見劣りしないと思います。しかしながら、これがユニークな加速器かと問われれば、首をかしげざるを得ません。これが私が反省している最大の点です。研究所や大学は営利団体と異なり、他人がやらないことをあえて試みるのでなければ存在意義はありません。言い訳をするならば、予定の性能を予定の期日までに成就しなければならないという制約のもとに建設にはげんだ結果、ついつい完成した技術を利用してきたわけです。昨年、スウェーデン国ルント大学のマックス研究所を訪問したときもこのことを痛感しました。マックス研究所の 550MeV のストレージリングは、UVSOR のマシンと比較して決して美しく出来上がっているようには見えませんし、高額な予算を投入しているとも思われません。しかしながら、加速器の研究者や大学院生たちは野心的な試みを行っているように見受けられました。私からみれば野心的すぎると思われるものもありましたが・・・ここに日本の加速器研究者のジレンマがあります。最初に述べましたように、加速器は目的でなく手段です。また建設の失敗はおろか、大幅な遅延もゆるされません。さらに研究者の数も制限さ

れております。勢い、確立したアイデアや技術を利用した加速器を設計・建設しがちとなります。残念ながら、私が UVSOR の加速器の担当をしていた間は、微力ゆえ上に述べた欠点を是正することが出来ませんでした。次に加速器の責任者となられるかたには、ぜひユニークな研究を行っていただきたいと思います。また、周りの研究者の方々がそれをサポートしてくださるものと信じています。

最後に皆様の御研究成果の多大なこと、さらには御健康と御多幸をお祈りしながら筆を置きたいと思います。

分子研を離れて思うこと ——研究のヒントと方法の序説——

三重大工 篠 原 久 典

大学院を中退して分子研の助手になったとき、分子研は創設 5 年目に入っていた。創設期を初めの 5 年と考えると、創設期の最後に分子研で研究を始めたことになる。当時の分子研の助手は、既に優れた仕事をした人達が多く、自分も一旗揚げたんだ、とかなり力んでいた。大学院生（受託）は全体でも 1～2 名で、しかも 20 才代の所員は非常に少なく、大学院中退の 25 才は最も若い部類であった。但し、装置開発室には、若く元気のいい技官が多く、研究はもとより、スポーツその他でも大変楽しい時を過させてもらった。

分子研では装置作りから始めたので、毎日毎日、装置開発室や工場に入り浸った。実験科学者としての研究のスタートは、多くの場合、装置作りである。この意味に於いて、大学、研究所等の工作室の存在意義は計り知れない程大きい。分子研に於いては装置開発室の興亡は、即ち、分子研全体の興亡でもある。実験で得られるデータの質は、製作した装置の質に大きく依存する。中途半端な装置では、それなりのデータしか得られない。第一級のデータなど望むべきもない。だから、身近に優れた工作スタッフ、工作室があること程、実験家にとって心強いものはない。

分子研を去って一年近くになるが、現在、特に欲求不満になるのは、正に、この点に於いてである。自分で旋盤を回して出来る工作には限度がある。だからといって外注に頼ると金がかかる。装置開発室を初めとする幾つかの附属施設の存在は、分子研で研究を進める上で、非常に、大き

い。

大学に久振りに戻って、分子研を外から見ると、分子研の特異性が良く解る。附属施設の存在、予算や設備については勿論のこと、内外の研究者の招聘の多さ、頻繁に開かれるセミナー、研究会、どれ1つをとっても特異的、例外的である。分子研にいた時は、多くの不平不満をもっていたが、今は、むしろ、正直なところ羨ましいことが多い。然し、今はそんな事を言っている場合ではなく、重要なのは、地方大学で如何に研究を進めれば良いか、と言うことである。これに対する答えは、簡単である。発想、又は着想で勝負することである。然し、これを実践するのは、大変、難しい。着想豊かな研究をするには、どうすれば良いか。如何に研究を進めれば良いのか？

私の十年來の愛読書に、哲学者梅原猛氏の日本古代学を中心とする一連の著作がある。「神々の流竄^{るどん}」「隠された十字架」「水底の歌」を初め、その多くの研究は、今迄の日本古代に関する見解を根本的にくつがえす類稀^{たぐいま}れなものである。氏の研究の進め方は、まさに天才的で、余人の及ぶところではないが、その学問の方法には、科学の研究を進める上でヒントになることが多い。それは着想豊かな研究に結びつく様に思われる。

氏は研究の出発点を、つねにデカルト的方法的懷疑におく。例えその説がどんなに確かそうに見えるにせよ、或いはそれがどんな権威ある学者によって説かれているにせよ、少しでも疑わしいものは信じない。すべてを徹底的に疑え、というのが、デカルトの態度である。氏は自身の研究を進める上で、このデカルト的方法的懷疑精神を貫く。その結果、大きな認識（研究のヒント）を得る。

この認識をスタートとして一つの研究を始めるが、この場合、その研究を完結させるには次の能力が必要であると言う。1. 強く、高い情熱。まず、強い情熱がなくてはならない。強い情熱なくして何事も出来ない。ただ、その情熱は、利己的な願望からのみ発しているものではない。2. 計画を遂行する意志。しかし、情熱だけで事は出来ない。一つの事を成し遂げるには、計画、それも、できるだけ精密な計画が必要である。3. 物を正確に見る現実的理性。情熱と計画をもった意志、それが、一つの研究を進める上での前提であるが、それだけでは事は成らない。現実的理性が必要である。これは、絶えず、物を正確に見る力である。物を正確に見るには、冷たい心が必要である。いつも、心に冷たい眼をもち、対象をけっして見間違わない。まず、情熱をもってまっしぐらに進む自己が必要であり、そして、それと共にその自己に対して、いつも疑問を投げかける第二の自己が、絶えず彼の中にいなければならない。4. 無私から生ずるカン。最後の必要な能力は、適切な判断である。最初につくられたプラン通りに研究が進むはずはない。思いがけない展開になる。その時、どうするか。状況の変化に応じつつ、最初の計画を、形を変えてでも実現してゆく。このとっさの事態に面した現実処理の能力が最も重要である。これは一種のカンのようなものである。そしてこのカン、真にその研究に無私に打ち込んだ、張りつめ

た緊張からでないと生まれない。

分子研を去って、近頃、頭を離れないのは、着想豊かな仕事をするための学問の方法、研究の進め方は如何なものか、と言うことである。皮肉なことに、予算その他に恵まれていた分子研時代にはあまり考えなかったことである。デカルト－梅原流の学問の方法を基に、無私のカンを養い、発想豊かな研究のための、私だけのオリジナルな研究の方法を、作り出したいと思う。

新任者紹介



大 橋 和 彦

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 助手

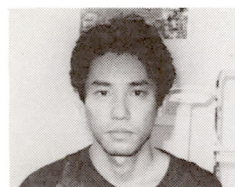
大阪大学大学院理学研究科修士課程修了。博士課程を中退して、平成元年3月より現職。専門は反応物理化学で、現在の研究テーマは分子クラスターの反応と分光です。大阪生まれ大阪育ちの乙女座AB型。どうぞよろしく。



黒 崎 博 雅

技術課錯体化学実験技術係 技官

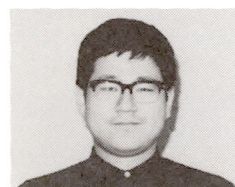
広島大学大学院医学系研究科博士課程中退後、平成元年3月より現職。研究テーマ：プレオマイシン活性中心モデル配位子の合成とその金属錯体の性質。専攻：有機合成化学。趣味は、レコード鑑賞。



岩 野 薫

理論研究系 非常勤の講師

東京大学理学系研究科博士課程修了（物理）。平成元年4月より現職。専門は、固体物理、多体問題。分野を問わず、複雑で、かつ、面白い現象に興味があります。分子研では、化学の中にどれだけ面白いものがあるのかを、教えてもらうつもり。研究以外でも、珍しい。変わった人、事、物が好きです。



田 中 彰 治

化学試料室 助手

昭和62年東北大学理学研究科博士課程修了。学振特別研究員を経て、本年4月より現職。専門は有機化学（合成と物性）でしたが、今後は未定ということにしておきます。どの観点から見ても“かゆい所に手の届いた”仕事ができるように、新しい技と思考法を身につけたいと考えています。宜しく御願います。



鈴 木 真 理

化学試料室 事務補佐員

大学卒業後、こちらに勤務するようになり、早二ヶ月が過ぎました。近くに住んでいながら、分子研について知らない事ばかりでしたが、今では、少しずつ慣れ、楽しく過ごしております。様々な事に興味を持ち、がんばっていきたいと思います。庭の木々がとてもきれいで、管理局に行くのが楽しみです。



永 谷 康 乃

極端紫外光実験施設 事務補佐員

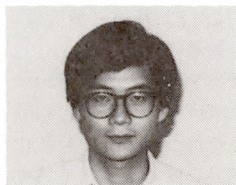
短大を卒業後、保育園に勤めていました。まだまだ不慣れで戸惑いの毎日です。SORの人達は、プリンターの調子が悪いとドライバーを持ち寄り修理して下さり、忙しい中励ましの声をかけてくださるなど優しい方ばかりで気持ちよく仕事をさせて頂いています。皆さんの親切に答えるようお手伝いしたいと思います。



森 義 仁

技術課電子構造研究系技術係 技官

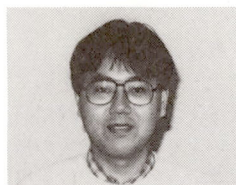
昭和63年北海道大学薬学研究科博士課程修了。富山医科薬科大学技官を経て、本年4月より現職。化学系、生物系における散逸構造に興味があり、現在のテーマは光化学反応に関連する分子集団の自己秩序形成の研究。夢は露と落ち露と消えるがごとく形成される秩序の本質に迫ること。趣味はコーヒー、タバコ、ジャズと人間。



井 田 隆

技術課分子集団研究系技術係 技官

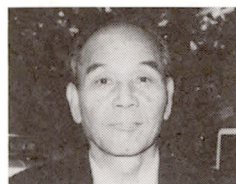
東京大学大学院理学系研究科中退、1989年4月より現職。専門は有機電荷移動錯体の物性。4年間、高压下における可視～近赤外領域の反射スペクトルの測定を中心に研究をおこなってきました。分子研ではより幅広い知識と方法を身につけたいと思っています。



豊 田 二 郎

技術課相關領域研究系技術系 技官

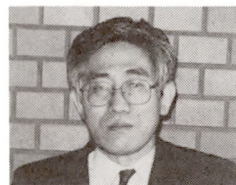
大阪大学大学院理学研究科博士後期課程修了、89年4月より現職。大学ではイリドの1, 3-双極子付加の研究を行っていました。分子研では特異な共役電子系を持ったテトラアザボルフィリン類の合成が主な研究テーマです。変な臭いを漂わせて周りの研究室にご迷惑をおかけしています。分子研はセミナーが多い。趣味：登山。



都 築 重 次

技術課 臨時用務員

平成元年3月まで管理局に所属して居ましたが、定年退官しました。当機構のキャンパスは私の小学生当時の母校の後地であり愛教大に勤務して居ましたのも当キャンパスでした。私にとりましては誠にはなれがたいキャンパスで第2の人生を送らせていただける事は大変喜しく思っております。すこしでも皆様のお役に立てればと思います。趣味は花作り。



松 澤 通 生 (電気通信大学電気通信学部教授)

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 (客員) 教授

昭和42年東大大学院工学系研究科博士課程 (応用物理学) 修了。東大工学部助手、電通大電気通信学部講師、助教授を経て、現在同電子物性工学科教授。本年4月より現職に併任。専攻は原子分子物理学、原子過程科学。特に励起原子、分子の関与する衝突ダイナミックスの理論的研究。これを機会に化学の種々の分野への視野を広げたい。



篠 塚 雄 三 (山口大学工学部助教授)

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 (客員) 助教授

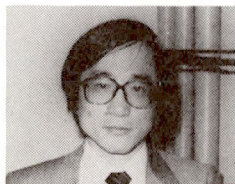
東京大学理学系大学院博士課程修了 (1980年)、学術振興会奨励研究員、山口大学工学部講師を経て、1987年より同助教授。物性理論専攻。主な研究テーマは凝縮物質における電子相関と電子格子相互作用、最近ではアモルファス物質に興味をもっている。趣味は日曜大工と山歩き、三十の手習いで始めたチェロ。



榎 田 孝 司 (大阪大学理学部教授)

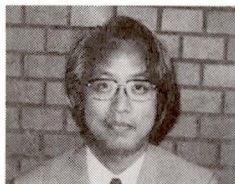
分子構造研究系分子構造学第二研究部門 (客員) 教授

東京大学工学部応用物理学科卒 (1959年)。東芝総合研究所、米国ベル研究所、東京大学物性研究所を経て1977年より現職。共鳴二次光学過程、励起状態のダイナミックス、無秩序系のサイト選択分光などをレーザー分光法の手法を用いて研究している。専攻は光物性物理学。趣味はドライブ、読書。



岡 寄 正 治 (工業技術院名古屋工業技術試験所主任研究官)
電子構造研究系電子構造研究部門 (客員) 助教授

昭和56年大阪大学大学院理学研究科博士課程を修了。カナダのブリティッシュコロンビア大 PDF、愛媛大医学部助手を経て、昭和63年より現職。逆相ミセル等分子集合体に興味を持つ一方、放射線化学反応、光化学反応の磁場及びマイクロ波効果を研究中。名工試では、業務上、NMR を用いての研究も行なっている。



大 橋 裕 二 (お茶の水大学理学部教授)

分子集団研究系分子集団研究部門 (客員) 教授

1964年東京大学理学部化学科卒、東京工業大学理学部助手を経て現職、本年5月より東京工業大学理学部教授併任。専門はX線結晶化学で、これまで無機化合物から生体分子にいたる種々の物質の構造を解析してきたが、興味の中心は構造解析という静的な手段を用いて、反応という分子の動的な過程を追いかけること。



阿知波 洋 次 (東京都立大学理学部助教授)

分子集団研究系分子集団研究部門 (客員) 助教授

北海道大学大学院修士課程を昭和48年修了後、北大応用電気研究所助手、分子科学研究所助手を経て、昭和61年4月より現職。

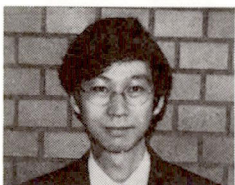
金属や半導体クラスターのレーザー化学を現在行なっています。



桜 井 英 樹 (東北大学理学部教授)

相関領域研究系相関分子科学第二研究部門 (客員) 教授

東京大学理学部化学科、同大学院博士課程修了。大阪市立大学理工学部、京都大学工学部を経て現職。現在理学部附属化学機器分析センター長および有機ケイ素材料化学実験施設長。物理有機化学、有機金属化学の研究を行って来たが、新しい分子科学の構築にむけて微力を尽したい。



中 村 栄 一 (東京工業大学理学部助教授)

相関領域研究系相関分子科学第二研究部門 (客員) 助教授

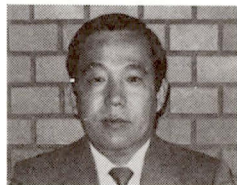
昭和53年東京工業大学大学院化学専攻博士課程修了。米国コロンビア大学研究員を中筋先生と同時期に過ごし、東京工大助手を経て昭和59年より現職。新反応の発見を鍵に、有機合成、有機金属化学、天然物化学を追求したい。趣味は当時の状態になるべく近い楽器等を用いて、ルネサンスから前期古典派の西欧音楽を演奏すること。



関 一 彦 (広島大学理学部助教授)

極端紫外光実験施設 助教授 (客員)

昭和50年東京大学大学院博士過程修了。東大物性研・分子研での
博士研究員・分子研物性化学部門助手(53年)をへて、61年より現
職。専攻は物性化学。広島での新しい仕事とあわせ、面白い有機膜
や有機・無機界面の作成と、シンクロトロン光による光電子分光、
軟X線吸収、光化学をドッキングさせられればと思っています。



干 鯛 眞 信 (東京大学工学部教授)

錯体化学実験施設配位結合研究部門 (客員) 教授

昭和43年東京大学大学院工学系研究科博士課程修了、昭和61年教
授。遷移金属錯体を用いたジエンおよびビニル化合物の低重合反応
に関する研究で学位を取得。現在は、新しい窒素固定の化学の開拓、
多核金属錯体の特徴を生かした有機合成、金属-硫黄クラスターの
合成とその物性などを研究課題としている。



山 口 敏 男 (福岡大学理学部助教授)

錯体化学実験施設配位結合研究部門 (客員) 助教授

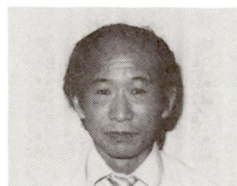
昭和53年東京工業大学大学院博士課程修了。東工大総合理工教務
補佐員、技官、助手を経て、昭和61年10月より現職。その間シャ
ルマス工科大(スウェーデン)に3年間博士研究員。X線・中性子
線を用いて溶液・アモルファス物質の構造と動的性質を研究して
いる。客員期間中、分子研にない装置を1つ完成させたい。



杉 山 加余子

分子集団研究系 事務補佐員

愛知教育大学を卒業し、分子研で勤務することになりました。私
の家は分子研の近くにあるので、幼い頃から分子研を見て育って
きたようなものです。学生生活を終え、社会人として生活をするよ
うになったため、まごつくことが多いですが、まわりの人にいろいろ
教えていただきながら頑張っていきたいと思います。



佐 藤 真 理

分子集団研究系界面分子科学研究部門 (流動) 助教授

昭和41年3月、北海道大学大学院博士課程中退。同大学触媒研究
所助手、助教授を経て、本年5月より現職(流動部門)。研究テ
ーマは光触媒、固体表面の光化学。分子研ではUVSORによる固体表
面吸着分子の光分解とその応用を研究する予定。趣味はスキー、山
歩き、写真、囲碁、音楽鑑賞など。

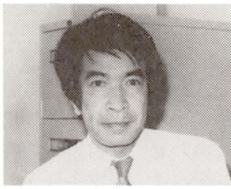


松 島 龍 夫

分子集団研究系界面分子科学研究部門 (流動) 助教授

北海道大学大学院理学研究科博士課程修了(S46)。北海道大学
触媒研究所助手を経て同助教授。米国テキサス大化学科及び西独ミ
ュンヘン大物理化学科にて博士研究員。

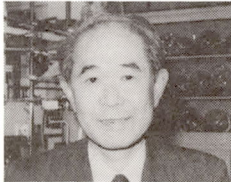
〔抱負〕分子研の環境を生かして表面科学の分野が何んでもやって
みたい。特に表面反応の分子動力学に興味がある。



大 森 唯 義

分子集団研究系界面分子科学研究部門（流動） 助手

昭和37年北海道大学理学部化学科卒業。昭和38年同大学触媒研究所助手。昭和63年同大学理学博士取得。専門は電気化学で、金属酸化物担持白金電極のメタノール酸化反応を手がけていました。メタノール燃料電池の陰極素材の開発が目的です。趣味は囲碁やマージャン、見知らぬところを散策するのも好きです。



都 野 雄 甫

相關領域研究系有機構造活性研究部門（流動） 教授

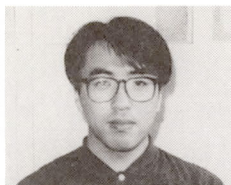
昭和28年大阪大学理学部卒。大阪大学産業科学研究所から、九州大学理学部に移って19年。その間、全く利用価値のない有機反応機構の研究にこだわり続けている。今度の新部門で研究室の設営は4回目。現在、独身アパートで、絶対役に立たない学術研究が自由に行える有機化学の基礎研究所をつくる夢を見ている。



三 島 正 章

相關領域研究系有機構造活性研究部門（流動） 助手

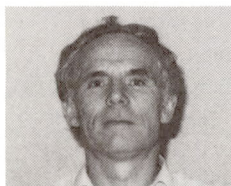
大阪大学理学研究科博士課程中退（昭和47年）。九州大学理学部助手を経て、平成元年5月より現職。専攻は物理有機化学（反応機構）。ここ数年、気相におけるイオン-分子反応の有機化学的研究を行っている。趣味は、山歩き、日曜大工 etc。



美 齊 津 文 典

機器センター 助手

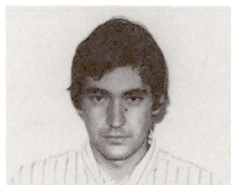
東京大学大学院理学系研究科博士課程を中退し、6月から現職。研究テーマは分子クラスターのイオン化過程。昭和63年4月から受託大学院生として分子研のお世話になっておりました（電子状態動力学部門）。今後は共同利用施設という場を生かして人間関係の輪を広げて行きたいと思っています。趣味は写真、水泳、スキー。



Fleming, Robert John

分子集団研究系極端紫外光研究部門（客員） 教授

オーストラリア、メルボルンモナシュ大学教授。1937年7月6日北アイルランドにて生まれ、ベルファストのクイーンズ大学卒業、同博士課程修了。1985年にクイーンズ大学より、自然科学博士の称号を得る。高温超伝導体の研究に興味を持つ。趣味は、ピアノを弾くこととジョギング。



Mathieu, Simon.

