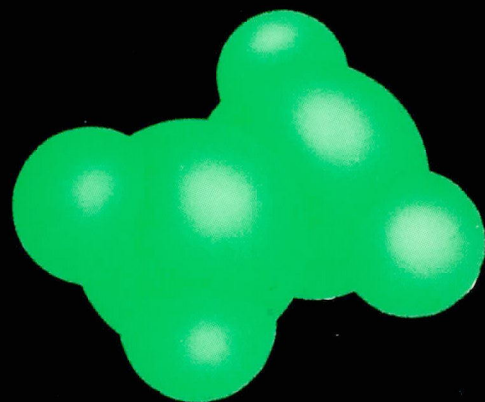




# 分子研レターズ

1993・3 No.28



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

# 目 次

## 研究紹介

理論研究系分子基礎理論第一研究部門(諸熊グループ)… 分子研 諸 熊 奎 治 …… 1

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門(大瀧グループ)…… 分子研 大 瀧 仁 志 …… 5

第二回分子科学研究所オープンハウス …………… 分子研 中 筋 一 弘 …… 9

## 分子研を去るにあたり

分子研を去るにあたって…………… 愛知教育大学化学科 中 島 清 彦 …… 10

分子研での4年半…………… 姫路工業大学理学部 小 澤 芳 樹 …… 11

外から分子研を眺めて…………… 国立環境研究所大気圏環境部 今 村 隆 史 …… 12

平成4年度総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名 …………… 15

## 外国人客員教官の紹介

E. L. Frankevich (ロシア 化学物理エネルギー研究所研究室長) …………… 16

L. S. Grigoryan (アルメニア 物理学研究所固体物理及び  
高温超伝導部門磁気共鳴研究室室長) …………… 17

K. Stefanski (ポーランド ニコラス・コペルニクス大学物理科助教授) …………… 18

新任者紹介 …………… 19

総合研究大学院大学平成4年度(10月入学)新入生紹介 …………… 23

IMS マシンの成果報告 …………… 分子研 浅 香 修 治 …… 24

## 新装置紹介

フラーレン製造システム…………… 分子研 北 川 宏 …… 26

## 岡崎コンファレンス報告

### 第44回岡崎コンファレンス

「化学反応理論の新しい展開」	分子研 諸熊奎治, 分子研 中村宏樹, 京大 中辻 博, 慶應大 岩田末廣	28
----------------	--	----

## 国際協力事業報告

日本・イスラエル共同研究事業	分子研 中村宏樹	33
第4回日中合同シンポジウム	分子研 丸山有成	34

## 研究会報告

「振動分光法による物質の時間・空間変化の追跡—時間・空間分解赤外ラマン分光—」	阪大工 中島信一	40
「構造制御された多中心金属イオンによる複合反応場の設計」	北大触研セ 市川 勝	44
「分子動力学と化学反応性」	分子研 大峰 巖	48

分子研コロキウム	50
----------	----

共同研究採択一覧	51
----------	----

平成5年度（前期）

施設利用実施一覧	59
----------	----

平成4年度（前期）

国際交流	64
------	----

海外からの招へい研究者

海外からの訪問者

海外渡航	69
------	----

人事異動	74
------	----

編集後記	75
------	----

## 研究紹介

# 理論研究系分子基礎理論第一研究部門 (諸熊グループ)

分子研 諸 熊 奎 治

分子研に帰国着任したのは1976年12月であるから、早くも16年の歳月がすぎたことになる。米国での研究歴13年と比べ、分子研だけでそれを越えた。この度縁あって、米国エモリー大学に“再帰国”着任することになった。分子研レターズに分子研の職員として寄稿する最後の機会であるので、思い出もまぜながら私どもの研究室での最近の研究を紹介したい。

分子研に来るまでの米国では、分子間相互作用の理論研究を中心テーマとして研究を進めて来た。分子研にもどった時、ab initio 分子軌道計算によって化学反応のポテンシャル面が“定量的”に求められる時代が来つつあると感じ、化学反応の理論研究を中心として研究を組み立てて行くことにした。当時は日本では欧米に比べて理論計算に対する理解が仲々得られず、ab initio 法によって遷移状態の構造、エネルギー、基準振動を求め、遷移状態理論や動力学計算に応用した結果を学会で発表すると、そのような計算は意味がないと実験の方々から大反発を受けたりしたこともあった。その後、分子研の電子計算機センターのスーパーコンピュータを大いに利用させていただいて、この数年は、(1)励起状態を経由する化学反応のポテンシャル面と動力学および(2)遷移金属錯体の素反応のポテンシャル面を中心に、その他金属や金属イオンの水和機構、有機化学の反応機構、固体表面での反応などにも範囲を拡げて研究を行っている。ここでは、(1)と(2)の一部を紹介する。