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 学振外国人特別研究員

フランス ポールサバチエツールズ大学博士、同大学量子物理学研究室所属。1958年11月18日南フランスマザメにて生れる。

My hobby : between truth and lie, between death and life, dream, reality, I just try to be.



丁 燕波 (Ding, Yanbo)

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 特別協力研究員

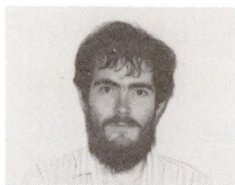
中国北京師範大学講師。1960年4月18日中国四川省生れ。北京師範大学卒業，同大学にて修士課程修了，専攻は理論化学。



Anni, Eleni

分子構造研究系分子動力学研究部門 特別協力研究員

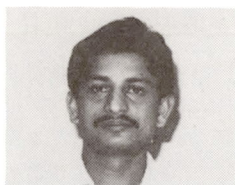
アメリカ ペンシルバニア大学医学部助手。1955年6月16日ギリシャ，アテネ生まれ。アテネ大学卒，パトラス大学にて学位取得，その後アメリカに渡りペリシルバニア大学で生化学の助手を務める。ヘム蛋白質に興味を持つ。趣味は，水泳と音楽。



Cuni, Feli Maseras

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 特別協力研究員

スペイン，バルセロナ大学教育助手。1962年4月3日スペイン，カタロニア生れ，バルセロナオトノマ大学卒，同修士課程を終え現在教育助手，有機金属化合物の反応性の理論をテーマとしている。日本語を学ぼうという気持はありますが，日本の皆さんとの会話のためには，カタロニア語をお教えした方がよいのではと思っています。



Srivastava, Prem Kumar

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 特別協力研究員

インド，バラナスヒन्दゥー大学助手。1959年インド・デオリアにて生まれ，ゴラクプー大学卒業後，同大学にて修士・博士号取得。1981年よりヒन्दゥー大学で，振動化学反応の研究に従事する。現在は，新しい種類のB-Z振動反応や，フォトクロミック化合物が示す光化学振動反応に興味をもっている。

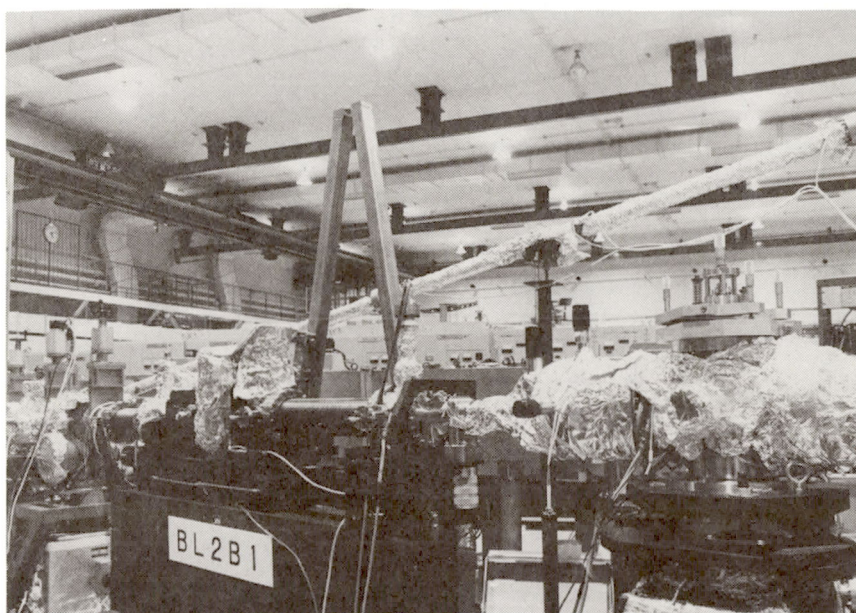
新装置紹介

グラスホッパー型斜入射分光器 (極端紫外光実験施設, UVSOR)

昨年、極端紫外光実験施設 (UVSOR) のビームライン 2B1 にグラスホッパー型斜入射分光器が設置された。この分光器は発光点が小さく指向性が良いという軌道放射光源の特性を考慮にいれて設計された真空紫外から軟X線領域をカバーする高輝度、高分解能の分光器である。3枚の回折格子を交換することによって15~600 Å (825~20eV) の軟X線、真空紫外領域の光を0.1~0.025 Åの分解能で得ることができる。特に炭素、窒素、酸素のK吸収端を含む軟X線領域はこれまで他の光源や分光器で得ることが困難であった領域である。これらの原子 (C, N, O) は有機、無機を問わず多くの分子の構成原子として極めて一般的であり、その内殻吸収の化学的環境によるシフト、選択的な内殻励起による化学反応など基礎、応用面での研究の範囲は極めて多岐にわたるものと思われる。

この分光器は共同利用装置として開放されており、現状では気体の吸収と無揮発性固体の吸収・全光電子収量の測定は随時行うことができるように整備されている。また、発光測定や質量分析が可能な気体 (揮発性固体) 用の真空槽の準備も進めている。

(平谷篤也記)



岡崎コンファレンス報告

第32回岡崎コンファレンス

励起分子の化学挙動についての理論化学

Theoretical Chemistry of Excited Molecules

阪大基礎工 笛 野 高 之

分子研 諸 熊 奎 治

分子および分子集団の励起状態は、化学物質の物性や反応性の核心をなすものである。振動・回転および電子励起分子系の化学挙動に関して、近年、実験的研究には著しい技術的進歩が見られ、これに伴って、励起状態の理解をさらに深める必要性が認識されてきている。理論化学は、それ自体最近ますます精緻さを増し、実験化学の進歩に対して顕著な相乗効果を発揮しつつある。ことに励起状態の化学においては、強力な計算手段を通して、非経験的な先導性を発揮しつつあるといっても過言ではない。

このような現状にかんがみ、励起分子の化学的挙動に焦点を置いて、理論化学・計算化学の立場に立った研究集会を開催することは、現在きわめて望ましいことである。最先端の研究情報を交換しつつ現状を展望し、さらに新しい手法を求めつつ将来の動向を探索することは、励起分子の化学を飛躍的に進展させる上で多大の意義をもつであろう。本コンファレンスの趣旨はその点にある。

討論主題としては、次の三つを設定した。

1. 励起分子の電子状態
2. 励起分子の動的挙動
3. 励起エネルギーの変換と移動

二日半にわたる会期中に、23件の講演（招待講演6件を含む）とポスターセッション（発表13件）があり、きわめて活発な討論が行なわれた。プログラムは次の通りである。

September 27 (Tuesday)

- | | | |
|-------|-------------------------------|---|
| 13:20 | H. Inokuchi | Opening Address |
| | T. Fueno | Opening Address |
| 13:30 | T. Fueno | Potential Energy Profile for the Reaction of NH with NO |
| 14:00 | K. Tanaka | A Novel Method of Incorporating Quadruple Correction in the Scheme of Multireference Single and Double Excitation Configuration Interaction |
| 14:30 | R. J. Buenker | Comparison of the Results of Perturbative MRD-CI Calculations with Full CI Benchmark Data |
| 15:30 | Coffee Break | |
| 16:00 | Y. Osamura | Molecular Structure and Potential Energy Surfaces of π -Conjugated Compounds in the Excited States |
| 16:30 | I. Ohmine | Energy Relaxation Processes in Liquid |
| 17:00 | S. R. Langhoff | Theoretical Studies of the Spectroscopy of Diatomic Molecules |
| 18:30 | Reception at the Faculty Club | |

September 28 (Wednesday)

- | | | |
|-------|--|---|
| 9:00 | M. Tsukada | Electron Attachment Processes of Molecular Clusters |
| 9:30 | K. Yamashita | A Theoretical Study of Transition State Spectroscopy: Laser Dressed Potential Energy Surface and Surface Hopping Trajectory Calculations on K+NaCl and Na+KCl |
| 10:00 | A. Tachibana
& R. G. Parr | Density Functional Theory for Excited States |
| 10:30 | D. R. Yarkony | Electronic Structure Aspects of Spin-Forbidden and Electronically Nonadiabatic Processes: Methods and Applications |
| 11:30 | Lunch Break | |
| 13:00 | Poster Session
(Poster papers are listed at the end of the program) | |
| 14:30 | H. Nakamura | Dynamics of Superexcited States of Molecules |
| 15:00 | K. Sakimoto | Effects of Electric Fields on Molecular Rydberg States |
| 15:30 | Coffee Break | |

16:00	I. Shimamura	Rydberg Series of Doubly Excited Resonance States of H ₂
16:30	K. Takatsuka	Quantization of Vibrationally Excited States
17:00	R. Schinke	Photodissociation of Polyatomic Molecules: A Probe of Nuclear Dynamics in Excited Electronic State

September 29 (Thursday)

9:00	H. Nakatsuji	Exponentially Generated Wave Functions
9:30	S. Iwata	Some Numerical Techniques in Quantum Chemistry
10:00	H. Kashiwagi & S. Yamamoto	CASSCF Study on Active Sites of Hemoproteins
10:30	J. P. Malrieu	Nearly-Diabatic Representations of Excited States and their Use for Interpretation of Photochemical Processes
11:30	Lunch Break	
13:00	Y. Fujimura	Dynamics in Strong Laser Field
13:30	S. Yabushita	Unitary Group Spin-Orbit CI Method and its Applications to Some Photodissociation Reactions
14:00	Coffee Break	
14:30	M. Shapiro	Photodissociation and Reactions with Coherent Light: Symmetry Breaking and Optical Induction of Chirality
15:30	S. Kato	Potential Energy Surfaces and Dynamics of Photochemical Processes
16:00	K. Morokuma	Closing Remarks

POSTER PRESENTATION

September 28 (Wednesday) 13:00 – 14:30 Room 201

1. T. Shoda, T. Noro, Y. Yamamoto and K. Ohno
The Electronic Structure of Molecules with Conjugated Carbon – Carbon Double Bonds
2. N. Nambu and S. Iwata
Photodissociation of HOCl and HOF
3. O. Kitao and H. Nakatsuji
On the Excited States of Conjugated Molecules
4. K. Onda and M. Iwai
Transitions between Highly Excited Vibrational States by Atom or Ion Impacts
5. F. Hirota
Excited States of Chlorophyll Dimer
6. S. Takeuchi and A. Imamura
Ab-initio Study of Circular Dichroism of Co (en)₃³⁺
7. H. Takagi
Angular Motion in Dynamical Processes Relevant to Super Excited States
8. M. Tsuda and S. Oikawa
Chemical Reactions of the Excited SiH₄ Molecule – Mechanism of Formation of the Radiative Species Observed in SiH₄ Plasma
9. H. Konishi and C. Fujikawa
The Excited States of Ions in Mass Spectrometry
10. S. Sakai
Theoretical Studies on Al_n (CO)_m Compounds
11. N. Honjou, G. F. Adams and D. R. Yarkony
State-Averaged MCSCF/CI Study on the Electronic Structure of the X, A, and B States of CaCl
12. O. Nomura, T. Hirano, A. Murakami and N. Nakagawa
The Ground State of HC₂N. A Possibility of the Triangular ¹A' State
13. S. Ikuta
The Energy of Formation of HCl₂⁻

第1日目

井口所長による歓迎の挨拶につづいて、世話人代表者である笛野教授が本コンファレンスの趣旨の説明を行った。講演は、まず笛野教授による NH ($^1\Delta$, $^3\Sigma^-$) と NO との反応系のポテンシャルエネルギーの CI 計算と生成物確認の実験研究から始められ、次いで田中講師が MR-CI 計算における 4 置換補正の新しい取扱い法の提案を行った。招待講演者である Buenker 教授は、独自の MRD-CI 計算の Davidson 摂動補正により、いわゆる full CI へ接近するための多数の “benchmark” 計算の結果を紹介した。とくに、 SiH_2 , HO_2 ($\bar{X}^2A'$, A^2A'), HO_2^+ (X^3A') の詳細な計算の示唆するところが大きであった。

コーヒープレイクのあと、長村博士がジェン系の $\pi-\pi^*$ 励起状態について、その構造とエネルギー曲面を論じ、大峰助教授は液体、とくに水におけるエネルギー緩和過程についての大規模動力学計算の結果と意味について詳しく説明した。次いで招待講演者として 2 人目の Langhoff 博士は、2 原子分子の CASSCF/MRCI 計算を主体として、 N_2 の Lewis-Rayleigh アフターグロー、 OH ($A^2\Sigma^-$) の寿命 (672ns), FeH の $^4\Delta-^6\Delta$ エネルギー差 (0.25eV), ZrO の電子状態などについて精密な計算の結果を解説した。金属化合物では f, g 軌道を含めた精力的な研究であった。

第2日目

塚田助教授の講演によって 2 日目が始まり、分子クラスターへの電子付着過程の断面積がクラスター分子数にどのように依存するかについて議論がなされた。山下博士は、 $\text{K}+\text{NaCl}$ 系のポテンシャルエネルギー曲面と反応軌跡を検討して、衝突錯体と励起錯体の変換についての考察を報告し、立花博士は励起状態の密度関数論を展開して、その観点から超電導性についても言及した。招待講演者である Yarkony 教授は、 $\text{Na} (^2P)+\text{H}_2 \rightarrow \text{Na} (^2S)+\text{H}_2$ および $\text{Na} (^2P)+\text{HCl} \rightarrow \text{NaCl}+\text{H}$ を例にとり、スピン禁制過程ならびに電子的非断熱過程についての電子理論を詳述した。CI エネルギー勾配とエネルギー曲面間のカップリングについての一般論を述べ、その実用性を解説したもので、示唆に富む講演であった。

昼食後、ポスター・セッションに入り、午後 2 時半から講演が再開された。この講演セッションはもっぱら動力学過程に関するもので、まず、中村教授により、きわめて高励起状態にある分子系の動的挙動を解析した結果が報告された。

次いで、崎本博士が分子のリドベリー状態に対する電場の効果について理論解析を行った結果の報告がなされた。短いコーヒープレイクのあと、島村博士により H_2 の二重励起共鳴状態のリドベリー系列に関して、理論の詳しい説明が行われ、高塚助教授は振動励起状態の量子化を主題として基礎的な一般論の展開と解説を行った。この日の最後の講演は、招待講演者である Schinke 博士による多原子分子の光分解に関するもので、光吸収した分子が分解して振動励起状態を与え

るエネルギー散乱の過程を半衝突過程としてとらえる動力学理論が詳しく解説された。とくに、 H_2O_2 分子が励起 1 重項状態 $\bar{\text{A}}$ および $\bar{\text{B}}$ の両者を経て振動励起した $\text{OH}+\text{OH}$ に分解し、その際、回転励起の寄与もあるらしいという説は、注目に値するものであった。

第 3 日目

第 3 日目は中辻助教授の講演で始まり、最近注目をあびつつある指数関数型波動関数 (exponentially generated wavefunctions) の理論展開と小さな分子の解離ポテンシャル曲線への応用が議論された。岩田教授は、量子化学における数値解法について講演し、ランチョス漸化法と有限要素法の有用性を強調した。柏木助教授は、金属ポルフィリンの励起状態を完全活性空間自己無撞着 (CASSCF) 法で計算した結果を論じるとともにこれに用いたプログラムの性能を紹介した。次いで、招待講演者 Malrieu 博士は、励起状態の断熱ポテンシャル面の計算結果から、動力学計算に便利な透熱ポテンシャル面を近似的に求める方法を展開し、これをファンデアヴァールス分子の分光、励起 Cs 原子の反応、連続状態中にうずもれた共鳴状態などに応用した。

午後のセッションでは、藤村助教授が強いレーザー場の中の分子の動力学的挙動について光子統計に重点をおいて論じた。藪下博士はユニタリ群を用いた電子配置間相互作用法において、スピン-軌道相互作用を効率よく取り入れる方法を発見し、プログラムを開発したことを述べた後、これを用いて、 CH_3I や ICN の光分解反応の生成物回転励起の起源を論じた。休憩後、最後の招待講演者として、Shapiro 教授はコヒーレントな光源を用いて通常では起らない反応を誘起させる方法を理論に基づいて提唱し、たとえば単分子反応において特定の結合を選択的に切断する可能性や、二分子反応をコヒーレント光で触媒的に誘起させる“レーザー触媒”ともいうべき可能性を示唆した。加藤助教授は、多原子分子の光反応において非断熱過程のはたす役割を、二・三の反応を例にあげて論じた。最後に、所内世話人である諸熊教授が、本コンファレンスで励起分子の化学的挙動についての理論的方法論および実験結果の解釈への最先端の研究情報の交換が行われ、新しい方向への見通しが得られたことを評価したいとの謝辞がのべられ、閉会となった。

第33回岡崎コンファレンス

生物化学分子の前生物的合成とキラリティの起源

Prebiotic Syntheses of Biomolecules and the Origins of Chirality

筑波大 原 田 馨

筑波大 下 山 晃

分子研 花 崎 一郎

分子研 西 信 之

化学進化の重要なテーマである生物化学分子の前生物的生成とキラリティの問題を主題とする本岡崎コンファレンスは、分子科学研究所の臨時事業「物質進化と自己秩序形成の分子科学」に関連した内容を持ち、化学・生物・地球科学・天文学と言った広い学問分野にわたる参加者を集めて開催された。特に、世界的にも実績を上げている炭素質隕石の収集と分析を今回の一つのトピックとして取り上げ、科学的に信頼性の高いデータに基づいた議論が行われた。この分野では、NASA の数々のプロジェクトにかかわられたアリゾナ大学の Cronin 教授をお招きし、最近の成果を聞くことが出来たのは大きな収穫であったし、筑波大学・東京大学・極地研を中心とする隕石グループとのより深い交流が行われた。二番目のトピックは、近年、理論面からの研究が盛んになった分子のキラリティの問題である。現在の地球上には、アミノ酸は、L(エル)型、糖類はd型の光学異性体が生物には選択的に利用されている。ところが、隕石に見いだされたアミノ酸には、L(エル)型もd型もほぼ同量存在している。なぜ、このような選別が生じたのかは大きな謎であるが、一方で、自然界にはパリティを破るような作用が存在し、この演算子も表記できるようになった。しかしながら、この作用によって生じる分布のかたよりは比較的小さなもので、自然現象をうまく説明できていない。この問題を、理論の専門家の参加を得て深く討論した。最後のトピックは、化学進化の初期過程についてハレー彗星の直接探査、あるいは炭素質隕石や地球の最古地層の分析など最近のいくつかの観測・実験事実に基づいた議論が行われた。とりわけ、Schwartz 教授の総合講演は、遺伝子の問題にまで深く言及した大変影響の大きいものであった。

2. プログラム

December 1 (Thursday)

Chairman: I. Hanazaki

- | | | |
|-------|--------------|---|
| 13:30 | H. Inokuchi | Welcome Address |
| | K. Harada | Opening Remarks |
| 13:40 | J. R. Cronin | The Meteoritic Record of Amino Acid Formation in the Early Solar System |

Chairman: N. Nakagawa

- | | | |
|-------|--------------|--|
| 14:40 | A. Shimoyama | Organic Compounds in Antarctic Carbonaceous Chondrites |
| 15:20 | Photograph | (Entrance) |
| | Coffee Break | (Room 201) |

Chairman: A. Shimoyama

- | | | |
|-------|-------------|--|
| 15:50 | S. Saito | New Interstellar Carbon-Chain Molecules as an Initial Step in Chemical Evolution |
| 16:20 | T. Yamamoto | On the Relation of Carbon and Nitrogen Contents in Carbonaceous Chondrites |
| 16:50 | T. Murae | High-Molecular Carbonaceous Compounds in Carbonaceous Chondrites |
| 17:30 | Reception | (2nd floor of the Faculty Club) |
| 20:00 | | |

December 2 (Friday)

Chairman: R. Kuroda

- | | | |
|-------|---------------|--|
| 9:00 | G. E. Tranter | Biomolecular handedness and Parity Violation |
| 10:00 | O. Kikuchi | Calculation of Parity-Violating Energy Difference between Mirror Image Molecules with Minimal Bases Sets |
| 10:30 | Coffee Break | |

Chairman: F. Toda

- | | | |
|-------|-----------|--|
| 10:45 | L. Barron | Fundamental Symmetry Aspects of Chirality and Absolute Asym- |
|-------|-----------|--|

metric Synthesis

11:45 Visiting "Daijuji-Temple" & Taking Lunch

14:20

Chairman: I. Hanazaki

14:45 W. Thiemann Of Investigation on Origin and Evolution of Molecular Chirality

15:45 M. Akaboshi Experimental Approach to the Origin and Amplification of Chirality
in Biomolecules

Chairman: N. Handa

16:25 A. Yamagishi Chirality Recognition by a Clay Surface Modified by Optically
Active Metal Chelates

16:55 H. Sawai Prebiotic Synthesis of Oligonucleotides

December 3 (Saturday)

9:20 A. W. Schwartz Current Thinking on Chemical Evolution and the Origin of Life

10:20 K. Kobayashi Abiotic Synthesis of Amino Acids by Proton Irradiation of
Simulated Planetary Atmospheres

10:50 Coffee Break

Chairman: N. Nishi

11:10 K. Harada Aqueous Organic Reactions Induced by Plasma

11:45 M. Ito, Synthesis of Polypeptides under Simulated Primitive Earth Condi-
N. Handa tions: Function of Polypeptides Synthesized during Repeated
& H. Yanagawa Hydration-Dehydration Cycles

12:15 K. Harada Concluding Remarks

12:30 Closing

3. 講演及び討論要旨

第1部 隕石中の分子とその起源

最初の招待講演は、Cronin 教授で、原始太陽系において生成したアミノ酸についての情報が隕石中にどのような形で残されているか、あるいはこのような分子が原始星間雲中でどの様にして生じたのかが話された。特に、マチソン隕石の分析結果は重要であり、生物が利用している以外のアミノ酸異性体が存在していること、又、同位体組成が生成機構の推定に大きな役割を果たすことが示唆された。続いて、筑波大学の下山博士は、日本の南極観測隊によって採集された隕石の分類と、炭素質隕石中から抽出された各種有機化合物の分析結果の総括的報告を行った。この中で、隕石中にはカルボン酸が大変少ないのに比べて、芳香族炭化水素及び脂肪族炭化水素が多いという特徴があることが示された。記念写真撮影とコーヒーブレイクの後、斎藤（修）名古屋大学教授は、野辺山の電波望遠鏡を用いた観測と実験室での同定実験から、 C_6H 、 CCS あるいは環状 C_3H といった全く新しい星間分子を発見したと報告した。続いて、宇宙科学研究所の山本博士は、種々の炭素質隕石の N と C の量の間には原始太陽系星雲中での凝縮過程に依存した相関関係があり、これらの量比は、C1 型炭素質隕石のものが比較的宇宙存在比に近いが、C3 型炭素質隕石では、炭素の量がかなり多くなっていることを示した。東京大学の村井博士は熱分解質量分析法により各種炭素質隕石中の有機高分子化合物を分析し、スペクトルからその構造を推定し、見いだされた化合物の分類からその起源について論じた。

第2部 キラリティの起源と進化

このセッションの最初の招待講演者は、英国ウェルカム研究所の Tranter 博士で、パリティ破壊演算子を用いた理論計算がどれほど光学異性体の分布を説明しうるかを報告した。続いて、筑波大学の菊地教授は、Tranter 博士のものより改善された計算を、過酸化水素とグリシンをモデルにして詳細に行ったが、依然として、その値は、小さいことを報告した。この報告は理論家の興味を引いた。Barron 教授は、前の二人と同様に、不斉の起源がパリティの非保存の原理によっているとの立場をとり、一度ある方向に向かったものは統計理論的には元に戻るが、実際には、どちらかに偏った向きにある事を K-メゾンの崩壊を例にとり示した。

二日目の昼に参加者全員で徳川家康ゆかりの史跡である大樹寺に出かけ、寺の一室で日本料理に舌鼓を打ち、その後、徳川家ゆかりの数々の品を見たり寺の境内を散策して、なごやかな交わりの時を持った。

午後は、ブレーメン大学の Thiemann 教授の講演から始まった。やはり分子のキラリティーの起源について言及したが、特に、磁場の影響が強いことを強調し、太陽光放射が地球の磁場の中で作用している事が決定的な役割を果たしているとの立場を主張した。京大原子炉実験所の赤星

助教授は放射性イットリウム崩壊によって生じる γ 線をアミノ酸水溶液に照射した時、不斉体の混合比が少ないものは選択的に壊され、系には、もともと多かったものが更にその相対量を増やすことを見いだしたと報告した。続いて、東京大学の山岸助教授は、不斉な金属キレート化合物で修飾した粘土鉱物による不斉識別の問題、及び、この粘土鉱物を反応場にしたい不斉酸化反応、還元反応に関する最近の実験結果を報告し、光学活性なルテニウムやコバルト、クロムの錯体が粘土表面で選択的に吸着され反応していく事を示した。

第3部 生物化学分子の生成と進化

このセッションの招待講演者は、オランダ・ナインメーヘン大学の Schwartz 教授で最近の化学進化研究のトピックスをいくつか話された。特に遺伝子の進化が重要であり、その祖先は、転移 RNA であること、又、RNA がどの様にして自然に合成されるようになったか、その複製がどの様にして可能となったのかについての仮説を様々な実験結果をもとに述べた。この話題と関連して、群馬大学の沢井教授は、比較的ドライな状態ではヌクレオチドが重合して、オリゴ体を生成すること、又、水中では、鉄、亜鉛、あるいはモリブデンイオンの存在がこの重合反応を大きく促進させることを示した。横浜国立大学の小林博士は、4MeV の陽子をいわゆる酸化型大気である二酸化炭素、一酸化炭素、窒素、及び水の混合物に照射すると、種々のアミノ酸が生成し、これは、原始大気に宇宙線や太陽フレア粒子が注いだ時に起こる可能な反応であると主張した。

原田教授は、生物化学分子が水中でのみ効率よく生成するという立場からプラズマ反応が水中で起こり、様々のアミンがアミノ酸に変換され、又、酸性水溶液中では、カルボン酸のアミノ化によってアミノ酸が生成することを示した。続いて、名古屋大学の伊藤氏は、アミノ酸アミドの混合溶液から、粘土の存在下で乾燥と水和が繰り返されると、大きなペプチドが生成することを示し、そのエステラーゼ活性や酸化還元活性といった触媒能の測定から、これらの生成物が原始酵素として作用したのではないかと提案した。

本コンファレンスでは、発表者以外にも、多くの専門家が討論に参加し、密度の高い内容をもった実り豊かなものであった。国内参加者と外国人講演者の相互理解と交流が深まったと同時にこの分野の若い参加者にとっても大きな刺激となり、国際的に高い水準の成果を今後生み出していくものと期待される。

第34回岡崎コンファレンス

燃焼における化学反応

Chemical Kinetics in Combustion

京大工 神 野 博

東大工 幸 田 清一郎

分子研 小谷野 猪之助

名大工 林 光 一

燃焼という応用研究分野は化学反応という専門分野と重要なつながりがあるにもかかわらず、日本においてはこの両者の研究者どうしの交流は以外に少なく活発でないのが現状である。燃焼研究の歴史はかなり長いのだが、年々研究分野が細くなり且つ専門的になり化学反応などの基礎研究の重要性が増してきている。このような根本的なことが一つの理由となって本コンファレンスが開催された。以上の様な点から現在の問題点を考慮して4つのテーマに対し3日間で討論が行なわれた。

井口所長の歓迎挨拶ならびに神野（京大）の挨拶を幸田（東大）が代読する形で会議の主旨や目的などが述べられ各セッションに入った。セッションは“燃焼の素反応”、“反応のポテンシャル曲面及び速度の理論”、“高温反応と燃焼反応機構”、“燃焼現象の可視化と反応の分光学的追跡”の4つのテーマから成っており、各テーマごとに招待講演者が討論する形式がとられた。

第1セッションの“燃焼の素反応”では Wolfrum（ハイデルベルグ大）及び Gutman（アメリカンカンソリック大）がそれぞれアレニウス型の化学反応速度では並進や振動等の自由度による反応が記述できないという点、そしてエチルラジカルと酸素分子との反応の炭化水素酸化反応における重要性などを論じた。幸田（東大）はエチレンを例にとって二重結合分子と酸素の付加結合での生成物の分岐比決定が重要であることを述べ、鷺田（公害研）はアセチルラジカルや酸素原子を多く含むラジカルと酸素原子、分子の反応速度の実験結果を報告した。佐藤（千葉大）は低温での非アレニウス型の反応速度をトンネル効果から解釈し半経験式で論じた。

“反応のポテンシャル曲面及び速度の理論”の第2セッションでは、Harding（アルゴンヌ研究所）が、反応ポテンシャル面の計算と可能な反応について $\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$ の例をとって示した。中村（分子研）は分子の振動や回転による遷移の違いによる原子移行反応を $\text{O} + \text{H}_2$, $\text{O} + \text{HCl}$, $\text{H} + \text{H}_2$ などのポテンシャル計算により論じた。笛野（阪大）は $\text{NH} + \text{NO}$, $\text{NO} + \text{O}_2$, $\text{NH} + \text{O}_2$ の反応をポテンシャル面を使って計算し実験による検証を行ない、井上（公害研）はエチレ

ン類と酸素原子により生成されるビノキシラジカル類のレーザー誘起蛍光法の同定を試みた。

第3セッションでは“高温反応と燃焼反応機構”が討論された。Just（西ドイツ航空宇宙研究所）は、燃焼反応で重要な酸素、水素原子に関連した幾つかの反応を衝撃波管を用いて調べるとともにフェニルやトルエンの分解についても述べた。又 Westbrook（ローレンスリバモア国立研究所）は、自着火やノック現象解明のための炭化水素燃料の詳細な反応機構とモデリングについて論じた。三山（長岡技科大）は高温での二酸化炭素の分解について、越（東大）は高温のアセチレン酸化反応について、藤井（長岡技科大）は非アレニウス型の酸水素反応速度についてそれぞれ論じた。さらに、林（名大）は化学反応機構の感度解析について、福谷（京大）は水素／空気拡散火炎の構造と反応機構について、吉原（立命館大）はすす生成のシミュレーションと衝撃波管による実験結果の比較について、佐野（東海大）はメタン／空気予混合気体の流体力学を考慮した熱面着火のシミュレーションについて、吉川（豊橋技科大）は一次元デトネーションの構造について、小島（豊田中研）はブタンの二段着火や負の温度係数のシミュレーションについて、猪俣（上智大）はハロゲン化物の炭化水素への添加の実験と解析を、三谷（航空宇宙技術研）はアルカリ金属塩の火炎に対する効果についてそれぞれ議論した。

最後のセッション“燃焼現象の可視化と反応の分光学的追跡”では、Hanson（スタンフォード大）が、レーザー誘起蛍光法により、反応性流れの化学種の濃度、温度、速度の二次元分布のイメージングの手法を紹介し、衝撃波管への応用を示した。出口（豊橋技科大）はレーザーラマン散乱で、アセチレン、ヒドロキシラジカル、多環芳香族などの誘起蛍光計測を行い、山田（分子研）は赤外ダイオードレーザーやマイクロ波分光による分子構造や反応追跡例について述べ、菅原（化技研）は赤外ダイオードレーザー吸収法によるラジカル反応追跡結果を発表した。最後に三山（長岡技科大）のまとめと将来への展望が述べられ3日間の会議が閉じられた。

本コンファレンスでは、岡崎コンファレンスとしては異例の応用分野での内容が中心であったが、日本の燃焼化学の分野の活性のために非常に有意義であったと思う。とくに化学専門の分野の方々と応用分野の方々が交わって議論できたことに対し、また会議のお世話をしてくださった分子研の関係者各位に対し感謝します。

December 20 (Tuesday)

Chairman: S. Tsuchiya

1:00	H. Inokuchi	Welcome Address	
	H. Jinno	Opening Remarks	(20)
	J. Wolfrum	Effects of Translational and Vibrational Excitation on Reaction Rates	(60)
	S. Koda	Some Problems in Atomic Oxygen Reactions and Flame Chemistry	(30)
2:50	Photograph	(Entrance)	
	Coffee Break	(Lounge)	

Chairman: I. Koyano

3:30	D. Gutman	Chemical Branching in Oxidative Reactions of Polyatomic Free Radicals	(60)
	N. Washida	Oxidation of Acetyl Radicals	(20)
	S. Sato	Tunnel Effect in Chemical Reactions	(30)
5:20			
6:00	Reception	(2nd floor of the Faculty Club)	

December 21 (Wednesday)

Chairman: K. Morokuma

9:00	L. B. Harding	Computational Combustion Chemistry: Potential Energy Surfaces and Reaction Dynamics	(60)
	H. Nakamura	Potential Energy Surface Topography and Atom-diatom Chemical Reactions	(30)
	T. Fueno	Mechanism of the Reaction of NH with O ₂	(30)
	G. Inoue	Laser-induced Fluorescence Studies of Oxygen-containing Hydrocarbon Radicals	(20)
11:20	Lunch	(Dining Room of the Faculty Club, lunch ticket requested)	

Chairman: T. Tsuboi

12:30	Th. Just	Elementary Reactions at High Temperatures – Pyrolysis and Oxidation of Aromatic and Linear Compounds –	(60)
	H. Miyama	Decomposition of CO ₂ and Recombination of CO and O	(20)
	M. Koshi	On the Oxidation Reactions of C ₂ H ₂	(20)
	N. Fujii	Investigation of Elementary Reactions in H ₂ -O ₂ Systems	(20)
2:30	Coffee Break	(Lounge)	

Chairman: H. Matsui

3:00	C. K. Westbrook	Recent Progress in Mechanism of Hydrocarbon Combustion Reactions	(60)
	K. Hayashi	Sensitivity Analysis in Combustion Chemistry	(30)

Chairman: S. Koda

4:30	S. Fukutani	Combustion Reactions in Hydrogen-air Diffusion Flames	(30)
	F. Yoshihara	Mechanism of Sooting	(20)
	T. Sano	Ignition of Premixed Gas over a Hot Plate	(20)
	N. Yoshikawa	Numerical Analysis of One-dimensional Detonation Structure	(20)
6:00	Dinner	(A map to local restaurants will be provided)	

December 22 (Thursday)

Chairman: K. Hayashi

9:00	K. Kojima	Examination of 2-stage Ignition Mechanism by Detailed Chemical Kinetics	(20)
	T. Inomata	Addition Effect of Halogenated Compounds on Ignition of Hydrocarbons	(20)
	T. Mitani	Mechanism of Heterogeneous Flame Suppressants	(20)

Chairman: N. Nishi

10:00	R. K. Hanson	Planar Imaging	(60)
	Y. Deguchi	Laser Spectroscopy of Soot Formation	(20)
	C. Yamada	Vibration-rotation and Rotation Spectra of Free Radicals	(30)
	K. Sugawara	Diode Laser Kinetic Study of Radical Reactions	(20)
12:10	H. Miyama	Concluding Remarks	(10)
12:20	Closing		

国際協力事業報告

日英共同研究 $n+n$ ミーティング

分子の電子構造とその動的挙動に関する研究会

分子研 吉 原 經太郎

分子研では昭和56年度から人物交流を中心とした日英科学協力事業「分子科学」を行っている。その中の一つの分野である電子構造動力学分野では大へん活潑な人物交流が行われている。すでに双方合わせて約20名の中・長期派遣を文部省・SERCなどいくつかの財団の援助によって行っており、多くの研究成果を挙げている。このような状況下で、本分野の現状・将来を討議する研究集会を早期に開催することを期待していたが、これが実現した。

個々の講演タイトルは後述の通りであるが研究対象を挙げると、

1. 孤立分子系における分子内エネルギー移動——エネルギー準位間相互作用、無輻射遷移、高励起状態の緩和など。
2. 光化学動力学——1光子および多光子解離および異性化など。
3. 分子間相互作用の動力学——溶媒・溶質相互作用、溶媒の動力学、クラスター相互作用など。
4. 極端条件下での反応——クラスター内反応、弱い相互作用をしている分子間の反応など。
5. エネルギーおよび電子移動の動力学——イオン対生成、ジェミネーと再結合、電子移動のエネルギーギャップ則など。
6. 巨大クラスターの化学と物理——クラスター構造、生成と解離の機構、溶液内でのクラスター構造と物性など。
7. 動的分光法の新手法——高分解能レーザー分光、蛍光およびイオンディップ分光、速度選択分光、フェムト秒・ピコ秒分光、多光子分光、LIF分光、分子動力学計算など。

講演者は英国側5名、日本側8名と小さな研究会であったので講演時間・討論時間が十分に用意されており、時間をかけて活発な意見交換を行うことができた。討論には分子研の幅広い研究者および、外国人の滞在研究者が数多く加わったので大へん有効有意義であった。

今回は英国の中堅研究者が3名参加したが、これまで日本との関係はほとんどなかっただけに、本研究会が将来に互った人物交流に有効な役割をはたすことができると考えている。

最後に両国の研究者は今回の研究会が極めて有意義であったことを認め、2年以内に第2回研

究会を英国で開催することに向けて準備することを双方が同意した。

プログラム

March 16 (Thursday)

Chairman: K. Yoshihara

- | | | | |
|-------|-------------|--|------|
| 9:10 | H. Inokuchi | Welcome Address
(Director General of IMS) | |
| 9:15 | I. Powis | High-Resolution Studies of Velocity-Selected Photofragments
(Univ. of Nottingham) | (50) |
| 10:05 | H. Kato | Perturbation and the Effect on Transition Intensity and Line Shape
(Kobe Univ.) | (50) |
| 11:10 | J. Pfab | Photodissociation Dynamics of Jet-Cooled Molecules
(Heriot-Watt Univ.) | (50) |

Chairman: D. Phillips

- | | | | |
|-------|---------------|--|------|
| 13:20 | R. J. Donovan | Highly Excited States and Multiphoton Processes
(Univ. of Edinburgh) | (50) |
| 14:10 | K. Obi | Spectroscopy and Excited-State Dynamics of Free Radicals
(Tokyo Inst. of Tech.) | (50) |
| 15:30 | M. Ito | Two-color Double Resonance Laser Spectroscopy
(Tohoku Univ.) | (50) |
| 16:20 | K. Yoshihara | The Role of Hot Molecules in UV Single-Photon and Multiphoton
(IMS) Chemistry | (50) |

March 17 (Friday)

Chairman: M. Ito

- | | | | |
|-------|-------------|--|------|
| 9:00 | I. Hanazaki | Dynamics of Weakly-Bound Complexes in Supersonic Jets
(IMS) | (50) |
| 10:10 | D. Phillips | Spectroscopy of Jet-Cooled Solvated Molecules
(Royal Inst.) | (50) |

11:00 O. Kajimoto Effects of Microscopic Solvation on Formation of Charge Transfer
(Univ. of Tokyo) State (50)

11:50 Excursion to "Hamana Lake" & "Hamamatsu Photonics Co."