励起状態の関係する反応では、最近  $\text{CH}_3\text{I}$  および  $\text{ICN}$  の光解離反応の機構について、スピン軌道相互作用をとり入れた CI 法によるポテンシャル面の計算、その解析関数へのフィット、複数のポテンシャル面上の古典および量子力学的動力学計算などを行った。 $\text{CH}_3\text{I}$  の光解離には、直接の光励起によってできる  $^3\text{Q}_0$  が透熱的に解離して生成する  $\text{CH}_3 + \text{I}^*(^2\text{P}_{1/2})$  と、 $^3\text{Q}_0$  から  $^1\text{Q}_1$  への乗りかえによって生じる  $\text{CH}_3 + \text{I} (^2\text{P}_{3/2})$  の2つのチャネルがある。この数年の実験で、 $\text{I} (^2\text{P}_{3/2})$  とともに生成する  $\text{CH}_3$  は解離軸に垂直な軸まわりの回転も反転振動も励起しているが、 $\text{I}^*(^2\text{P}_{1/2})$  チャネルの  $\text{CH}_3$  は振動回転とも励起していないことが見出されて、その起源について論議が行われていた。我々のポテンシャル面の計算によれば、図1に示すように、フランクコンドン励起構造は  $^3\text{Q}_0$  の反応座標の近くにあり、解離は反応座標沿いに起こるので反転振動励起は起こらない。ところが、 $^1\text{Q}_1$  の反応座標は  $^3\text{Q}_0$  のそれからずれており交差シームにおいて  $^3\text{Q}_0$  か

ら $^1Q_1$ に乗り移った所で振動励起が起こる。回転励起についても、同様にポテンシャル面の形状から定性的な説明が出来る。さらに、実際に動力学計算を行うと、 $CH_3$ の振動・回転励起の分布について実験とほぼ定量的な一致が得られる。ICNについても、従来実験の解釈がうまく行くとして提唱されていたものと定性的にも形状の異なるポテンシャル面が *ab initio* 計算で得られたが、この新しいポテンシャル面を用いた動力学計算で、実験結果が定性的にはほぼ満足に説明できた。

また、実験的手段で化学反応の“遷移状態”を観測しようという“遷移状態分光学”の解釈や設計に対し、ポテンシャル面と動力学の立場から積極的に研究を進めた。例えば、 $ClHCl^-$ の光イオン化スペクトルに見られる構造は、 $Cl + HCl$ 反応の遷移状態付近での反対称伸縮振動に由来すると考えられているが、我々はポテンシャル面の計算から、イオン化の終状態として従来考慮されていた $^2\Sigma^+$ 状態の他に $^2\Pi$ 状態の寄与もとり入れる必要があることを示した。また、オゾン $O_3$ の $X \rightarrow B$ の吸収スペクトルにもわずかな構造が見られるが、これはB状態に励起された分子の一部が直接解離せず、数ピコ秒の間に再出現(recurrence)する現象だと解釈されている。我々が計算した新しいポテンシャル面とその上での量子動力学計算によって、再出現の時間的挙動がはじめて理論的に再現できた。また、 $Na + HCl$ 系において反応生成物 $H + NaCl$ を照射レーザー光の波長の関数として観測することにより、反応の遷移状態付近のポテンシャル面の形状についての情報がえられることを示唆し、新しい実験を提唱した。

遷移金属錯体の電子状態の理論計算も分子研に来てからはじめた仕事である。この数年間遷移金属錯体、特に有機金属錯体の種々の素反応について遷移状態を理論計算で求めて来た。最近力を入れているのは、比較的反応性に乏しいC-H, Si-Hなどの活性化である。たとえば、Wilkinson触媒のモデルである $RhCl(PH_3)_2$ への $CH_4$ のC-H結合の酸化的付加反応のポテンシャル面とSi-H結合のそれとを比較したところ、図2に示すように前者では先ず $CH_4$ 錯体が生成した後遷移状態を経て $HRhCl(PH_3)_2(CH_3)$ が生成するのに対し、 $SiH_4$ では中間錯体や遷移状態なしに $HRhCl(PH_3)_2(SiH_3)$ が生成することが見出された。このポテンシャル面のちがいの起源は $SiH_4$ の方が反応の発熱性が約36kcal/mol大きいことに由来しているが、理論解析の結果それは主として、Si-H結合はC-H結合より約16kcal/mol弱いのにに対し、生成系ではRh-Si結合がRh-C結合より約23kcal/mol強いからであることを明らかにした。計算によれば、M-C結合とM-Si結合の強弱は遷移金属の種類に依存しており、電気陰性度の低い $M = Zr$ の場合にはZr-C結合の方がZr-Si結合より逆に強くなっている。

遷移金属-炭素又は一水素結合へのオレフィンの挿入反応やその逆反応である $\beta$ -脱離反応についても、ポテンシャル面の研究を進めて来たが、最近行ったZr錯体によるオレフィンの立体選択性重合反応の機構への応用を紹介する。まず、モデル錯体 $(H_2SiCp_2)ZrCH_3^+$ 錯体のZr- $CH_3$

結合へのエチレンの挿入反応についてエチレン錯体、遷移状態、生成物の構造やエネルギーを *ab initio* 法で計算した。実際の立体選択性重合では、シクロペンタジエニル基 Cp 上にいくつかの  $\text{CH}_3$  置換基があり、またモデル化合物の  $\text{CH}_3$  は成長ポリマー末端であり、重合するのはエチレンではなくプロピレンである。そこでこれらのアルキル置換基の効果を分子力学 (MM) 法で考察したところ、この重合反応では、Cp 上の置換基が成長ポリマー末端の配置を決め、次にその配置が挿入するオレフィンの立体配置を決めるいわゆる“間接機構”で立体選択性が決まっていることがわかった。

化学反応の理論的研究は、理論的方法論の発展と強力なワークステーションの出現によって、新しい展開をむかえつつある。励起状態を含む複数のポテンシャル面の関与する化学反応、遷移状態や反応経路など実験では見つけにくい反応途中の分子の電子状態、触媒反応など複雑な反応系の反応機構、溶液中の化学反応など理論計算を基礎にして解明される時期が近づいているといえる。幸い平成 4 年度から、「化学反応理論—理論計算によるアプローチ」という科研費重点領域研究もはじまったので、大きな発展を期待している。

この数年のわれわれのグループの研究は、山下、古賀、橋本各助手と薮下、天辰両技官の寄与によるところが大きい。歴代の助手、技官、フェローのほか、日本学術振興会等にサポートされた外国人ポストドク、外国人特別研究員、日本の企業からの委託研究員、大学院生などの活躍なしではこれら研究は到底達成できなかったであろう。また、分子研という環境のおかげで、化学のいろんな分野の所内外の多くの実験研究者の方々との共同研究を楽しんだ。分子研での 15 年間、このように多くの研究者にかこまれて思い切り研究をさせていただいたことに、あらためて感謝したい。

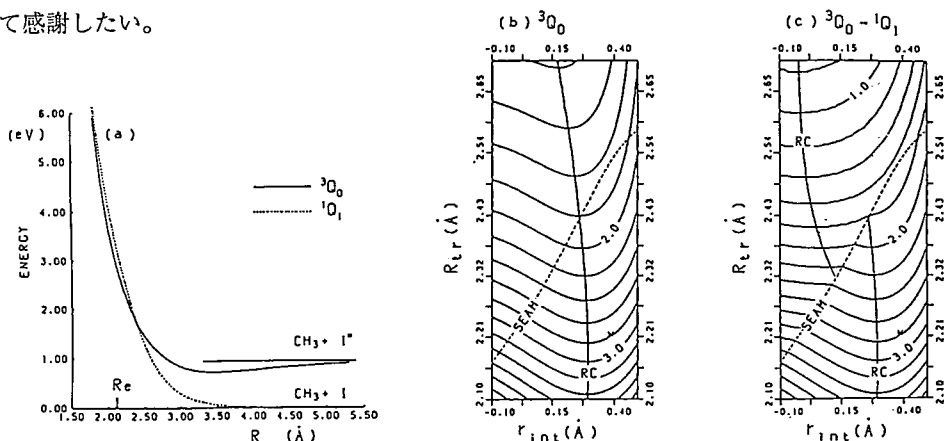


図 1  $\text{CH}_3\text{I}$  の光解離反応のポテンシャル面

(b)は $^3\text{Q}_0$ の、(c)は $^3\text{Q}_0$ から $^1\text{Q}_1$ へ乗り移ったポテンシャル面で、それぞれ $\text{CH}_3 + \text{I}^*$  ( $^2\text{P}_{1/2}$ ),  $\text{CH}_3 + \text{I}^*$  ( $^2\text{P}_{3/2}$ )を与える。 $R_{\text{tr}}$ は $\text{CH}_3$ の重心とIとの距離、 $r_{\text{int}}$ は $r_{\text{CH}}\sin\theta$ で $\text{CH}_3$ の反転振動 ( $\theta$ は反転角)を表す。\*印がフランクコンドン構造。



# 錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 (大瀧グループ)

分子研 大 瀧 仁 志

錯体触媒研究部門は錯体化学実験施設が設立された時に最初に設置された専任部門であります。初代の部門担当者は齋藤一夫教授で、齋藤教授がご停年になられた後、私が後任として東京工業大学より赴任して参りました。

早いもので、それから既に5年が経過し、来る3月で私も停年を迎えることとなりました。

私が錯体化学実験施設に転勤した最も大きな責務は、錯体化学研究所の設立にあったわけですが、勤務期間中にはその夢を実現することが出来ませんでした。この点は力不足であったことを甚だ残念に思っております。研究所の早期実現を夢みておられた錯体化学研究者の方々、またそれに伴って錯体化学実験施設が研究所設立に向けて中核的、発展的役割を果すことを期待しておられた分子科学研究所の諸先生方には誠に申し訳なく思っております。

しかしこの計画はストップしたわけではなく、後任の先生並びに錯体化学実験施設の諸先生方が継続してご努力して下さることになっており、近い将来その実現が大いに可能であると私は信じております。

私が分子科学研究所錯体化学実験施設に参りましたのは、先任の齋藤教授がご停年になられて一年あとのことでした。

齋藤教授の後任には一時関連領域研究系の岩村 秀教授が施設長を兼任されましたが、岩村先生はその直後、東京大学に移られ、分子構造研究系の廣田榮治教授が施設長を引き継いでおられました。あまりご自身の研究と関係のない実験施設の責任者になられていた岩村、廣田両教授には大変ご迷惑なことであつたろうと思います。