March 18 (Saturday)

Chairman: R. J. Donovan

9:00 A. J. Stace Dynamics of Molecular Clusters (50)
(Univ. of Sussex)

9:50 N. Nishi Intra-Cluster Ion-Molecule Reactions Induced by REMPI of
(IMS) Molecular Clusters (50)

11:00 N. Mataga Photoinduced Electron Transfer and Dynamics of Transient Ion Pair
(Osaka Univ.) State (50)

11:50 General Discussion and Suggestions for Future Collaborations (50)

研究会報告

「スピン化学の新展開」

京大理 広 田 襄
阪市大理 伊 藤 公 一

近年、化学の分野で電子スピンの関与する現象の研究は著しい発展と広がりを見せている。たとえば、化学反応の磁場効果や、CIDEP, CIDNP による常磁性短寿命種と光反応の微細機構の研究、有機磁性体や超伝導物質における磁性の研究、興味あるラジカルの構造と電子状態の解明、生体関連錯体の構造と機能の研究などにおいて著しい進展がみられる。この分野におけるわが国の研究のアクティビティーは高く、多くの優れた研究が行われ、それぞれ ESR 討論会、分子構造総合討論会、光化学討論会、錯塩討論会など関連学会で発表されている。しかし、今後一層の発展を期するには、構造、反応、物性の各分野で、電子スピンの関与する化学の研究にたずさわる第一線の研究者が集まって、この分野の研究の問題意識を深め、将来の発展への動向と展望を探ることが有意義ではないかと考えて本研究を企画した。

研究会の主題は、1) 励起状態と反応 2) 磁場効果と有機ラジカル 3) 集合スピン系 4) 方法論の展開、の4つで、若手から中堅の研究者の方々に講演をお願いし、質疑応答を含めて約30分でご自身の最近の研究から話題を提供していただいた。インフォーマルな雰囲気の中で自由に意見の交換ができるよう、各主題のセッションの最後に約40分の自由討論の時間を設け、そのセッションでの発表についてのコメント、関連する新しいトピックの紹介や問題点についての議論の続きなどを行った。一般に討論は活発で、この試みはある程度成功であったと思われる。

プログラムから分かるように、今回の研究会で論じられた話題はかなり広い範囲にわたり、個々の問題点について議論を深め、将来の展望を探るところまで十分に話し合う時間的余裕はなかったが、スピンの関与する化学におけるわが国の研究の現状と問題点を明らかにすることは出来、十分意義のある研究会であったと思われる。以下にそのプログラムを示しておく。

12月6日(301号)

A 励起状態と反応

14:00-16:30 司会 林 久治

1. 短寿命三重項状態の研究：ピリジン誘導体の三重項状態を中心として
(京大理) 山内清語
2. ベンジルの三重項状態について
(東工大理) 小尾欣一
3. 過渡的ラジカルイオン対とスピン分極：TMPDの光イオン化
(阪大理) 村井久雄
4. リン中心ラジカル及びその付加反応中間体のCIDEP
(東北大非水研) 秋山公男
5. CIDEPおよびCIDNPを用いたキサントンのキサントンからの水素引き抜き反応の研究
(東北大理) 寺嶋正秀

16:50-17:30

自由討論 司会 広田 襄

12月7日(301号)

B 方法論の展開

8:30-11:00 司会 桑田敬治

1. 銅(II)イオンとピコリン酸アミド配位子との錯体化学：スピンをプローブとしてその電子および分子構造を探る
(愛媛大教養) 東 長雄
2. 高周波ESRの現状と問題点
(京大理) 大矢博昭
3. パルスEPRの構造化学研究への応用
(東北大非水研) 大庭裕範
4. 常磁性種の空間分布：パルス法の活用
(図書館情報大) 磁谷順一
5. エタノール分子による電子の溶媒和
(北大工) 市川恒樹

11:20-12:00

自由討論 司会 吉田 宏

C 磁場効果と有機ラジカル

13:00-15:00 司会 小尾欣一

1. 種々のメチレン鎖両端ビラジカルのスピンドイナミックスと磁場効果
(金沢大薬) 谷本能文
2. 光酸化還元反応に対する磁場効果
(分子研) 中垣良一
3. 気相励起分子の動的挙動の磁場効果
(理研) 林 久治
4. 液相ラジカル対内相互作用: 反応収率検出および蛍光検出 ESR 法による研究
(名工試) 岡崎正治

15:20-16:50 司会 伊藤公一

5. hfs 結合定数に関する理論的研究
(京大工) 中辻 博
6. 偶数重項多原子分子に関するいくつかの話題
(京大理) 百瀬孝昌
7. 2-ニトロピフェニルの紫外線照射により生じるスピン基底三重項状態分子種について
(横浜国大工) 樋口治郎

17:00-17:40

自由討論 司会 志田忠正

18:00-19:30

懇親会 (研究棟セミナー室201号)

12月8日 (101号)

D 集合スピン系

8:30-10:10 司会 樋口治郎

1. 高スピン有機分子のスピン整列機構
(阪市大理) 手木芳男
2. 三重項励起子とソリトン
(分子研) 阿波賀邦夫
3. 水素結合結晶における中性ラジカル
(分子研) 岡本 博

4. 芳香族フリーラジカルクラスターの有効交換相互作用の abinitio 計算

(阪大基礎工) 山口 兆

10:30-12:00 司会 山口 兆

5. 有機固体における伝導電子スピン共鳴

(東大物性研) 菅野 忠

6. A_{1g} 型スピン揺らぎと超伝導

(分子研) 那須奎一郎

7. 酸化物高温超伝導体の磁束量子捕捉

(阪市大理) 工位武治

12:00-12:40

自由討論

司会 木下 実

「生体機能に対する分子科学的アプローチ」

広大理(分子研) 今 村 詮

分子研 柏 木 浩

生体機能を、分子構造論の立場から、あるいは電子状態にもとづいて説明しようという方向の研究は、その重要性が広く認識され、この分野の break through の出現がまたれている。また、この分野は、小谷先生が先鞭をつけられ、ついで右衛門佐先生、永田先生にひきつがれた歴史を有している。この歴史をひきつぐとともに、さらに隣接分野も包含して大きく発展させ、break through を出現させたいという願望をもって、本研究会を企画した。そのプログラムを以下に示す。

第1日 1月12日(木)

13:30-15:10

☆はじめに—生体機能に対する電子論的アプローチは可能か—

今村 詮(広島大理)

☆タンパク質のモジュール構造－機能と進化－

郷 通子, 野坂通子 (九大理)

15:10-15:30

Coffee Break

15:30-17:50

☆生体高分子のコンフォーメーションとダイナミックスー固体高分解能 NMR によるアプローチ

齊藤 肇 (国立がんセンター)

☆生体内分子における電荷移動機構についてのモデル的考察

田中一義 (京大工)

☆水素結合系におけるソリトニックプロトンの動力学

西本吉助 (大阪市大理)

[懇 親 会]

第2日 1月13日 (金)

9:30-11:50

☆2, 3 のヘム蛋白質の構造と機能

山中健生 (東工大理)

☆ミオグロビンの酸素結合反応とその動的構造

城 宣嗣, 佐藤文俊*, 飯塚哲太郎,

坂口喜生, 林 久治 (理研, 慶大理工*)

☆ポルフィンの励起状態の Composite natural orbital による CI 計算

山本裕一 (北大理)

[昼 食]

13:30-14:10

ポスターセッションの紹介

14:10-16:30

ポスターセッション

1. 濃度差によって駆動される発振子の時空間での秩序形成

大山 登 (名大教養)

2. 蛍光解析による蛋白質トリプトファンの分子内運動についての研究

田中文夫, 又賀 昇* (三重看護短大, 阪大基礎工*)

3. 非対称 Fe-Co ハイブリッドヘモグロビンのリガンド結合中間段階における Fe- リガンド伸縮振動

紙中庄司, 小倉尚志, 米谷 隆, 北川禎三 (分子研)

4. キナクリンと核酸との相互作用

谷 誠治, 久保田幸雄 (山口大理)

5. A Model for the Stimulation of the Formation of Splicing Intermediates of Tetrahymena rRNA Precursor by Threonine and Valine

藤 博幸, 今村 詮* (九大理, 広島大理*)

6. ヒト発癌物質の三次元構造

神沼二真, 大上徳子 (都臨床研)

7. カルシウムを結合するタンパク質の分子動力学

中川節子, 白鳥康彦* (北里大薬, 蛋白工学研*)

8. 分子動力学法による自由エネルギー計算

斉藤 稔 (蛋白工学研)

9. 電極反応における誘電飽和の効果

吉森 明, 垣谷俊昭, 又賀 昇* (名大理, 阪大基礎工*)

10. 光合成過程における電子移動速度の量子論的評価

三上 泰 (東北大理)

11. 光合成における水分解系 Mn クラスターの分子構造と機能

楠 正美 (明治大工)

12. 金属酸素結合エネルギーの PUMP4 計算

高原洋一, 山口 兆, 笛野高之 (阪大基礎工)

13. 希土類フタロシアニン二量体の電子状態

石川直人, 大野 修, 海津洋行 (東工大理)

14. 物質学的な立場から見た視物質発色団の光異性化機構の諸問題

鈴木英雄, 伊藤悦郎 (早大理工)

15. 生合成と分子構造

相原惇一, 市川 紘* (静岡大理, 星薬科大*)

19:00-21:00

☆特別セミナー

大きなゆらぎを持つ電子系の理論-共鳴ハートリーフォック乱雑位相近似-

福留秀雄 (京大理)

第3日 1月14日(土)

9:00~10:40

☆酵素反応系を応用したオン・オフシステムの設計

岡本正宏(九大農)

☆化学受容器モデルとしての界面の発振現象

吉川研一(名大教養)

10:40~11:00

Coffee Break

☆BIOCESによるプロテインモデリング

梅山秀明(北里大薬)

☆静電ポテンシャルのコンピュータグラフィックス—アミノ酸エステルの加水分解反応を例として—

秦野甯世(中京大教養)

☆終りに

柏木 浩(分子研)

本研究会の特色としては、講演の内容はなるべく広く隣接分野を含めるようにしたこと、およびその運営の方法において随所に新しい試みを含めたことであろう。すなわち、ポスターセッションを設けて、討論主題にとらわれず広い範囲の分野をカバーするとともに、そのポスターセッションの内容を2~3分で要領よく発表する機会を設けたことがあげられる。さらには、若い研究者からの強い要望に応じて、第2日目の夜に、福留秀雄氏によって、興味ある物理化学的性質を有するが、通常の分子軌道法による計算ではよい結果が得られない系についての取り扱いに関する特別セミナーが開講され、非常に好評だったことなど、新しい試みは大変成功している。

講演内容について簡単に紹介すると、第一日目は、生体高分子に対する理論的および実験的アプローチについて、種々の立場からの紹介がなされた。理論面では、電子論的立場からの現状の概観と将来の展望、ソリトンの概念による生体系の取り扱い、タンパク質の構造から引き出されるモジュールという概念の紹介がなされ、実験サイドからは固体高分解能NMRによる生体高分子の構造と機能との関連の研究、電導性高分子との類推による生体内分子の電荷移動機構の考察についての講演があった。

第二日目午前は、いくつかのヘムタンパク質について、構造と機能の関連についての紹介があり、ついで、ミオグロビンと酸素との結合による構造変化が論じられた。また、ポルフィンの励起状態に対する精度のよい分子軌道計算が実験とよく一致する結果を与えることが示された。午

後は、前述のポスターセッションで、広い範囲から多くの興味あるテーマによる発表がされ、夜には、これも先に述べた福留氏の特別セミナーが持たれた。

第三日目は、計算機シミュレーションの手法の酵素反応系への応用、界面発振現象を基礎にした生体内化学受容器の機能発現のメカニズムの研究、データベースを巧みに用いたタンパク質の構造・機能予測の試み、電子計算機による酵素反応機構の描像化の試みが紹介された。

この研究会には、小谷先生、右衛門佐先生をはじめとして、若い研究者や、異なる分野の研究者も数多く出席して活発な議論がなされた。したがって、本研究会は、生体電子論的アプローチの発展の可能性を、隣接領域を大きく含める形で操り、将来へのたしかな手応えを感じた大変有意義な研究会であったと考えている。

錯体の高分子化および 知能化による複合機能の発現

東大工 戸 嶋 直 樹

去る平成元年1月27～28日に、「錯体の高分子化および知能化による複合機能の発現」と題する分子研研究会を分子研1階会議室で開催した。

錯体化学は伝統的な研究分野であり、これまで理学系の研究者により多くの研究成果が蓄積されている。一方工学系の研究者は錯体を用いて、触媒、センサー、分子認識・分離材料、電子機能材料など多方面への応用展開をはかっている。しかし最近では、理学系研究者の中にも機能発現の立場から、錯体化学を見直そうとの動きがでている。この立場の研究には、従来からの錯体化学の専門家以外の人も多く、中には「めくらへびにおじず」的発想で成果は上げているものの、専門家の目から見ると誤った考え方があったり非効率な研究もある。従って、それぞれ立場は異なるが錯体の機能発現に興味をもつ第一線の研究者を集め、それぞれの立場からの発表・討論を通じてこの分野の一層の発展をはかろうというのが、本研究会開催の主旨である。

このような研究会の必要性が、重点領域研究「高分子錯体」の集まりの機会に話題となり、ぜひとも重点領域研究の枠をも越えた広範な研究分野の研究者を集めて開きたいと言うことで意見が一致した。具体的な討論主題は、大瀧仁志、木村栄一両分子研教授と、戸嶋の間で意見交換し、1泊2日で27日（金）13時30分から28日（土）15時まで、12件の講演をお願いすることとした。

プログラムは別掲の通りであるが、比較的若い人を中心に、幅広く、テーマを設定できたといわれている。1人の持ち時間は40分であるが、講演時間は25分とし、できるだけ討論に多くの時間をさくようにした。プログラムを見てもらえば分かるように、錯体合成、重合、錯形成から、物性、構造、分子設計にまたがり、機能面でも、触媒、電子、光、エネルギー変換、情報、生理、薬理などがとり上げられている。それぞれの立場からの討論があり、お互いの理解を深めることができたと確信している。

この研究会には、時間の関係で講演はお願いできなかったが、討論を盛り上げていただくため、この分野の第一級の研究者約20名に出席をお願いした。快くお引き受けいただき、活発に御討論いただいた。この場を借りて厚く感謝する。講演いただけなかった参加者の研究の背景を皆に知っていただくために研究紹介を予稿集に入れることをお願いしたところ多くの方に御快諾いただいた。この新しい形の予稿集も会の成功に大いに力があつたと考えている。また、丁度この会の直前まで同じ会場で、ワークショップ「錯体化学と電気化学の接点」が開かれていたため、その参加者のなかからも多くが、本研究会に引き続き参加いただいた。おかげで本研究会の参加者は60名を越え、大盛会となった。非公開の研究会であるにもかかわらず、この分野の第一級の研究者が、北は北海道大学から南は九州大学まで、全国の大学・研究者から、これほど多く集まったことは、この分野に興味を持つ研究者の質の高さと数の多さを示すものであろう。この分野の一層の発展が期待される以所である。

最後に、本研究会開催にあたり、会場、開会、懇親会等いろいろお世話願った大瀧・木村両教授と錯体化学実験施設の若い研究者の皆様に心からお礼申し上げます。

プログラム

1月27日（金）

13時30分～15時50分

1. Introductory Remarks

戸嶋直樹（東大工）

大瀧仁志（分子研）

2. 高分子錯体における多重相互作用

栗村芳実（茨城大理）

3. 高分子錯体の合成と電子移動機能

山本隆一（東工大資源研）

4. 分子不斉を有するポルフィリンとその金属錯体の分子設計

相田卓三（東大工）

(コーヒーブレイク)

16時20分～18時20分

5. 金属フタロシアニンポリマーとその機能

白井汪芳 (信大繊維)

6. 光合成モデルとしての高分子錯体複合系

金子正夫 (理研)

7. 錯体を經由する分子促進輸送

西出宏之 (早大理工)

18時20分～20時00分

懇親会

1月28日 (土)

9時00分～10時20分

8. 機能性大環状ポリアミンの合成とその化学的性質

小池 透 (広大医)

9. 多官能性不斉クラウンエーテルを用いた酵素類似の立体選択的反応

佐々木茂貴 (東大薬)

(コーヒーブレイク)

10時40分～12時00分

10. シクロデキストリン錯体を触媒とする RNA の特異的開裂

小宮山真 (筑波大物質)

11. 受容体-薬物分子間相互作用に基づくコンピューター薬物設計

板井昭子 (東大薬)

昼 食

13時30分～15時00分

12. 金属錯体における配位子間相互作用と分子認識

山内 脩 (名大理)

13. 膜界面における新しい情報交換・増幅の分子設計と化学センサーの開発

梅沢喜夫 (北大理)

14. Concluding Remarks

木村栄一 (分子研)