私が廣田先生から施設長を引き継ぎましたのは昭和 63 年の 5 月でした。以来 5 年間施設長をお引き受けしたことになります。

施設長としての一番の苦勞は、研究所設立の問題を別にすれば、流動研究部門の教官を依頼することでしょう。2 年目毎に変わる流動教官の候補者の選定はなかなか大変で、これは今後とも施設長の気の休まることのない仕事となるでしょう。

この錯体触媒研究部門はやや変則的で、専任部門でありながら客員教授、客員助教授の席を併せて持っております。いつかは客員部門が分離し、専任部門に助教授の定員が付き、さらにもう



一名の助手の定員が付いて完全部門となることを期待しているのですが、この5年間にはそのような定員増や機構改革を行うことは出来ませんでした。

錯体触媒研究部門はこのような歴史的背景をもって運営されてまいりましたので、この部門での研究の内容は必ずしも部門名とピッタリしていない面もありました。さいわい、いろいろな研究者のご協力により、私も触媒反応に関連した論文を発表することができましたが、主たる研究内容は溶液の構造や溶液内錯形成反応の平衡などを対象としてきました。溶液X線回折法やポテンシオメトリー、カロリメトリーなどが主な手法となっておりました。ことにポテンシオメトリーやカロリメトリーなどを用いた平衡論的な研究は、東京工業大学時代から共同研究者として私を支えてくれた石黒慎一助教授（東京工業大学総合理工学研究科）に負うところが甚だ大きいものとなっております。科学研究費補助金で購入した溶液X回折装置は東京工業大学から移管していただきましたが、この分野の研究には、福岡大学に移られた山口敏男助教授や、筑波大学に行かれた小堤和彦講師などが大いに協力してくれました。

分子科学研究所での生活は当初から5年という短い期間に限られていたので、研究室を拡張しようという気持ちはあまりなく、なるべく人員を増やさずに研究成果を上げる方法を考えていました。客員教授として一年間研究所に滞在されたスウェーデンの王立工科大学の Georg Johansson 教授や、招聘外国人研究員としてやはり一年間われわれの研究室にいられたハンガリー科学アカデミーの Tamás Radnai 博士らの協力は、まさにこのような考えから生まれたものでした。東京工業大学から受託学生として引き続き研究に協力してくれた学生諸君の努力も大きいものでした。

こういったいろいろな人々のお蔭で、なんとかこの5年まずは無事に研究を続けることができました。

私としましては東京工業大学でやっていた研究を続けていくことは比較的容易でしたが、折角新しい、しかも世界に誇る研究所の末席を汚すことになった以上、なんとか新しい研究をはじめたいという気持ちが強くありました。

まことに幸なことに、分子科学研究所に移った翌年、南実験棟が建設され、われわれ錯体化学実験施設は新しく広い場所を頂くことができました。東京工業大学から移転した装置も、十分な広さの部屋に設置することができました。

分子科学研究所はある程度の研究費でできる研究ならば、今すぐにでも実行ができるという素晴らしい研究環境にあります。私は分子科学研究所において、X線回折法を用いた超臨界状態の水及び電解質溶液の構造の研究を特別研究課題といたしました。この分野の研究は非常に重要であることがわかっていながら、これまで全く手がつけられていませんでした。この研究は Radnai 博士がほとんど一人ですべて推進してくれました。Radnai 博士が研究の完全終結前に滞在期限が終り、母国のハンガリーに帰国されてしまったので、この研究は現在一休みの状態ですが、これ

までに得られた結果は今までにない新しいものでした。この研究は私の停年後も次の職場で継続してゆきたいと考えております。

私の研究生生活でさらに幸なことは、平成2年から重点領域研究「溶液の非平衡過程の分子論的アプローチ」が採択されたことでした。重点領域研究の採択には10倍の競争に勝たなければなりません。競争率ばかりでなく、真の独創性、新奇性を持つような計画を立てる必要があります。このような難関を乗り越え得るとは思ってもみませんでした。このことは私共にとって極めて幸運であり、またそれからの研究の遂行に大きな力と自信を与えてくれました。

この重点領域研究の計画書を作成する時には計画班員予定者一同で大いに議論し、何度も書き直しをいたしました。したがって、この計画が採択された時には本当に皆で喜び合いました。この時ほどチームの喜びが個人の喜びよりはるかに素晴らしいものであることを知ったことはありませんでした。

そこで早速その研究費で、ストップド・フロー法とEXAFS法を組み合わせた装置を作成し、以前から心に温めていた反応中間体の構造解析に挑戦することにいたしました。

この研究課題は約10年ほど前から考えていたのですが、強力なX線源や新しい検出器が必要のため、研究費の乏しいわれわれには到底出来ない相談だと半ばあきらめておりました。それでもなんとか可能性だけは保っておきたいと思い、東京工業大学時代に採択された特定研究の経費で実験室タイプのEXAFS測定装置を購入しておきました。EXAFS測定はすでに高エネルギー物理学研究所の放射光実験施設でルーチン化されており、特に新奇な研究課題ではありませんでしたが、これは私にとって次の研究課題の布石でした。