「水素・電子結合系における諸問題」

分子研 三 谷 洋 興

水素・電子結合系におけるプロトン (H^+), 水素原子 (H^0), もしくはハイドライド (H^-) の挙動に関する問題は、古く、且つ新しい研究課題である。最近、これまでの静的もしくは分子レベルでの研究からさらに進んで、動的もしくは集団の挙動に着目した研究が展開されつつある。そこでの水素－電子相互作用に起因した現象は新しい物性の出現の可能性を示唆している。この研究会は、“水素・電子結合系における新しい物性の創造”に向けて、それにまつわる諸問題を微視的な観点から解明するとともに、物性の創造のための基本的な指針を確立することを目的として企画された。

この研究会では、できる限り広い視野から水素－電子相互作用を捉え、今後の展開を計る上で基盤を創ることが現在最も重要であるとの観点に立って、様々な水素・電子結合形態における特異性に注目し、無機物半導体からグラファイト、電荷移動錯体、さらに生体関連物質にその対象を広げた。不純物水素の電子状態、水素の物理吸着、ホールバーニングにおける水素の役割、生体物質におけるプロトン輸送、酵素での水素と電子移動のからみ、電荷移動錯体での電子・プロトンの連動など、これまでほとんど独立に研究されていた現象が、研究会の討論を通じて、互いに密接に関連していることが確認された。ここでなされたいろいろな角度からの質疑応答は、これまでに経験し得なかったユニークなものであり、いろいろな分野の専門家が集まった研究会の持ち味が充分に発揮された。これらの討論をふまえて、新物質開発に向けて提案された分子設計、固体設計と理論計算に対して、さらに突っ込んだ討論が展開された。ここでも、予想外とも言える質疑応答がなされ、その内容は新たな進展を促すに足る貴重なものであった。この研究会で得られた経験と成果を、この秋に開催される予定の岡崎コンファレンス－固相水素・電子結合系での物性の創造－に生かしたい。

なお、この研究会のプログラムを以下に記しておく。

3月20日(月)

13:00 はじめに

三谷洋興

13:10 グラファイト層間化合物での水素の物理吸着

寺井隆幸(東大工)

13:50 固体中における水素－電子相互作用；水素・アルカリ金属・グラファイト三元系

榎 敏明（東工大理）

14:30 結晶シリコン中の水素不純物の電子状態

佐々木泰造（金属材料技研）

15:10 ホールバーニングにおける諸問題

谷 俊郎（電総研）

15:40 色素・高分子系における電子－格子相互作用

齊官清四郎（阪大理）

16:10－16:30 Coffee Break

16:30 生体膜におけるプロトン輸送－バクテリオロドピシン

神山 勉（理研）

17:10 フラビン酵素の電子移動の機構

三浦 洸（関西医大）

17:40 圧力下での水素結合の挙動

清水宏晏（岐阜大工）

18:10 分子構造論からみた水素結合

中筋一弘（分子研）

3月21日（火）

9:00 有機固体中でのプロトンリレー現象の発現

菅原 正（東大教養）

9:30 水素結合を含む伝導体の分子設計

稲辺 保（分子研）

10:00 NMR による水素結合の研究

武田 定（阪大理）

10:30－10:50 Coffee Break

10:50 化学論的観点での水素結合にからむ問題点

西本吉助（大阪市大理）

11:30 分子内プロトン移動－計算機によるアプローチ

長嶋雲兵（分子研）

12:00 結晶内電子およびプロトン連動現象の可能性

三谷洋興（分子研）

「固体化学と錯体化学の接点」

分子研 磯 邊 清

錯体化合物は研究対象として非常に広い分野の研究者によって取りあげられており、しかも近年では錯体化学と身近に境界を接している有機金属化学は無論のこと、触媒化学、物性化学との交流が見られ、互いの成果を積みあげた形でのすぐれた研究が見うけられるようになってきた。一方、一見錯体化学とより密接な関係があるだろうと考えられる無機固体化学との交流は、日本ではこれまで不思議なほど少なかった。

最近錯体化学の一領域である、錯体クラスター化学の研究に従事するようになり、主としてデスクリートな分子を取り扱う錯体化学と凝集系を取り扱う固体化学とが自分の立場を少しシフトして寄り合えば、おもしろい分野が切り開かれるのではないかと考えていたので、短い準備期間で、しかも年度末にもかかわらず、以下のプログラムに示す研究会（参加者45名、内講演者17名）を急遽組織し、3月28日～3月29日に開催することにした。錯体分野からは比較的、固体化学と接点を見だしやすいM-O、M-S、M-M結合に着目しての構造、結合、反応性についての話題、固体の分野からはそれらの結合の集積によってあらわれてくる物性面、特異な反応場としての固体表面についての話題等を、提供していただいた。多数の講演があったため、スケジュール的に非常にきゅうくつであったが二日間とも活発な議論があり、両方の分野の研究者から固体化学と錯体化学との交流を深めていって欲しいし、また新しい分野が切り開かれる可能性が大いにあるという意見が寄せられ、一応研究会開催の主旨は達成できたのではないかと感じている。

3月28日

13:00 はじめに

磯邊 清（分子研）

座長 佐々木陽一

13:05 混合金属酸化物における金属間相互作用

井本英夫（阪大・基礎工）

13:25 金属酸化物クラスター

佐佐木行美（東大・理）

14:05 気相法による酸化物単結晶薄膜の成長と物性

坂東尚周（京大・化研）

14:45 休 憩

座長 坂東尚周

15:00 オキソ架橋複核および三核錯体-酸化物固体への第一歩-

佐々木陽一 (東北大・理)

15:40 金属アルコキシドを用いた LiNbO_3 配向膜の合成

平野真一 (名大・工)

16:20 ポリ酸イオン格子内の電子移動とエネルギー移動

山瀬利博 (東工大・資源研)

座長 平野真一

17:00 焼結固体における impurity と additive

-窒化アルミニウム, 炭化ケイ素等の非酸化物セラミックスの合成と特性-

上野文雄 (東芝・総研)

17:40 有機金属基をもつ高原子価モリブデンおよびタングステンスルフィドクラスターの合成, 分子構造と性質

小澤芳樹 (分子研)

18:00

18:30 懇親会 (研究棟201号室)

20:00

3月29日

座長 海崎純男

9:00 無機層状化合物を担体とした有機反応

山岸皓彦 (東大・教養)

9:40 モデル錯体における還元的脱離反応- π 酸効果と電解酸化-

中村幸雄 (阪市大・理)

10:00 プラズマ CVD 法による二硫化チタンの合成

吉川信一 (阪大・産研)

10:40 休 憩

座長 大井俊一郎

10:55 タリウム系超伝導酸化物の構造と物性

庄野安彦 (東北大・金研)

11:35 配位子場遷移からみた金属錯体の溶存状態と固体状態

海崎純男（阪大・理）

12:05 昼 食

座長 庄野安彦

13:05 シアン化カドミウム系による鉱物疑似構造の開発

岩本振武（東大・教養）

13:45 水和層状酸化バナジウムの合成と相転移

岡與志男（京大・教養）

14:25 休 憩

座長 岩本振武

14:40 ピリジン-2-チオール の Pt_2^{6+} , Pt^{3+} Pd^{3+} および Pd_2^{6+} 錯体

大井俊一郎（阪市大・理）

15:20 ビスマス系酸化物超伝導体の結晶化について

武居文彦（東大・物性）

課題研究報告

「タンパク質中の電子移動と プロトン移動」

分子研 北 川 禎 三
小 倉 尚 志

生物のエネルギー変換膜においては、電子が一個伝達されるとそれに誘導されてプロトンが膜の片側から反対側に輸送され、電気化学ポテンシャルが形成される。次の段階でそのエネルギーがATP合成に使われ、生体エネルギーがつくられる。電子の代りに光子を用いる光駆動のプロトンポンプは光で生きる生物に見つけられている。本課題研究では、電子駆動、光駆動、ATP駆動のプロトンポンプとしてそれぞれ、チトクロム酸化酵素、バクテリオロドプシン、 H^+ -ATP合成酵素をとり上げ、各分子系の代表的な次の方々と共同研究を進めた；二井将光（阪大産研教授）、前田章夫（京大理助教授）、曾根勇史（自治医大助教授）、折井 豊（京大医助教授）、吉川信也（姫路工大教授）、阿久津秀雄（横浜国大助教授）、大野宏毅（自治医大講師）。オブザーバーとして伊藤 繁（基生研助教授）、三室 守（基生研助手）にも参加していただいた。共同研究のやり方として、年一回全員による時間無制限の報告会を分子研で開催し、結果を全員で討議した。また一部の方々と我々は共同実験を進めた。ここでは分子研での研究を中心に報告する。

チトクロム酸化酵素

グルコースから遊離された電子は電子伝達系を通して O_2 にわたる。その末端にあって O_2 を H_2O にする反応を触媒するのが本酵素で、2個のヘムと2個の銅イオンを含む。チトクロム酸化酵素(CcO)は、 O_2 を H_2O に変える反応と共役してプロトンを膜の内から外に輸送し、輸送するプロトン数と電子数が大体等しいことを曾根が明らかにした¹⁾。吉川はCcOを結晶化させることに初めて成功し、そのX線結晶解析は現在8 Åの分解能である。

小倉、吉川、北川は本酵素活性部位の構造を共鳴ラマン分光法で詳しく調べた。そのためにラマン線を帰属することから始めた^{2,3)}。そして、反応中間体を共鳴ラマン法で検出する方法としてミクストフロー装置をつくり⁴⁾、方法論としての基本は確立した⁵⁾。しかし構造化学的な議論にたえるS/N比の高いスペクトルを得るには、スペクトルの長時間積算が必要であった。それで少量の試料でそれを可能ならしめる“酵素反応追跡用人工心肺装置”を本研究で初めて製作した。それを図1に示す。観測したラマンスペクトルが目指す中間体のものではなく、それが光反

応したものではないかという議論がレーザーを用いる測定にいつもついてまわる。実際、一酸化炭素ヘモグロбинはそのよい例で、レーザービームの外に出るとピコ秒で元の状態に可逆的に戻るので、ラマン散乱測定後の試料の吸収スペクトルが元と同じだからといって観測されたラマンスペクトルが一酸化炭素ヘモグロбинのものとはいえない。この議論を克服するには、レーザービーム中にあってラマン散乱を起こし得る分子のみの吸収スペクトルを測定せねばならないが、普通の方法ではそれは不可能である。本研究では、全く新しいアイディアを導入して、ラマン/吸収同時測定装置を製作した⁷⁾。それを図2に示す。

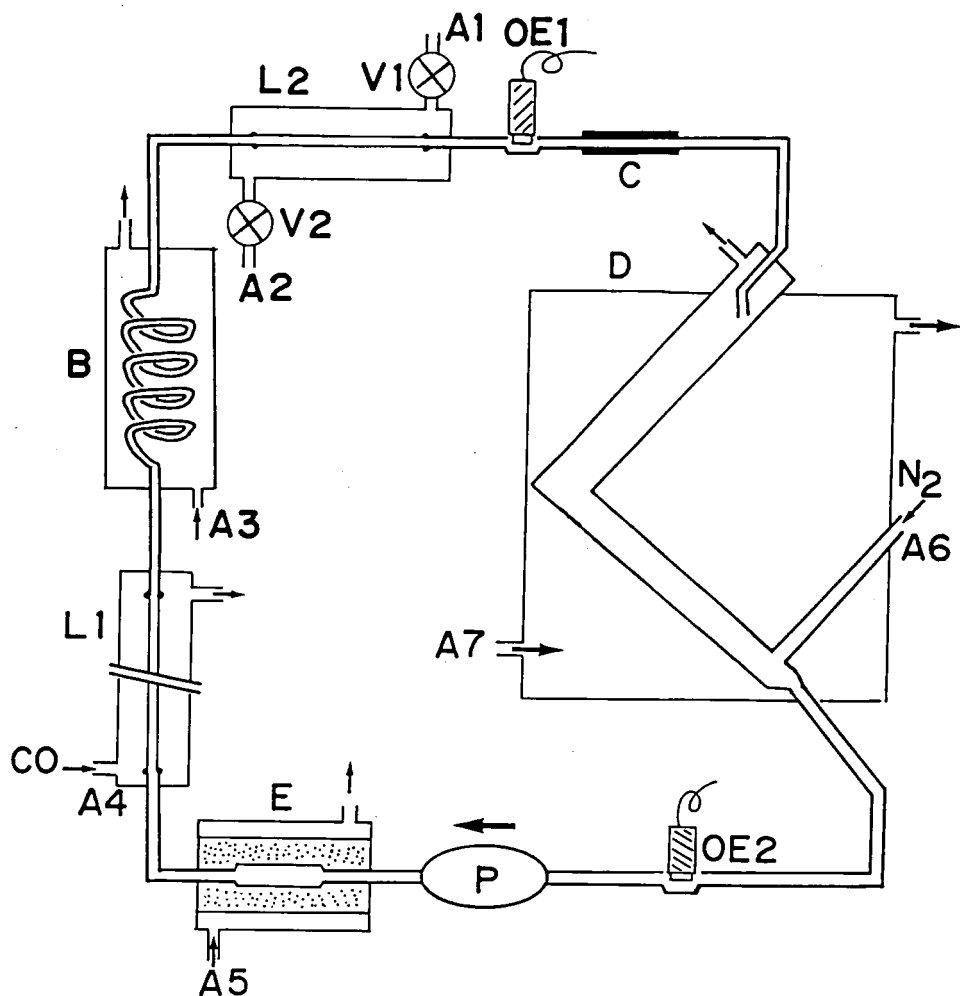


図1 “酵素反応追跡用人工心臓装置” P:心臓(ポンプ), E:腎臓(透析膜=セロファン), L1, L2:肺(シリコンチューブ), B:クーラー, C:フローセル, D:O₂除去装置, OE1, OE2:酸素電極, V1, V2:コック, A3, A5, A7:恒温水入口, A1, A4:O₂(あるいはN₂)とCOガス入口, A2:真空ポンプひき口。(文献6より転写)

Device for Simultaneous Measurements of Raman & Absorption Spectra

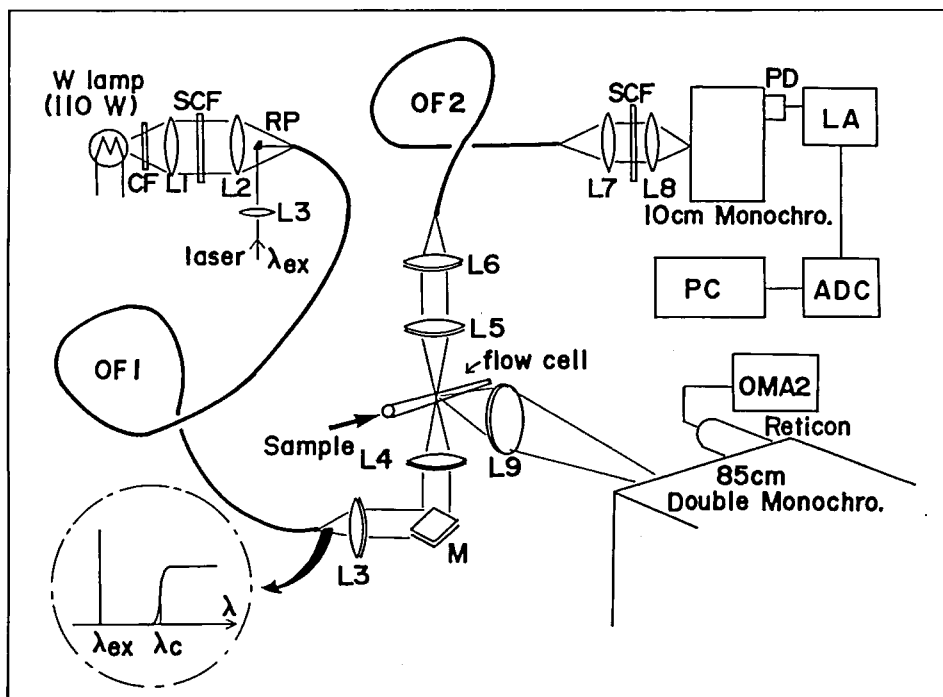


図2 ラマン散乱/吸収スペクトル同時測定装置; CF: 除熱フィルター, L1~L10: レンズ; M: 鏡, SCF: short-cut フィルター; OF1, OF2: 光ファイバー, PD: フォトダイオード, LA: log-ratio 増巾器, ADC: アナログ/ディジタル変換器, PC: パーソナルコンピュータ, 円内は光ファイバー出口での光のスペクトル。(文献7より転写)

これら2つの装置を組合せてCcO反応中間体の共鳴ラマンスペクトル及び吸収スペクトルを追跡した。その結果、反応開始後140 μ s以内では、低温トラップ法で得られている中間体(Compound A)⁸⁾の吸収スペクトルが得られ、それより遅くなるともう1つの中間体(Compound B)⁸⁾のものが得られた。Hillら⁹⁾はCompound Aという中間体が低温でのみ現われ、室温溶液状態では検出できないと報告していたが、本研究により、それが室温でも存在することがはっきりした。¹⁸O₂を用いたときに低波数シフトするラマン線を検出することが次の課題である。折井はストップフロー法とフラッシュフォトリシス法を組合せた時間分解吸収スペクトル測定装置を製作し、5 μ sの時間分解能で本酵素とO₂との反応を追跡した^{10,11)}。その結果は小倉らの結果とはほぼ一致している。

曾根, 小倉, 北川は, 電子伝達機能は有するがプロトン輸送能が失活した CcO をつくり, その共鳴ラマン散乱を測定した¹²⁾。そのものは, O₂ 還元部位のヘムの Fe—ヒスチジン伸縮振動のラマン線強度のみが変化していることがわかった。これは, H⁺ 輸送部とヘムに配位するヒスチジンとの間に構造的連係があることを示唆する。

バクテリオロドプシン

バクテリオロドプシン (BR) はレチナールシッフ塩基を発色団としてもつ膜タンパク質である。光吸収によりレチナールのトランス→シス異性化が起こり, タンパク質の構造変化が誘起される。その構造変化が元に戻る過程でプロトンを膜の内から外に汲み出すというユニークな性質をもつ光駆動プロトンポンプである。いくつか中間体があるなかで, 脱プロトン化したシッフ塩基をもつ M 中間体の生成 (∼0.1ms) に少し遅れてプロトンが膜より放出され, M の崩壊 (数 ms) と共にその反対側からプロトンが吸収されることがわかっている。それで本研究では主に M 中間体について, 時間分解スペクトルを調べた。