そうこうしているうちに、高エネルギー物理学研究所の松下教授らがストップド・フロー法とEXAFS法を組み合わせて、反応中間体の構造決定を試みられました。誰でも同じようなことを考えるものだと思います、先を越されたと大いにガッカリいたしました。またこの時ほど研究費の重要性を痛感したことはありませんでした。しかしよく研究結果を見ると、彼等は適当な反応系をうまく選択しなかったために、実際には反応中間体の構造が決定されたわけではなく、反応系の物質が生成系の物質に変化してゆく状態をEXAFSで追跡できたに過ぎないことがわかりました。即ち、測定されたEXAFSスペクトルは反応物質と生成物質の混合物のスペクトルに過ぎなかったわけです。これならまだ我々の出る幕が残されていると思いました。

重点領域研究の計画が始まる直前に佐賀大学の田端教授が非常に面白い系を研究しておられることを知りました。それは水銀(II)イオンのボルフィリン錯体が他の金属イオンと置換反応を行う際にヘテロ二核錯体を反応中間体として生成するという研究でした。この反応中間体は比較的安定で、適当なpHの水溶液中で数10秒間存在し得るということでした。水銀(II)ボルフィリン錯体の溶解度も割合大きく、実験室スケールのEXAFS装置でもその構造の測定が可能であるよ

うに見えました。これだ、と思って重点領域研究の研究費で装置の作成にとりかかりました。しかし停年直前の研究グループには新しい研究者を育てる時間はなく、また現在のグループから新しい研究課題に取り組んでくれる人もおりませんでした。

以前からこのアイデアについて討論してきた名古屋大学の舟橋教授が協力して下さることになり、その研究室の修士課程の学生である稲田康宏君が実際に実験を担当してくれることになりました。稲田君は EXAFS 測定の実験など全くなかったもので、筑波大学の小堤先生が指導してくれました。稲田君は非常に優秀な学生で、またたく間に EXAFS 測定法を理解し、たちまちエキスパートになりました。

実際の測定にはいろいろ苦労がありましたが、一つ一つうまく切り抜けることができました。水銀(II) ポルフィリン錯体と銅(II) イオンとの反応で生ずるヘテロ二核錯体  $[\text{Hg}(\text{ポルフィリン})\text{Cu}]^{2-}$  の構造の一部がはじめて明らかにされました。予想したように Cu-N, Cu-O の結合距離は反応生成物の  $[\text{Cu}(\text{ポルフィリン})]^{4+}$  錯体中の結合距離よりも長くなっており、銅(II) イオンはポルフィン環の中心より約 40pm 浮き上がっていることが見出されました。

分子科学研究所を退職する前に、これまで誰も成功しなかった反応中間体の構造決定が実現できたということは、なにか研究所にご恩返しができたような気がしております。

錯体触媒研究部門は 3 月で空になり、4 月からメンバーが一新されます。これからはさらに有力な研究陣により、一層すぐれた研究が進められていくことと思います。また、この研究部門は創設以来、錯体化学実験施設の中心機関としての役割を果たしてきました。このような役割はこれからもこの部門に期待したいと思っております。そして一日も早く、錯体化学者の総意によって、錯体化学研究所が設立されることを願っております。

## 第二回分子科学研究所オープンハウス

恒例の分子科学研究所オープンハウスが平成4年5月9日（土）に催された。恒例といってもまだ二回目であるが、この企画は分子研の現状を主に学部学生、大学院生の方々に知っていただくための研究所紹介であり、特に分子科学研究所が1989年度に創設された総合研究大学院大学（総研大）の基盤研究所となっていることを紹介することも重要な目的となっている。前回平成3年4月20日（土）に行った第一回の時のアンケート結果および我々のその後の議論から、このような企画は今後何年かは続けようということになった次第である。

まだ二回目であることも考慮して、大幅な変更・改良等は行わず基本的には前回企画した内容を踏襲し、午後1時から午後8時までの半日公開として行うことにした。即ち予め設定した三種類のモデルコースの一つを見学していただき、その後見学者の希望する所を自由に見学していただいた。やはり時間が短か過ぎたとはいえ、若干の改良を行ったこともあり、ハードで疲れたという不満は少なかったようである。今回の見学者は北は東北、南は九州までの16大学から、4年生9名、修士学生45名、博士学生3名、教官1名、その他を含め約60名であった。また参加者の専門分野の分布は二回とも一つの分野に偏ることはなく分子研の研究分野の分布に比較的良く対応していた。見学時間が短いにもかかわらず、モデルコースを3種類設定したのはこのことを配慮したためである。理学部系と工学部系という見方をすると前者が少し多くなっていた。総じて参加して良かったというアンケート結果または内外の感想であった。改めて参加された見学者の皆さんおよびご協力いただいた各大学の教官の方々に感謝致したく、この紙面を借りてお礼申し上げます。来年は世話係が交替するが、井口所長の発案に基づくこのようなオープンハウスが今後も、総研大の現況説明を主眼とはせず、もっと広く分子研の色々な面での特色・長所を全国の学生の方々に知っていただくことを第一目標として、改良を重ねながら催されることを願っている。