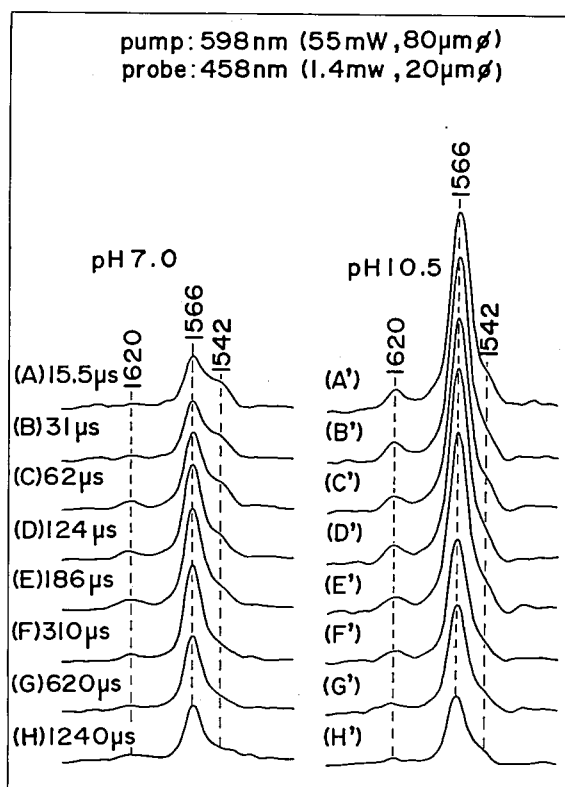


図3 pH 7 (左) 及び pH 10.5 (右) におけるバクテリオロドプシンの共鳴ラマンスペクトル, ポンプ光とプローブ光の間の時間は各スペクトルの左側に示されている。各時刻における実測スペクトルからプローブ光のみのスペクトル (未反応物) を差し引いたものを示してある。(文献13より転写)

中川, 小倉, 前田, 北川はダブルビームフローラマン測定装置を製作し, M中間体の生成・消滅過程を詳しく調べた¹³⁾。pH 7 と pH 10.5 の共鳴ラマンスペクトルを図3に示す。レチナールシッフ塩基のプロトンを受けるタンパクのアミノ酸残基の pK_a は ~ 9 で, それより高い pH での反応中間体の構造を明らかにすることは, H^+ の脱着が鍵となるこの系の研究に重要である。pH 10.5 では pH 7 のときに比べて M 中間体は早く生成し, 減衰については中性でも存在する $\tau_{1/2} = 1.5\text{ms}$ の成分の他に $\tau_{1/2} = 400\ \mu\text{s}$ の成分が本研究で初めて見つかった。また, アルカリ性で存在する長寿命中間体を同定するため, 回転セル中でレーザー光を照射しながら光ファイバーで吸収スペクトルを測定した。その結果, アルカリ性の長寿命中間体と N 中間体の吸収スペクトルは一致することがわかった。ラマンスペクトルより, N 中間体ではレチナールは 13-cis 構造でプロトン化シッフ塩基をもつこと, 及び $\tau_{1/2} = 400\ \mu\text{s}$ の M 中間体は $\tau_{1/2} = 1.5\text{ms}$ の中間体とは違って N 中間体の前駆体ではないことが明らかとなった。

タンパクによるプロトン輸送が H^+ 輸送か H_3O^+ 輸送かを明らかにするため, 小倉と北川は M 中間体の生成・消滅とプロトンの放出・吸収の時間挙動を H_2O , D_2O , $H_2^{18}O$, $D_2^{18}O$ 中で測定した。 D_2O 中では M 中間体の生成・崩壊, プロトンの放出・吸収とも H_2O 中に比べ遅かったが, その速度定数は D_2O と $D_2^{18}O$ とで測定精度内で一致した。また H_2O 中と $H_2^{18}O$ 中とでも一致した。このことは, BR タンパクによるプロトン輸送では H_3O^+ ではなく H^+ が運ばれる過程が律速段階であることを示唆し, タンパク中のチロシン残基やカルボキシル基等が可逆的にプロトンと結合して H^+ を運搬するという考えを支持する。このような性質が, 他のプロトンポンプやプロトンチャンネルにもあてはまるかどうかを調べるのが次の課題である。

以上, 3 年間にわたった課題研究の研究結果を簡単に報告させていただいた。普段は異なる学会で結果を発表する人達が一堂に会して納得できるまで討論する機会を与えて下さり, またこの研究遂行のための装置をつくる援助をしていただいた分子科学研究所に深く感謝する次第である。

- 1) Sone, N. and Hinkle, P. C. (1982) J. Biol. Chem. **257**, 12600–12604.
- 2) Ogura, T., Hon-nami, K., Ohshima, T., Yoshikawa, S. and Kitagawa, T. (1983) J. Am. Chem. Soc. **105**, 7781–7783.
- 3) Ogura, T., Yoshikawa, S., and Kitagawa, T. (1985) Biochemistry **24**, 7746–7752.
- 4) Ogura, T., Yoshikawa, S., and Kitagawa, T. (1985) Biochim. Biophys. Acta **832**, 220–223.
- 5) Babcock, G. T., Jean, J. M., Johnston, L. N., Palmer, G. and Woodruff, W. H. (1984) J. Am. Chem. Soc. **106**, 8305–8306.
- 6) Ogura, T., Yoshikawa, S., and Kitagawa, T. Biochemistry, in press.
- 7) Ogura, T. and Kitagawa, T. (1988) Rev. Sci. Instrum. **59**, 1316–1320.

- 8) Chance, B., Saronio, C. and Leigh, J. S. Jr. (1975) J. Biol. Chem. **250**, 9226–9237.
- 9) Hill, B. C., Greenwood, C. and Nicholls, P. (1986) Biochim. Biophys. Acta **853**, 91–113.
- 10) Orii, Y. (1988) Chemica Scripta, **28A**, 63–69.
- 11) Orii, Y. (1988) Ann. N. Y. Acad. Sci. **550**, 105–117.
- 12) Sone, N., Ogura, T. and Kitagawa, T. (1986) Biochim. Biophys. Acta **850**, 139–145.
- 13) Nakagawa, M., Ogura, T. Maeda, A. and Kitagawa, T. (1989) Biochemistry **28**, 1347–1352.

「孤立分子集合体の 光励起緩和過程研究の新展開」

京工繊大繊維 平 山 鋭

I. はじめに

分子ビーム法が物理化学の研究にもたらしたインパクトの大きさ、特に分子分光学や化学反応論に果たしつつある役割には、目覚ましいものがある。これらは主に気相における化学反応を基礎としたもので、小さな分子を対象としているが、超音速ジェット法の導入で、対象となる分子は一挙に広がりを見せている。この潮流は我々のこれまでの概念を一新し、分子科学の根幹に深くかわるものになるであろうと強く感じている。このような認識の下に、本課題研究では、これまで凝縮相での研究が主であった比較的大きな有機分子にスポットをあてて、超音速ジェット法の特徴を十二分に生かした状態選択的な研究を行ない、究極的には単一振電準位 (SVL) レベルで凝縮系の動的現象を解明することを目標にした。具体的には、孤立分子の分子構造、エネルギー緩和過程、分子内光化学反応を、分子集合体では、一般的な分子間相互作用（スペクトルシフトや寿命変化）と（光化学反応を含む）特異的分子間相互作用を取り上げることにした。

II. 実施経過

これらの研究課題は、高分解能蛍光分散スペクトルの測定、ピコ秒緩和速度の高精度測定、多光子イオン化 (MPI) 法や吸収スペクトルの測定など、多岐にわたる測定法を駆使して初めて成果を挙げられるものである。当初はこれらの測定法を総て採り入れた移動式超音速ジェット発生室を製作し、本課題研究のメンバー各員が各自の研究法以外の手法を必要に応じて容易に使

用できるようにする計画であったが、共同研究委員会の決定により、本課題研究の研究期間が1年と限定されたことや校費・旅費等を勘案した結果、(i) 本課題研究が研究として最も効果的に実施できること、(ii) 当面分子科学研究所でしか実施できない研究法を最優先させること、の2点を基本にして計画の遂行に臨むことにした。従って、研究代表者が最も得意とし且つ孤立分子集合体の研究分野では研究法が一番遅れていて、新しい知見の蓄積が待たれている時間分解蛍光法を主に用いることにした。また、実際上の研究実施グループは平山 鋭(京都工芸繊維大学・繊維学部)、田中富士雄(大阪府立大学・総合科学部)、正嶋宏祐(分子科学研究所)の三名であった。実施した主な項目は次の通りである。

1. 移動式超音速ジェット発生主室の製作。
2. 上記主室を用いたレーザー誘起蛍光(LIF)スペクトルの測定及びナノ秒蛍光寿命の測定。
3. MPI法導入の検討。
4. シンクロナスモード同期ピコ秒レーザーによるSVLのピコ秒蛍光寿命測定法導入の検討。
5. オプティカルオッシロなどによる新しい蛍光寿命測定法の検討。

日程上、分子科学研究所での研究は可成り制約を受けるので、所外(平山研究室)でも上記以外の測定法の開発を試みた。

6. 吸収スペクトル測定法の開発。

(蛍光を出さないか出しても非常に弱い化合物(e. g., 9-t-Butylanthracene)の研究に必要で、超高速緩和現象や光化学反応のSVL依存性の解明に役立つ方法である。目下完成に向けて努力中である。)

Ⅲ. 成 果

対象とする化合物をアントラセンに限り、個々の誘導体で見られる特徴的な現象を取り上げると同時に、結果から一般則を見出そうとする帰納的方法をとった。研究した化合物は既に12種類以上にのぼるが¹⁻¹⁵⁾、それぞれ特徴ある新規な現象が見出された。明らかになった事実を列挙すると、次のようである。

1. SVLの蛍光寿命(τ_F)の過剰エネルギー依存性と分子内振動緩和(IVR)¹⁻³⁾。

ナフタレン誘導体の場合とは異なり、アントラセン誘導体では τ_F の過剰エネルギー依存性は化合物ごとに異なる。特に9, 10-ジシアノアントラセンでは、過剰エネルギー3000 cm^{-1} までほとんど τ_F が変化しないという注目に値する現象が見出された¹⁾。

2. τ_F に及ぼす外部重原子効果と系間交差(ISC)。特に0-0帯の緩和過程^{4-8, 11)}。

0-0帯からISCが起こるかどうかは、KrやXeとのクラスターの τ_F が短くなるかどうかで判定できる。例えば9-メチルアントラセン、9-クロロアントラセンでは顕著な重

原子効果が見られるので、これらの化合物では、ISC が 0-0 帯からでも他の過程と競合して起こると結論される。

3. 電子受容-供与体 (D-A) 系のファンデルワールス (vdW) 錯合体とエキシプレックスの形成⁹⁾。vdW 錯合体からエキシプレックスへの直接励起を観測。

4. 振電準位に依存する外部重原子効果と ISC^{4,11,12)}。

アントラセンぐらい大きな分子でも、SVL からの ISC には、スピン-軌道相互作用の他にエネルギー準位のマッチングが極めて重要であることが明かになった。

5. 希ガス vdW 錯合体の光解離とエネルギー再分配による非指数関数的蛍光減衰¹⁰⁾。

解離に使われなかった余剰エネルギーの分配の仕方によって、親分子の蛍光緩和過程は非指数関数的になる。個々の寿命と成分の相対比とからエネルギー分配の在り方を推測できる。

6. 異性体とその緩和過程^{3,13)}。

凝縮相では見れないことであるが、アントラセンの二量体に幾何学的異性体が考えられる場合には、超音速ジェット中では各異性体を分光学的に同定でき、分子構造に依存する緩和過程が見出された。

7. 不完全冷却状態の τ_F と緩和過程^{2,3,10)}。

気相や凝縮相への橋渡しとして、Dark Level が熱的に占有されている不完全冷却状態を調べることができる。分光学的には複雑過ぎる系であるが、動力学的研究には非常に興味深い状態である。

8. 自然輻射寿命と屈折率の関係¹⁴⁾。

分子のおかれた微視的環境によって、輻射寿命がどのように変わるかは、実験的にも理論的にもまだ確定していない。特に、クラスター分子の輻射寿命がクラスターサイズとどのような関係にあるかは、今後解決されるべき重要な課題である。

9. 無蛍光性化合物の振電準位依存緩和過程¹⁵⁾。

無蛍光性化合物には超高速無輻射過程があるわけだが、0-0 帯を含むすべての SVL にこれらの過程が見られるかどうか、また、これらの過程が分子内光反応と関連づけられるかどうかは、大変関心のあるところで、現在 9-t-butylanthracene の分子内光反応と SVL 緩和の関係を詳しく調べているところである。

以上、一つ一つ興味有る現象で、いずれも蛍光寿命の測定なしには得られなかった成果である。孤立分子集合体の研究に蛍光寿命測定法が欠かすことのできないものであることが理解されよう。

IV. おわりに

以上、研究実施グループの得た成果を中心にして報告をまとめたが、先にも述べたように、本課題研究の実施目標を、共同利用できるチャンバーの製作においたので、本課題研究に参加いただいた方々全員に何らかの形で研究費を利用いただくことはできなかったが、幸いチャンバーも完成し、LIF, τ_F の測定なら容易に行えるようになった。今後は関心のある方々にできるだけ広く利用していただければ幸いである。最後に、MPI 法について種々のご教示下さいました木村克美教授はじめ、そのグループの奥山博士、高橋氏にこの場をかりて深謝いたします。

参考文献

- 1) Excess-energy-insensitive fluorescence decay of jet-cooled 9, 10-dicyanoanthracene, Chem. Phys. Lett., 140 (1987) 447.
- 2) A comparative study of the fluorescence lifetimes of 9-cyanoanthracene in a bulb and supersonic free jets, J. Chem. Phys., 85 (1986) 6867.
- 3) Electronic relaxation in isomers of 9, 10-dimethoxyanthracene and their rare-gas complexes, J. Phys. Chem., in press.
- 4) Vibronic-level-specific heavy-atom effect on the fluorescence decay of the rare gas complexes of 9-methoxyanthracene, Chem. Phys. Lett., **153**, (1988) 112.
- 5) Fluorescence decays of 9, 10-dichloroanthracene and its van der Waals complexes with rare gas atoms in supersonic free jets, Chem. Phys., 131 (1989) 435.
- 6) Fluorescence lifetimes of 9-methylanthracene in supersonic free jets. A level inversion between S_1 and T_2 states upon the phase change from solution to gas, Bull. Chem. Soc. Jpn., 59 (1986) 2011.
- 7) Lack of a heavy atom effect on fluorescence lifetime of 9-cyanoanthracene rare gas clusters in a supersonic free jets, Chem. Phys. Lett., 121 (1985) 228.
- 8) Microscopic solvent effect on the S_1-T_2 intersystem crossing of 9, 10-diphenylanthracene in supersonic free jets, to be published.
- 9) Fluorescence decays in van der Waals complexes of 9-cyanoanthracene studied in supersonic free jets, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2, 84 (1988) 1927.
- 10) 9-メトキシアントラセンの希ガスクラスターの形成と光解離のダイナミックス, 日本化学会誌 1989, 特集号 (1989) 1217.
- 11) 光化学討論会 東京 1988.
9-クロロアントラセンの孤立状態及びファンデルワールス錯体の系間交差.

12) 分子構造総合討論会 東京 1988.

9-メトキシアントラセン希ガスクラスターに見る振電準位依存重原子効果.

13) 光化学討論会 東京 1988.

9, 10-ジメトキシアントラセンの異性体と希ガスクラスターの励起緩和過程.

14) 日本化学会 春季年会 京都 1989.

アントラセン誘導体の自然輻射寿命と屈折率との関係.

15) 化学反応討論会 大阪 1989.

SVL 励起緩和過程と分子内光反応.

分子研コロキウム

- 第435回 平成元年 3 月15日 BINAP-ルテニウム錯体を用いる不斉水素化反応 (太田哲男)
- 第436回 3 月22日 燃焼中間体としての OH ラジカルの発光に対する磁場効果
(阿部晴雄)
- 第437回 4 月 5 日 Photochemical Investigations of Opaque Materials Using Diffuse Reflectance
Laser Flash Photolysis. (F. Wilkinson)
- 第438回 4 月12日 ハロゲン架橋一次元金属錯体の構造と物性 (鳥海幸四郎)
- 第439回 4 月19日 NMR タイムスケールで眺めた固体中の分子・イオンの挙動
(池田龍一)
- 第440回 4 月26日 溶液中の化学反応と水の動力学 (大峰 巖)
- 第441回 5 月10日 半導体光化学—分子研での研究と今後の抱負 (坂田忠良)
- 第442回 5 月17日 Resonance Structure in the Vacuum Ultraviolet Spectra of the Interhalogens
ICl and IBr, and Some Other Unsolved Problems. (Robert J. Donovan)
- 第443回 5 月31日 表面吸着分子の光励起ダイナミックス (吉原経太郎)
- 第444回 6 月 7 日 短寿命分子の大振幅運動 (廣田榮治)
- 第445回 6 月14日 励起状態のレーザー光電子分光—最近の状況 (木村克美)
- 第446回 6 月21日 Photoelectron-photoelectron Spectroscopy and the spectra of doubly charged
Ions. (John H. D. Eland)
- 第447回 6 月28日 強い電子—格子相互作用系における固体物性—水素結合の活用—
(三谷洋興)
- 第448回 7 月 5 日 シンクロトロン放射を用いた分子イオンの解離過程の研究
(小谷野猪之助)
- 第449回 7 月12日 UPS : An Interplay between Experiment and Theory.
(Ellak. I. von Nagy-Felsobuki)
- 第450回 7 月19日 シンクロトロン放射光励起による表面反応 (正畠宏祐)
- 第451回 7 月26日 顕微反射分光法による導電性有機結晶の電子構造の研究 (鶴川彰人)

共同研究採択一覧

平成元年度（前期）共同研究

課 題 研 究

新分光法の開発による化学反応素過程の研究

○東大教養 土屋莊次 分子研 廣田榮治 東大工 幸田清一郎 東大教養 梶本興亜
分子研 遠藤泰樹 分子研 中村宏樹 東大教養 山内 薫 東大教養 大島康裕

協 力 研 究

分子振動の旋光強度の理論計算	阪大蛋白研	菅田 宏
遷移金属化合物の構造，電子状態・触媒作用に関する分子軌道研究	熊本大工	榊 茂好
ルテニウム錯体触媒によるメタノール液相脱水素反応 ab Initio 法による研究	東大工	板垣 弘昭
有機溶媒分子の動力学についての理論的研究	東大教養	加藤 重樹
凝縮相における μ 中間子の運動状態の理論	東大理	北原 和夫
衝突によるエネルギー移動と M_j 依存性	神戸大理	加藤 肇
金属酸化物の CASSCF CI 計算	阪大基礎工	山口 兆
多電子励起状態の分子モデルによる数値計算	電通大	渡辺 信一
線型三原子分子モデルを用いた電子的二重励起状態にある原子の衝突ダイナミックス	電通大	小山 直人
マイクロ波および赤外レーザー分光による B-P 結合を持つ分子の検出	神奈川工大	川嶋 良章
重水素化エチニルラジカルの赤外半導体レーザー分光	東大教養	金森 英人
フリーラジカルの電子励起状態の研究	長岡技科大	伊藤 治彦
DNA のホールバーニング分光	阪大理学研究科	安 正宣
蛋白質のホールバーニング分光	阪大理	栗田 厚
チトクローム P-450d 及びその変異体の共鳴ラマンスペクトル	東北大非水研	清水 透

共鳴ラマンスペクトルによる酸化酵素モデル化合物の構造化学的研究	京大理	成田 吉徳
クロカピカタラーゼの共鳴ラマンスペクトル	北里大医	菊池 京子
共鳴ラマンスペクトルによるヘモグロビンMのリガンド結合部位の解析	金沢大医療技術短大	長井 雅子
自己拡散測定による純液体中直鎖アルカン分子の運動の研究	都立大理	加藤 直
高分子鎖に包含される酸化鉄クラスターの構造解析	豊橋技科大	上野 晃史
EXAFS による無機蛍光体の局所構造とその発光特性	都城工業高専	森茂 龍一
超音速ビームを用いた光異性化反応の動的挙動の研究	金沢大薬	藤原 好恒
各種半導体及び金属電極上における α -オキシ酸の酸化反応機構	明星大理工	原田 久志
異種有機顔料接合界面における光誘起電荷移動に関する研究	阪大工	横山 正明
リフレクトロン TOF 質量分析及びレーザー多光子イオン化を用いた分子クラスターの電子状態の研究	三重大工	篠原 久典
レーザーアブレーションによる低分子分解物の生成機構について	京都工繊大繊維	福村 裕史
ピラジン・四塩化炭素クラスター系における多光子イオン化過程	九大理	島田 良一
ベンゼンの共鳴二光子イオン化	東工大理	市村禎二郎
有機強磁性高分子 COPNA 樹脂の磁性発現機構	阪市大理	工位 武治
化学反応の磁場による制御	金沢大薬	谷本 能文
三重項ピラジカルの項間交差に対する磁場効果	筑波大	桜木 宏親
電解重合に及ぼす磁場の影響	都立大工	伊藤 栄子
チトクロム類の導電性の研究	都城工業高専	中原 祐典
点接触分光装置の開発およびそれを用いた有機導体の研究	東大理	田島 裕之
振動状態を規定したイオン-分子反応の研究	東大教養	本間 健二
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
アントラセン類 vdW コンプレックスの光解離ダイナミックスの研究	京都工繊大繊維	平山 鋭

9, 10-ジメチルアントラセンの孤立状態および希ガス錯体の系間交差	大阪府大総合科学	田中富士雄
黒鉛-臭素系の圧力誘起相転移	熊本大理	松崎 晋
酸化物超伝導体薄膜の作製と物性	室蘭工大	城谷 一民
超伝導性黒鉛層間化合物の電子構造	熊本大理	佐野 瑞香
グラファイト層間化合物の NMR	日大文理	宮島 清一
遷移金属フタロシアニン及び有機電荷移動錯体の物性研究	東工大理	鈴木 和也
新無機導体における物性と超伝導	金沢大教養	藤下 豪司
有機分子性結晶の結晶構造の予測手法の開発	東大工	平野 恒夫
有機金属と金属酸化物および硫化物によるクラスターの合成と性質	鳴門教大	馬越 啓介
歪んだ八面体骨格を持つモリブデン六核クラスター錯体の合成と構造	岐阜大工	海老原昌弘
ルテニウムモノピリジン錯体の発光と溶媒再配向過程の研究	京大理	広田 襄
電荷移動錯体及びイオンラジカル塩の結晶中における分子間相互作用の研究	東北大理	宮仕 勉
機能性大環状ポリアミンの合成と生体関連機能の開発	広島大医	小池 透
大環状ポリアミンルテニウム錯体の合成と電子移動反応のプロープとしての特性に関する研究	広島大医	高橋 利和
ピオローゲン結合型金属ボルフィリンの合成と分子内電子移動過程の研究	東工大工	大倉 一郎
非環状ホスト化合物の分子識別能に関する研究	工業技術院製品科学研	平谷 和久
A2 MX4 (A=alkylammonium, M=Zn, Cd, Hg, X=Cl, Br, I) 型錯塩の構造と物性	岡山大教養	石田 祐之
強誘電性発現とテトラメチルアンモニウムイオンの運動の係わりについて	岐阜大教育	佐藤 節子
ハロゲン架橋型一次元鎖状混合原子価錯体の核四極共鳴	琉球大教養	堀内 敬三
ピリジニウム塩における秩序・無秩序相転移と陽イオンのダイナミックス	名大理	浅地 哲夫
ランタニドイオンのハロゲン錯体の溶液内安定度と構造	東工大総合理工学研究科	石黒 慎一
水溶液中におけるピロリン酸錯体の構造解析	筑波大	小堤 和彦

脂溶性大環状ポリアミンを用いた電位応答型化学センサーの基本特性	北大理	小田嶋和徳
大環状ポリアミンを感応物質とした液膜型イオンセンサーのジカルボン酸イオン直鎖状同属体，位置および幾何異性体識別に関する研究	北大理	片岡 正光
修飾ポルフィリン化合物－DNA 間相互作用の物理化学的手法による解析	東大理学系研究科	高橋英太郎
アクリジン誘導体と DNA の相互作用の分子レベルでの解析	東大理学系研究科	濱口 美保

招へい協力研究

新しい分子積分評価法	京大理	小原 繁
------------	-----	------

研 究 会

若手分子科学研究者のための理論化学研究会	東大教養	梶本 興亜
固体内の分子状励起状態の緩和機構	甲南大理	松井 敦男
非線形非平衡条件下における分子過程	名大教養	吉川 研一
金属錯体分子集合体の合成と物性	室蘭工大	城谷 一民

UVSOR 課題研究採択一覧

SOR 光電子分光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 東大教養 佐藤直樹
埼玉大理 中原弘雄

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 分子研 岡本 博 都立大 阿知波洋次 東大理 十倉好紀
東大理 腰原伸也 東大工 国府田隆夫 東大工 岩佐義弘 東大工 石川 謙

UVSOR 協力研究

Ne ⁺ －OCS 衝突におけるイオン分子反応断面積測定	都立大理	奥野 和彦
ファンデルワールス錯合体のしきい光イオン化による電子移行反応	東大教養	見附孝一郎

しきい電子・光イオン同時計数法による分子の電離状態の研究	上智大理工	高柳 俊暢
分子-希ガス混合ファンデルワールス分子の超励起状態と光イオン化過程	東工大理	旗野 嘉彦
原子・分子クラスターのしきい電子分光	学習院大理	平山 孝人
超音速分子線中の分子の光解離過程	新潟大理	徳江 郁雄
基礎的分子の高励起状態に関する研究	京大化学研	伊吹 紀男
偏光分光による多原子分子の回転前期解離の研究	東大理	永田 敬
酸化物高温超伝導体の光電子分光	東北大理	高橋 隆

UVSOR 招へい協力研究

電子ストレージリングの挿入型光源のビームに対する影響	広島大理	春日 俊夫
高調波キャビティによるビーム不安定性の制御	東大物性研	宮原 義一

UVSOR 施設利用・施設利用採択一覧

昭和63年度（後期）UVSOR 施設利用

希ガスエキシマレーザーミラーの特性評価	阪府大工	黒澤 宏
有機液体中のエネルギー失活機構	阪大基礎工	岡田 正
光 CVDSiO ₂ 膜の真空紫外光反射スペクトルの測定	阪大基礎工	奥山 雅則
アルカリハライドにおける一重項緩和励起子の発光寿命 の測定	京大理	神野 賢一
シリカガラスの真空紫外吸収に関する研究	東工大工	川副 博司
炭化及び窒化ホウ素における B-K 吸収スペクトル	広島大工	那須 弘行
ガラスホッパー型斜入射分光器の整備	分子研	平谷 篤也
アルカリハライド結晶における短寿命発光	福井大工	中川 英之
極端紫外光照射によるイオン結晶の発光と着色	和歌山大教育	宮永 健史
SOR 光照射によるシリコン結晶エッチング反応機構の 解明	分子研	正島 宏祐
BL3A2 気体イオン化装置の整備と性能改善	分子研	小谷野猪之助
簡単な分子の解離性光電離過程	大阪市大原子力基礎研	増岡 俊夫
有機金属分子の内殻準位からの光イオン化によって起こ る解離過程の研究	分子研	長岡 伸一
三原子分子二価イオンの生成と解離過程の研究	分子研	今村 隆史
遠赤外光音響法の開発	広島大医	升島 努
超イオン導電体結晶の遠赤外分光研究	東北学院大工	淡野 照義
Bi- 及び Tl- 系酸化物超伝導体の遠赤外分光	東北大理	池沢 幹彦
遠赤外分光法による高濃度近藤状態の研究	東北大理	鈴木 孝
金属超微粒子の遠赤外光吸収	日大文理	望月 章介
高圧力下における液体の遠赤外スペクトルと分子動力学	北大理	井川 駿一
電導性ポリマーと高温超伝導体の遠赤外スペクトル	名大理	田仲 二郎
共同利用固体光電子分光装置の整備 (VI)	分子研	福井 一俊
グラファイト、金及び多層膜の X 線光学特性	阪大理	山下 広順
非晶質 IV 族 Te 化合物半導体の内殻吸収 (IV)	分子研	福井 一俊

金属 Mg 及び Al の K-edge 構造	金沢大教養 (分子研)	直江 俊一
Al 合金の Al K 吸収端スペクトルの研究	名大教養	森 昌弘
Si-K 吸収端スペクトルによる無定形ケイ素化合物の 伝導帯裾構造の評価	広島大工	井村 健
CdI ₂ , PbI ₂ 薄片単結晶の軟 X 線吸収	分子研	渡辺 誠
X 線リソグラフィー用レジストの開発	名大工	森田 慎三
NaNO ₂ , NaNO ₃ の NaK- 光電子収量スペクトル	京都教育大	村田 隆紀
光電導性有機結晶の蛍光特性	学習院大理	小谷 正博
カドミウムハライドの光学スペクトル	海上保安大学校	藤田 正実
極低温清浄表面試料の SOR 分光	阪市大工	西村 仁
NaI (Tl), CsI (Tl) 結晶における発光機構	立教大理	窪田 信三
超臨界流体中の不純物の光イオン化過程	東大教養	西川 勝
X 線顕微鏡開発のための UVSOR の基礎的測定	農業生物資源研	佐野 洋
時分割蛍光法による筋収縮機構の研究	名大理	谷口美恵子
UVSOR 光による薄膜形成	豊橋技科大	吉田 明
アルカリハライド中の O ₂ ⁻ 分子の励起状態の緩和機構	京大理	加藤 利三
SOR 光反応を利用した薄膜形成及び微細加工	名大工	服部 秀三
集光, 拡大用ゾーンプレート 2 枚を用いた軟 X 線顕微鏡 の開発	自治医科大看護短大	木原 裕
UVSOR 光を用いたフッ素ラジカルとシリコン表面との 反応	新潟大自然科学研究科	久米 博
ジシランの真空紫外光による光解離と Si, SiO ₂ 膜の光 CVD	阪大基礎工	浜川 圭弘
内殻励起による気体分子のフラグメントからの発光(Ⅱ)	阪市大工	石黒 英治
硅素系高分子の Si-L _{2,3} 吸収	分子研	渡辺 誠
X 線イメージングプレートの軟 X 線分光感度特性	岐阜大工	阪上 幸男
吸着有機分子の X 線分光	分子研	宇田川康夫
CBN 結晶の発光スペクトルの測定	無機材研	和田 芳樹

昭和63年度（後期）施設利用（Ⅰ）

有機結晶におけるポーラロン，バイポーラロンの緩和と 自己束縛	甲南大理	松井 敦男
機能性分子集合体に関する研究	名大教養	吉川 研一
光電導現象の初期過程	学習院大理	小谷 正博
有機固体中のエネルギー移動過程	学習院大理	加藤 隆二
遷移金属クラスター錯体の分子構造の解析	岐阜大工	川村 尚
半導体超微粒子の光応答	日大文理	望月 章介
光電子分光法による $RE_x MS_2$ ($RE=Ce, Yb$; $M=Nb, Ta$) の原子価状態の研究	京大理	小島 憲道
金属微粒子の電子構造	三重大教育	佐光三四郎
化合物半導体の界面構造に関する研究	豊橋技科大	吉田 明
種々の方法で調整した触媒・材料のキャラクタリゼイシ ョン	豊橋技科大	角田 範義
炭素繊維の表面解析に関する研究	金沢工大	小川 俊夫
$NaNO_2$ における共鳴二次光学過程	京大理	加藤 利三
ピコ秒レーザー蛍光分光法による LB 膜中の励起二量体 の研究	北大工	山崎 巖
有機ラジカルのマイクロ波分光	京大理	百瀬 孝昌
タコニス振動系における特異点スペクトルの実験的研究	愛知教育大	矢崎 太一
共役二重結合の長さに関する研究	東大教養	小川桂一郎
低温における結晶構造の解明	化学技術研	本田 一匡
金属錯体の X 線構造解析	東北大理	金 松春
NMR による界面活性剤水溶液の研究	名大理	今柴東洋子
カルコゲン，ホスフィンが配位した金属錯体の構造と性質	名大理	喜多 雅一
光増感－電子酸化剤による炭素－炭素結合開裂	名大工	高木 克彦
光励起アルカリ金属原子および分子のダイナミクスの研究	神戸大理	馬場 正昭
特異的金属－金属結合を有する金属クラスター合成と構造	近畿大理工	北川 進
Pyrene/a-SiO ₂ 複合物質の吸収スペクトルとけい光ス ペクトルの測定	愛知工業大	高橋 欣弘

Mo ₃ MS ₄ (M=金属) 骨格をもつ錯体の帯磁率測定	岡山理科大	柴原 隆志
遷移金属およびその化合物の微粒子の磁性	名大教養	松尾 進
複核および三核錯体の磁化率	東北大理	山口 正
水溶液中における Al ³⁺ イオンの重合過程	静岡大工	久保 靖
界面活性分子の水溶液中における動的挙動	名工大	岡林 博文
ポリ (N-ビニルカルバゾール) の光物理過程の動的解析	京工繊大繊維	板谷 明
磁性液晶分子の設計	東大教養	泉岡 明
X線真空リソグラフィ	名大工	服部 秀三
陽イオン性-陰イオン性界面活性剤混合系におけるミセル組成	都立大理	加藤 直
ヘテロおよびイソポリ酸塩の結晶構造	東大理	市田 光
(1) アルカリ・ハライドの自己束縛励起子の減衰時間の測定	阪市大工	西村 仁
(2) 半導体超格子の自由励起子発光の時間分解スペクトルの測定		
(3) 半導体超格子における電子サブバンド間の光吸収の測定		
中圧水素と銅錯体の反応	徳島大工	神田 精一
超微粒子の比熱測定	鈴鹿工業高専	大矢 弘男
有機導電性材料の構造と物性に関する研究	京大工	田中 一義
立体的に混雑したカルベンが発生と反応	三重大工	村田 滋

施設利用 (Ⅱ) 電子計算機センターについて

昭和63年度は154件採択。(電子計算機センター・センターレポート参照)

国際交流

海外からの招へい研究者

(元. 2. 1～元. 6.30)

1. 外国人客員研究部門

J. H. D. Eland	(イギリス オックスフォード大学上級研究員)	元. 1.12—元. 8.30
V. Fidler	(チェコスロバキア チャールズ大学理学部助教授)	元. 1. 9—元. 8. 5
E. I. von Nagi-Felsobuki	(オーストラリア ニューカッスル大学化学教室講師)	元. 1.11—元. 8.25
R. J. Fleming	(オーストラリア モナッシュ大学物理学科教授)	元. 2. 1—元. 6. 4

2. 文部省招へい外国人研究員

P. L. Houston	(アメリカ コーネル大学化学教室教授)	元. 2. 1—元. 4.30
Kong, Young Shik	(韓国 全北国立大学講師)	64. 1. 4—元. 3. 3
Lee, Bu Yong	(韓国 慶尚大学教授)	63.12.20—元. 2.20
Sun, Hosung	(韓国 釜山国立大学化学科助教授)	63.12. 1—元. 2.28
R. J. Donovan	(イギリス エジンバラ大学化学教室教授)	元. 3. 5—元. 5.31
A. Vazquez de Miguel	(スペイン アルカラ・デ・ナレス大学教授)	元. 6.16—元. 9.15
Koh, Kwang Oh	(韓国 スンチュンヤン大学講師)	元. 6.26—元. 8.12
Lee, Jihwa	(韓国 ソウル国立大学助教授)	元. 6.26—元. 8.12

3. 日本学術振興会招へい外国人研究者 (* 二国間交流) (**外国人特別研究員)

A. J. Dann *	(イギリス ノッティングダム大学研究員)	62. 5.14—元. 5.13
D. N. Luneau *	(フランス ツールズ大学研究生)	63. 1.19—元.12.31
M. R. Fahy *	(イギリス ノッティングダム大学研究員)	63. 7. 4—元. 7. 3
S. N. Rai	(インド ノース・イースタン・ヒル大学)	元. 1.11—元.11.10
R. B. Pansu *	(フランス CNRS 放射線物理化学研究所研究員)	63. 7. 1—元. 8.31
S. Mathieu **	(フランス ボール・サバティア大学研究員)	元. 3.28—2. 2.27
T. Yonetani	(アメリカ ペンシルバニア大学教授)	元. 3.28—元. 5. 8
E.-c. Looi	(シンガポール 国立シンガポール大学理学部専任講師)	元. 4.13—元. 4.15

4. 岡崎コンファレンス

B. F. G. Johnson	(イギリス ケンブリッジ大学教授)	元. 5.23—元. 5.25
A. Simon	(西ドイツ マックスプランク研究所)	元. 5.23—元. 5.25
R. D. Adams	(アメリカ サウスカロライナ大学教授)	元. 5.23—元. 5.25
J. K. Burdett	(アメリカ シカゴ大学教授)	元. 5.23—元. 5.25
B. T. Heaton	(イギリス リバプール大学教授)	元. 5.23—元. 5.25

5. 日英(5+5)ミーティング

J. Pfab	(イギリス ヘリオットワット大学教授)	元. 3.12—元. 3.25
I. Powis	(イギリス ノッティンガム大学助教授)	元. 3.15—元. 3.18
D. Phillips	(イギリス 王立研究所教授)	元. 3.15—元. 3.18
R. J. Donovan	(イギリス エディンバラ大学教授)	元. 3.15—元. 3.18
A. J. Stace	(イギリス サセックス大学助教授)	元. 3.15—元. 3.18

6. 招へい協力研究員

J. M. Williams	(アメリカ アルゴンヌ国立研究所上級研究員)	元. 2.18—元. 2.24
R. D. Levine	(イスラエル ヘブライ大学教授)	元. 3. 3—元. 3.11
R. W. Field	(アメリカ マサチューセッツ工科大学教授)	元. 3. 4—元. 3.10
白根 元	(アメリカ ブルックヘブン国立研究所上級研究員)	元. 5.26
J. H. Penn	(アメリカウエストバージニア大学助教授)	元. 5.27—元. 5.29
W. C. Stwalley	(アメリカ アイオワ大学教授・レーザー科学工学センター長)	元. 6.11—元. 6.13
R. M. Metzger	(アメリカ アラバマ大学化学科分子素子教室教授)	元. 5.29—元. 5.30
J. H. Futrell	(アメリカ デラウェア大学教授 化学/生物化学科主任)	元. 6.20—元. 6.21

7. 特別協力研究員

A. E. Dorigo	(アメリカ カリフォルニア大学ロスアンゼルス校助手)	63. 2. 1—2. 1.31
K. Kemnitz	(西ドイツ レーゲンスブルク大学博士研究員)	63. 9. 1—元. 2.28
李 永舫	(中国中国科学院化学研究所博士研究員)	63.10. 1—元. 9.30
I. Gautier-Luneau	(フランス 名古屋大学大学院研究生)	63.10. 1—元. 3.31
謝 環	(中国 復旦大学化学科講師)	63.12. 4—元. 4.18
E. Anni	(ギリシャ EC委員会若手研究者プログラム研修生)	元. 2. 5—2. 2. 4
S. C. Park	(韓国 カンウォン国立大学助教授)	元. 2.13—元. 2.26