この行事の実施に際しては研究所の若手教官、総研大生、管理局職員の方々の大いなるご協力を賜った。ここに感謝致します。

（中筋一弘記）

## 分子研を去るにあたり

# 分子研を去るにあたって

愛教大化学 中 島 清 彦

私が分子研に助手として赴任したのは、今からちょうど6年前、1986年の12月でした。当時、私が所属した錯体化学実験施設は、分子研内に発足して2年を経たばかりの、専任、流動、客員各1部門からなるまだ規模の小さなグループで、齋藤一夫先生が唯一の専任教授としておられました。私は、研究棟1階東側の関連領域研究系の部屋に同居させていただき、実験棟4階に実験台を貸していただいて、分子研での研究生活をスタートいたしました。研究者としてもかけだしの私が、自分の研究態勢を整えるのに懸命な状況の中で目にしたのは、錚々たるメンバーで研究に打ち込んでおられる各研究室の真摯な姿でありました。これは大変なことになったという焦りと緊張の毎日であったことを覚えています。その後、齋藤一夫先生が定年退官され、1年を経て大瀧仁志先生が着任されて、研究環境、研究内容共に新しい研究室となりました。5年半、私自身が、分子研で実に多くのことを教育され、鍛えられてきたことを感じています。では、どれだけの成果をあげて貢献したのかと問われると、多少辛いところもありますが、常に自分の興味にもとづいて研究できる環境を与えていただけたことに感謝しています。

私が過ごしたこの5年半の間にも、南実験棟が新設され、分子研のいたるところで部門、施設の拡張や研究設備の拡充がなされ、ここで働く国内外の研究者の顔ぶれにも目まぐるしい変貌がありました。また、大学院大学の発足に伴って、毎年若い多くの学生研究者が入って来るようになりました。研究所が活きていることの証であろうと思います。分子研を離れ、研究する環境の大切さと、自分がおかれていた研究環境のすばらしさを改めて感じます。それは、単に優れた研究機器があるということだけでなく、研究に情熱をもった人々の集まりから肌で感じとれるエネルギーな刺激だろうと思っています。

この4月に愛知教育大学化学教室へ転出して、8ヶ月がたちました。“転出したというわりには、あいつよく分子研の中をうろついているなあ”とお思いの方も多いのではと、少々気にはしていますが（それほど気にもしていない!?）、分子研から僅か40分足らずの所にある大学という最高の立地条件に恵まれて、十分に施設利用させていただいております。しかし、学生時代から、理学部、理学研究科、そして分子研と過ごしてきた私にとって、教育大学という環境はやはり初めて経験するところです。大学に戻れば、思いもよらない考え方や出来事にでくわして、面食らったり、戸惑ったりの毎日を過ごしています。分子研に在る限り、いつまでも若いままの気分がい

られた私にとって(実際は、どんどん若手が増えていたからそんなことはなかったのですけれど)、ふとまわりを見渡せば大半が20才前後で半分が女性という状況に、やはり混乱しました(嬉しいのは3日だけ)。だれしも最初から優れた研究者であったはずもなく、そんなことは頭の中では十分解っていたはずなのですが、それがちっとも解っていないということに気付かされました。学部授業や学生実験の大切さを今さらながら感じます。

ここは単科大学ではありますが、化学教室、物理教室はもとより、哲学、心理学、果ては美術、音楽、技術等々まであって、品揃えの多さはさながらコンビニエンスストアのようです。最近は総合科学課程なるものも交じって、何やらいつそう混沌としてきました。考えようによっては、分子研以上に専門や分野を超えたディスカッションができるかもしれません。化学の専門店として開店できることを目指して努力したい。そのためには、この環境を十分生かしていく方法を私なりに見いだすことが必要です。今ある研究環境を最大限に利用して(勿論、身近にある分子研の研究施設にはこれからも十分お世話になると思いますのでよろしく)自分の科学を見つけて行きたいと思います。

先号の分子研レターズのなかに岡崎国立共同研究機構敷地内の桜の話が載っていました。桜は環境に慣れやすく、品種の交配が比較的容易におこなえる種であると記されています。春、二百数十本の桜が一举に花開く景観はみごとなものです。この桜咲く丘の上の元愛知教育大学跡地に研究所が設立され、私はその研究所で5年半お世話になって、今、刈谷市郊外の愛知教育大学へと移りました。私が分子研という恵まれた環境のなかで得ることができた小さな芽を、新しい環境の中でしっかりと成長させてみたいと思います。たくさんの方々にお世話になりました。ありがとうございました。

## 分子研での4年半

姫路工大 小澤芳樹

「君、6年間なんてのは、子供が小学校に上がる歳だよ。短いようで案外長いんだよ。」私が、分子研への応募を薦められたときに、大学院の指導教官はこのようなことをいわれました。任期が限られていることを私が気にしているとおもってこんなことをおっしゃってくれたのかもしれませんが、6年でよそに移る可能性が大きいならいいのではないかとこのんきに構えていた私でした。結局6年間の任期を勤めあげる前に(4年半弱)で出所してしまいました。教官の言葉通り、分子研に来た当初のことはもう大分昔の様に思い出しますが、研究のことを振り返るとあつという