F. M. Cuni	(スペイン バルセロナ大学助手)	元. 4. 1—元. 7. 31
P. K. Srivastava	(インド バナナスヒンドゥ大学博士研究員)	元. 4. 1—2. 3. 31
G. M. Warnes	(イギリス サザンプトン大学大学院生)	元. 4. 9—元. 7. 5
S. R. Meech	(イギリス ヘリオット・ワット大学助教授)	元. 6. 30—元. 10. 1
Z. Fidler	(チェコスロバキア チャールズ大学理学部講師)	元. 6. 14—元. 8. 5

海外からの訪問者

I. Bertini	(イタリア フローレンス大学教授)	元. 2. 13—元. 2. 14
P. Smith	(アメリカ ハーバード・スミソニアン天文物理学研究所研究員)	元. 3. 30
林 明彦	(台湾 台湾シンクロトロン放射研究センター)	元. 4. 3—元. 4. 5
鄭 伯昆	(台湾 台湾シンクロトロン放射研究センター)	元. 4. 3—元. 4. 5
李 燕村	(台湾 国立台湾大学助手・台湾シンクロトロン放射研究センター)	元. 4. 3—元. 4. 6
張 正祥	(台湾 国立台湾大学助手・台湾シンクロトロン放射研究センター)	元. 4. 3—元. 4. 6
黄 清郷	(台湾 国立台湾大学助手・台湾シンクロトロン放射研究センター)	元. 4. 3—元. 4. 6
F. Wilkinson	(イギリス ラフボロ工科大学教授)	元. 4. 4—元. 4. 6
D. Kim	(韓国 韓国標準研究所主任研究員)	元. 4. 8—元. 4. 16
井口 道生	(アメリカ アルゴンヌ国立研究所)	元. 5. 25—元. 5. 27

海外渡航 (元.3～元.8)

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
内 田 章	技 術 課 長 技 術 課	元. 3. 3 ～元. 3. 8	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」分野における共同研究の実施に関する意見交換及び情報収集のため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	元. 3. 5 ～元. 3. 13	ドイツ連邦共和国 ソビエト社会主義共和国連邦	第41回ブンセンコロキウム「電解質溶液中の会合と溶媒和」に出席のため
佐 藤 正 俊	分子集団研究系 助 教 授	元. 3. 15 ～元. 3. 19	アメリカ合衆国	日米協力「中性子散乱」研究のため
坂 田 忠 良	電子構造研究系 助 教 授	元. 3. 27 ～元. 4. 4	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」第3回ワークショップに出席、講演のため
正 畠 宏 祐	分子集団研究系 助 教 授	元. 4. 15 ～元. 4. 28	ドイツ連邦共和国 フ ラ ン ス	西ドイツ・日本シンポジウム「軟X線を用いた科学と技術」に参加及び大学・研究機関視察のため
諸 熊 奎 治	理 論 研 究 系 教 授	元. 4. 30 ～元. 5. 14	中華人民共和国	化学反応の理論的研究のため
木 村 克 美	分子集団研究系 教 授	元. 5. 5 ～元. 5. 15	中華人民共和国	放射光利用国際会議に出席、招待講演及び科学技術大学放射光施設を視察のため
那 須 奎一郎	理 論 研 究 系 助 教 授	元. 5. 12 ～元. 5. 21	中華人民共和国	第3回日中セミナー「有機固体に於ける電導及び関連現象」に参加し発表するため
小 倉 尚 志	分子構造研究系 助 手	元. 5. 12 ～元. 7. 7	スウェーデン	分子科学における動的過程の実験的理論的研究のため
井 口 洋 夫	分子科学研究所 所 長	元. 5. 14 ～元. 5. 18	中華人民共和国	第3回日中共同セミナーに出席のため
薬 師 久 彌	分子集団研究系 教 授	元. 5. 14 ～元. 5. 22	中華人民共和国	第3回日中共同セミナー（有機固体における電導及び関連現象）に出席のため
丸 山 有 成	分子集団研究系 教 授	元. 5. 14 ～元. 5. 26	中華人民共和国	第3回日中共同セミナー出席及び北京化学研究所訪問のため
木 村 克 美	分子集団研究系 教 授	元. 5. 24 ～元. 6. 2	ソビエト社会主義共和国連邦	原子核物理研究所放射光施設に訪問及び放射光利用に関する討議のため

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	元. 6. 9 ～元. 6. 21	アメリカ合衆国	第4回時間分解振動分光学会国際会議に出席、招待講演のため
山 田 千 穂	分子構造研究系 助 手	元. 6. 11 ～元. 8. 4	アメリカ合衆国	第44回国際分子分光学会会議に出席及び分子分光 学に関する共同実験のため
高 木 芳 弘	装置開発室 助 手	元. 6. 15 ～元. 7. 3	アメリカ合衆国	第9回レーザー分光国際会議に出席、講演及び レーザー分光学に関する研究討議のため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	元. 6. 20 ～元. 6. 26	アメリカ合衆国	1989環太平洋国際化学会議組織委員会及び研究 打合せのため
諸 熊 奎 治	理論研究系 教 授	元. 6. 22 ～元. 7. 3	アメリカ合衆国 カ ナ ダ	「分子構造と化学反応性に対する環境効果の理 論」会議出席及び分子科学に関する討論のため
木 村 榮 一	錯体化学実験施設 教 授	元. 6. 24 ～元. 7. 10	オーストラリア	国際共同研究「大環状化合物による分子イオン 認識」の研究実施のため
山 下 晃 一	理論研究系 助 手	元. 7. 6 ～元. 7. 23	アメリカ合衆国	分子エネルギー変換に関するゴードン研究会議 及び1989年分子衝突動力学会会議に出席、理論化 学研究の発表・討論のため
木 村 克 美	分子集団研究系 教 授	元. 7. 9 ～元. 7. 20	アメリカ合衆国	第4回電子分光国際会議において招待講演及び 光電子分光に関する討議のため
加茂川 恵 司	分子構造研究系 助 手	元. 7. 11 ～元. 10. 31	アメリカ合衆国	日米科学技術協力事業における共同研究実施の ため
井 口 洋 夫	分子科学研究所 所 長	元. 7. 12 ～元. 7. 19	ドイツ連邦共和国	H. C. Wolf 教授60歳記念シンポジウム出席及 び有機電導体研究状況調査のため
小谷野 猪之助	分子集団研究系 助 教 授	元. 7. 15 ～元. 8. 3	アメリカ合衆国	「1989年分子衝突の動力学会議」及び「第16回 原子衝突国際会議」に出席し、表面反応機構に 関する情報収集・交換を行うため
藤 本 齊	技術課 文 部 技 官	元. 7. 16 ～元. 7. 23	アメリカ合衆国	第9回真空紫外物理に関する国際会議出席及び 真空紫外測定技術習得のため
渡 邊 誠	極端紫外光実験施設 助 教 授	元. 7. 16 ～元. 7. 23	アメリカ合衆国	第9回真空紫外物理国際会議に出席し、講演を 行うため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	元. 7. 21 ～元. 7. 30	アメリカ合衆国	日米科学協力事業セミナー「金属／高分子の化 学」に出席のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
木 村 榮 一	錯体化学実験施設 教 授	元. 7.22 ～元. 8. 5	アメリカ合衆国	国際共同研究「大環状化合物による分子・イオン認識」の研究実施のため
那 須 奎一郎	理 論 研 究 系 助 教 授	元. 7.22 ～元. 8. 8	アメリカ合衆国	超伝導国際会議に出席し、発表及びロス・アラモス研究所で共同研究を行うため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	元. 8. 1 ～元. 8.23	スウェーデン チェコスロバキア ハンガリー デンマーク	第35回国際純正応用化学連合 (IUPAC) 総会に出席及び錯体化学に関する研究打合せのため
廣 田 榮 治	分子構造研究系 教 授	元. 8. 7 ～元. 8.16	スウェーデン デンマーク	第35回国際純正応用化学連合 (IUPAC) 総会に出席のため
吉 原 經太郎	電子構造研究系 教 授	元. 8.12 ～元. 8.22	チェコスロバキア 連 合 王 国	第6回エネルギー移動及び電子移動に関する国際会議に出席、招待講演のため
三 谷 忠 興	装 置 開 発 室 助 教 授	元. 8.17 ～元. 8.22	大 韓 民 国	シンクロトロン国際会議出席のため
諸 熊 奎 治	理 論 研 究 系 教 授	元. 8.24 ～元. 9. 1	カ ナ ダ	第10回カナダ理論化学シンポジウム出席、計算機化学に関する研究討論のため

人事異動(元.3～元.7)

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
元. 3. 1		大 橋 和 彦	助手(電子構造研究系)に採用	電子状態動力学研究部門
元. 3. 1	助教授 (極端紫外光実験施設)	春 日 俊 夫	教授(広島大学理学部)に昇任	
元. 3. 1		黒 崎 博 雅	技官(技術課)に採用	相關領域研究系技術係
元. 3. 30	事務補佐員 (分子集団研究系)	永 田 須真子	退職	
元. 3. 31	非常勤の講師 (電子構造研究系)	大 山 浩	退職	
元. 3. 31	非常勤の講師 (分子集団研究系)	今 城 尚 志	退職(九州大学理学部助手)	
元. 3. 31	非常勤の講師 (相關領域研究系)	馬 越 啓 介	退職(鳴門教育大学教育学部助手)	
元. 3. 31	事務補佐員 (化学試料室)	藤 田 知 子	退職	
元. 3. 31	事務補佐員 (極端紫外光実験施設)	松 田 加代子	退職	
元. 3. 31	技官(技術課)	東 正 志	辞職(大阪工業大学工学部講師)	電子構造研究系技術係
元. 3. 31	教授(理論研究系)	今 村 詮	併任終了	分子基礎理論第三研究部門
元. 3. 31	助教授(理論研究系)	北 原 和 夫	併任終了	分子基礎理論第三研究部門
元. 3. 31	教授(分子構造研究系)	上 野 晃 史	併任終了	分子構造学第二研究部門
元. 3. 31	助教授 (電子構造研究系)	阿 部 晴 雄	併任終了	電子構造研究部門
元. 3. 31	教授(分子集団研究系)	茅 幸 二	併任終了	分子集団研究部門
元. 3. 31	助教授 (分子集団研究系)	城 谷 一 民	併任終了	分子集団研究部門
元. 3. 31	教授 (相關領域研究系)	丸 山 和 博	併任終了	相關分子科学第二研究部門
元. 3. 31	助教授 (相關領域研究系)	鈴 木 寛 治	併任終了	相關分子科学第二研究部門
元. 3. 31	助教授 (極端紫外光実験施設)	直 江 俊 一	併任終了	
元. 3. 31	教授 (錯体化学実験施設)	上 原 章	併任終了	配位結合研究部門
元. 3. 31	助教授 (錯体化学実験施設)	大 川 尚 士	併任終了	配位結合研究部門
元. 4. 1		岩 野 薫	非常勤の講師(理論研究系)に採用	
元. 4. 1	技官(技術課)	鈴 木 俊 法	助手(分子構造研究系)に配置換	分子構造学第二研究部門
元. 4. 1	助教授 (電子計算機センター)	柏 木 浩	教授(九州工業大学情報工学部)に昇任	
元. 4. 1		田 中 彰 治	助手(化学試料室)に採用	
元. 4. 1		鈴 木 真 理	事務補佐員(化学試料室)に採用	
元. 4. 1	助手(化学試料室)	太 田 哲 男	助手(京都大学工学部)に転任	

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
元. 4. 1		永 谷 康 乃	事務補佐員（極端紫外光実験施設）に採用	
元. 4. 1		木 村 榮 一	教授（広島大学医学部）に併任	2. 3. 31まで
元. 4. 1		池 田 龍 一	助教授（名古屋大学理学部）に併任	2. 3. 31まで
元. 4. 1	技官（富山医科薬科大学 附属病院薬剤部）	森 義 仁	技官（技術課）に転任	電子構造研究系技術係
元. 4. 1		井 田 隆	技官（技術課）に採用	分子集団研究系技術係
元. 4. 1		豊 田 二 郎	技官（技術課）に採用	相關領域研究系技術係
元. 4. 1		都 築 重 次	臨時用務員（技術課）に採用	
元. 4. 1	技官（技術課）	中 根 秀 治	技官（高エネルギー物理学研究所施設部設備課）に転任	
元. 4. 1	※教授（電気通信大学電 気通信学部）	松 澤 通 生	教授（理論研究系）に併任	分子基礎理論第三研究部門
元. 4. 1	※助教授 （山口大学工学部）	篠 塚 雄 三	助教授（理論研究系）に併任	分子基礎理論第三研究部門
元. 4. 1	※教授 （大阪大学理学部）	柳 田 孝 司	教授（分子構造研究系）に併任	分子構造学第二研究部門
元. 4. 1	※主任研究官（工業技術院 名古屋工業技術試験所）	岡 嵩 正 治	助教授（電子構造研究系）に併任	電子構造研究部門
元. 4. 1	※教授 （お茶の水女子大学理学部）	大 橋 裕 二	教授（分子集団研究系）に併任	分子集団研究部門
元. 4. 1	※助教授 （東京都立大学理学部）	阿知波 洋 次	助教授（分子集団研究系）に併任	分子集団研究部門
元. 4. 1	※教授 （東北大学理学部）	桜 井 英 樹	教授（相關領域研究系）に併任	相關分子科学第二研究部門
元. 4. 1	※助教授 （東京工業大学理学部）	中 村 榮 一	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
元. 4. 1	※助教授 （広島大学理学部）	関 一 彦	助教授（極端紫外光実験施設） に併任	
元. 4. 1	※教授 （東京大学工学部）	干 鯛 真 信	教授（錯体化学実験施設）に併任	配位結合研究部門
元. 4. 1	※助教授 （福岡大学理学部）	山 口 敏 男	助教授（錯体化学実験施設）に併任	配位結合研究部門
元. 4. 1		太 田 太恵子	改姓（旧姓：前田）	技術課技官
元. 4. 1		諸 熊 奎 治	教授（総合研究大学院大学数物 科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		廣 田 栄 治	教授（総合研究大学院大学数物 科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		吉 原 經太郎	教授（総合研究大学院大学数物 科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		木 村 克 美	教授（総合研究大学院大学数物 科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		薬 師 久 彌	教授（総合研究大学院大学数物 科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		中 筋 一 弘	教授（総合研究大学院大学数物 科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		木 村 榮 一	教授（総合研究大学院大学数物 科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		大 峯 巖	助教授（総合研究大学院大学数 物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		森 田 紀 夫	助教授（総合研究大学院大学数 物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
元. 4. 1		坂 田 忠 良	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		渡 邊 誠	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		小谷野 猪之助	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		磯 邊 清	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		池 田 龍 一	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		山 下 晃 一	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		笹 井 理 生	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		長 嶋 雲 兵	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		山 田 千 樫	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		高 木 芳 弘	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		橋 本 和 仁	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		今 村 隆 史	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		鳥 海 幸四郎	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		大 塩 寛 紀	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		古 賀 伸 明	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		森 健 彦	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		長 岡 伸 一	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	構造分子科学専攻
元. 4. 1		井 口 洋 夫	教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		中 村 宏 樹	教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		北 川 禎 三	教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		大 瀧 仁 志	教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		花 崎 一 郎	教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		木 村 克 美	教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		丸 山 有 成	教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		那 須 奎一郎	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		宇田川 康 夫	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		西 信 之	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		正 島 宏 祐	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		佐 藤 正 俊	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
元. 4. 1		三 谷 忠 興	助教授（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		林 秀 光	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		加茂川 恵 司	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		田 路 和 幸	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		岩 井 正 博	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		小 倉 尚 志	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		中 垣 良 一	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		木 村 啓 作	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		田 林 清 彦	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		稲 辺 保	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 1		小野田 雅 重	助手（総合研究大学院大学数物科学研究科）に併任	機能分子科学専攻
元. 4. 16		杉 山 加余子	事務補佐員（分子集団研究系）に採用	
元. 5. 16	助教授 （電子構造研究系）	坂 田 忠 良	教授（東京工業大学大学院総合理工学研究科）に昇任	基礎電子化学研究部門
元. 5. 29	助教授 （北海道大学触媒研究所）	佐 藤 真 理	助教授（分子集団研究系）に転任	界面分子科学研究部門
元. 5. 29	助教授 （北海道大学触媒研究所）	松 島 龍 夫	助教授（分子集団研究系）に転任	界面分子科学研究部門
元. 5. 29	助手 （北海道大学触媒研究所）	大 森 唯 義	助手（分子集団研究系）に転任	界面分子科学研究部門
元. 5. 29	教授（九州大学理学部）	都 野 雄 甫	教授（関連領域研究系）に配置換	有機構造活性研究部門
元. 5. 29		都 野 雄 甫	教授（九州大学理学部）に併任	2. 3. 31まで
元. 5. 29	助手（九州大学理学部）	三 島 正 章	助手（関連領域研究系）に転任	有機構造活性研究部門
元. 5. 31	化学試料室長	吉 原 經太郎	併任終了	
元. 6. 1	※教授（東京工業大学総合理工学研究科）	坂 田 忠 良	教授（電子構造研究系）に併任	基礎電子化学研究部門 元. 8. 31まで
元. 6. 1		美齊津 文 典	助手（機器センター）に採用	
元. 6. 1		中 筋 一 弘	化学試料室長に併任	
元. 6. 30	技官（技術課）	太 田 太恵子	辞職	化学試料技術課
元. 7. 1	助手 （大阪市立大学理学部）	北 浦 和 夫	助教授（電子計算機センター）	
元. 7. 16		田 村 祐 介	非常勤の講師（錯体化学実験施設）に採用	錯体触媒研究部門

異動前欄の※印は併任教官の本務官職を示す。

編 集 後 記

平成元年度の分子研レターズ第1号を送り出すにあたり豊富な内容を持てた事は、幸運であった。新流動部門が発足し、総合大学院大学がスタートし、そして南実験棟の完成に加え、井口所長の藤原賞受賞と編集作業中にもいくつかの嬉しいニュースが飛び込んできた。分子研の研究活動も大いに盛んであり、それらの一端がコンファレンス報告、日英協力報告、研究会報告、そして課題研究報告、国際交流報告に現われている。人事の流動も実に活発であり、最近の多くの転出者の中で、柏木、春日、篠原の三氏からエッセイをいただいたが、それぞれ、分子研在任中が偲ばれる個性豊かな内容である。また大学院の学生ばかりでなく、新流動部門をはじめ多くの新しい方々を迎え、お互いに顔と名前が一致しない事もしばしば見受けられるようになった。顔写真付きの新任者紹介、新入生紹介はこの意味で多いに役に立つのではないだろうか。

最後に御多忙にもかかわらず、玉稿をお寄せ下さった筆者の方々に心から御礼を申し上げたい。

分子研レターズ編集委員会

中 村 宏 樹 (委員長)

西 信 之 (本号編集担当)

宇田川 康 夫

正 畠 宏 祐

中 筋 一 弘

分子研レターズ管理局編集担当

山 田 一 郎

分子研レターズNo.21

発行年月	平成元年 9 月
印刷年月	平成元年 9 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 レ タ ー ズ 編 集 委 員 会
印 刷	株 式 会 社 荒 川 印 刷