間に過ぎてしまったような気がします。

私がお世話になった関連領域研究系の磯辺清先生のグループでは、分子と固体の架け橋の役割をする多核金属クラスターの研究をテーマとしており、私自身もクラスター化合物の合成と構造の研究を始めました。触媒作用などを持つ金属酸化物、硫化物の固体としての性質を保ったまま、普通の分子のように取り扱えるようにその部分構造を溶液中に「切り出して」やろうということでした。主に有機金属基を付加した酸化物、硫化物クラスターを合成しなければならないのですが、有機化合物の合成のように自由に原子を配列させることは簡単ではなく、合理的な合成経路を見つけたために生成する化合物を結晶化しX線で構造を決め、結果をながめては、合成条件をしばり込んでいくという手間のかかる地道な実験をおこなわなければなりません。私がとりかかった硫化物クラスターは、硫黄と金属の相性がよすぎるためか、反応をコントロールするのが難しく、純粋な化合物を得るためにはかなり苦勞しました。それでも私がいるあいだには、酸化物クラスターの研究は、化合物の合成から反応まで一連のつながりができ体系化されるまでになりました。私も微力ながら研究に貢献でき、分子研に來た甲斐があったと安心しています（磯辺先生はまだまだ貢献が足りないと思っておられるのかもしれませんが）。

小学校に上がる子供どころか、生涯の伴侶さえも巡り合うことなく研究に没頭？した4年半となりましたが、岡崎の地では楽しく過ごすことができたと思っています。仕事をおえて帰るとき、研究所を一步出るとすぐに狭い道路に普通の民家が立ち並ぶ雰囲気はホッとした気分させてくれました。休日には、よく近所をドライブしましたが町から少々離れただけで海あり、山あり、田んぼありで自然の風景を楽しむことが出来ました。

最後になりましたがこの4年半の間、時には怠けがちな私の仕事を辛抱強く見守っていただいた磯辺先生を始め、関連領域研究系の皆様には大変お世話になりました。この場をお借りして感謝致します。

## 外から分子研を眺めて

国立環境研 今 村 隆 史

初めに分子研レターズへの寄稿が大変遅くなり（既に正月を2回も越してしまった）編集委員の方々をはじめ皆様にご迷惑をおかけしたことを深くお詫び申し上げます。

私と分子研との係わりは1980年に先輩の実験の手伝いとして機器センターを訪れたのが始まりで、1985年4月からIMSフェローとして電子構造研究系（磁場効果グループ）に加わり、翌

年7月から物性化学部門（小谷野グループ）の助手として1991年3月まで所属していました。学生時代、機器センターの奥で何の工事をやっているのかと思っていたのが、まさかその地下にまで潜ることになるうとは思ってもいませんでした。（地上のテニスコートも十分利用させて頂きました。）分子研での生活によって分子科学に関わる多くの方々と知り合えたことはとても素晴らしいことで、分子研での思い出はとても書き尽くせるものではない。そこで分子研を離れて外から分子研を眺め、また当時の思い出を振り返ってみて分子研の持っているユニークな点・特徴と感じられる点について少し述べることにする。

まず第一に人事の回転の速さが挙げられる。良かれ悪しかれ助手の任期制や内部昇進の禁止は人事の動きの原動力になっていると思う。同時に、一部の大学をはじめとした研究機関で見られる他の研究機関への人事応募に対するネガティブなイメージは分子研では（少なくとも表面的には）見受けられない点も特徴である。分子科学の分野で（他の分野でも同じかも知れないが）国内での人事交流が比較的行われるようになってきたことに対しても分子研の役割は決して少ないと思う。大変なことではあるがこの基本路線は今後も続けるべきだと思う。更に教授クラスに於いてもやはり一回り以上の年月の間分子研というある意味で非常に恵まれた境遇の恩恵を得たならば、可能・不可能に関わらず転出を考えるべきではないだろうか？

第二の点としては国内外の研究者との接触の機会の多さが挙げられる。当然そのための様々な仕事は付随してくることは否定出来ないが、協力研究や国際協力を通して様々な研究者と共に研究出来る機会を持つことは、個々の研究の問題ばかりでなく研究に対する取り組み方や進め方などでお互いの主張をぶつけ合える良い場である。振り返ってみると、私自身分子研において如何にその機会を旨く利用していなかったかと悔やまれると同時に、当り前に感じていた研究者間の交流の難しさを感じずにはいられない。

第三として強力な研究支援体制がある。分野が限られている点もあるが、雑誌類や計算機センターのライブラリーの豊富さ、ストックルームの完備等々様々なものが挙げられる。管理局の方々や秘書の方々の協力にも感謝しています。更に忘れてならないものとして施設（計算機・低温・装置・機器・UVSOR・化学試料室）が挙げられる。特に技官の方々の援助は特筆すべきである。ノウハウの蓄積や技術力・対応力の向上は分子研を支えている要因となっている。欧米の主要大学・研究所におけるショッパの充実をよく耳にするが日本の大学や研究所でのショッパの充実はまだまだである。分子研における施設は（私自身は直接海外での研究現場を体験したことがないので想像する以外無いが）ショッパとは趣が異なると思うが、非常に強力な支援体制であることは間違いない。一方スタッフの年齢も上がってきていることも否定できない。若い頃は新しい体験や全体としての盛り上がりの雰囲気が一つの前進の力となっていたであろう。しかしながら彼らのレベルの向上につれ研究者側の要求との興味のずれや研究者側からのフィードバックの少な



さ（私自身とてもフィードバックが少なかったと反省しています）に対する不満が出て来つつあると思う。スタッフ陣の人事交流・待遇面の改善・取り組む問題の変革等は今後の課題であろうが、いずれにせよ研究支援体制の更なる充実は分子研にとって大切でありまたその意識が大学をはじめとした他の研究機関にも広がって欲しいと思う。

まじめな話が多くなったが、私自身 20 代後半から 30 才代前半という時期を分子研で過ごすことができたことは大きな財産であり、良い思い出である。分子研では「イライラしない・メリハリをつける・一つ一つ片づける」を目指しつつもほとんどクリア出来なかったが、瞬間的にもクリア出来た時は分子研の素晴らしさを味わえた。最後に磁場効果グループで阿部さん（理研）と戦友のようにして仕事を進めたこと、堀米さんや酒井さんの協力のもとに UVSOR-BL3B の光学系を作り直すことが出来たこと、堀米・鈴木両氏と共に買い続けた宝くじはついに日の目を見なかった（今なお見ていない）こと、小谷野先生（姫路工大）及び鈴木君（都立大）・今城君（九大）・長岡さん（愛媛大）と共に仕事できたことは素晴らしい思い出であり、同世代の仲間で行った内輪のセミナーはなつかしく思える。本当に多くの方々の協力なしでは分子研での生活をエンジョイ出来なかった。誠に有難うございました。分子研の益々のご発展をお祈り申し上げます。

# 平成4年度総合研究大学院大学 修了学生及び学位論文名

## 構造分子科学専攻

氏 名	博 士 論 文 名	付記する 専攻分野	授与年月日
杉浦 健一	プロトン—電子連動型分子性錯体の合成研究	理学	H 4. 9.30

## 機能分子科学専攻

氏 名	博 士 論 文 名	付記する 専攻分野	授与年月日
目 喜直	Studies on the Protein Dynamics of Photodissociated Carbonmonoxy Myoglobin and Hemoglobin by Time- Resolved Resonance Raman Spectroscopy	理学	H 4. 9.30
本田 数博	Study on Bimolecular Chemical Reactions under Bulk and Reactant-Pair Conditions	理学	H 4. 9.30

## 外国人客員教官の紹介

### 分子エネルギー変換研究部門

Eugene L. Frankevich 教授

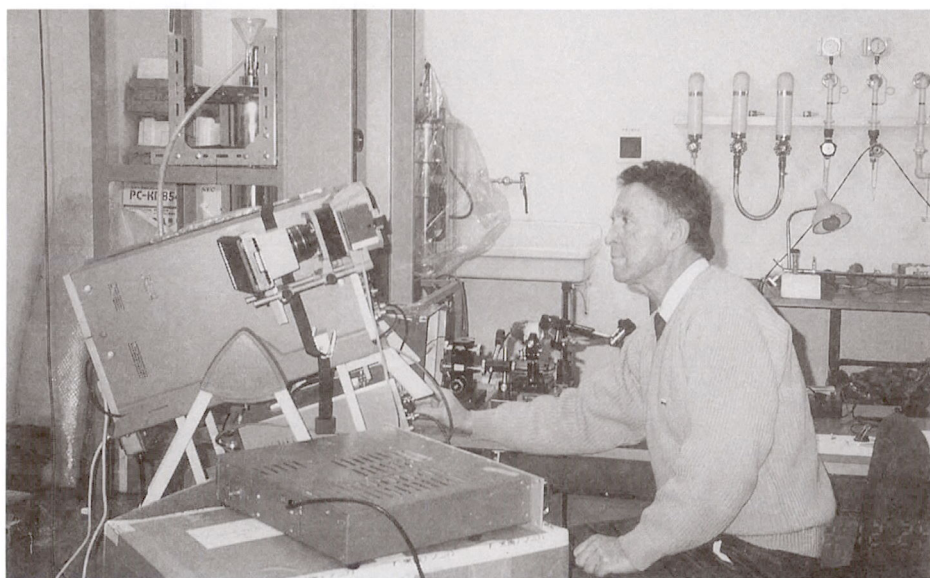
(ロシア 化学物理エネルギー研究所研究室長)

モスクワにあるロシア科学アカデミーの化学物理エネルギー研究所の研究室長をつとめておられるフランケビッチ教授が、1992年9月より9ヶ月間の予定で分子研客員教授として滞在しておられる。同教授は以前より一貫して有機固体の光電物性、特にその磁場依存性について独特の研究を展開してこられ、この方面の実験、理論の第一人者である。1986年にレーニン科学賞を受賞しておられる。ロシアでも要職についておられるので、果して長期間不在が可能かどうかを心配したが、ロシアの現状の下で長期出張の御希望が実現したものであろう。

62才の御年令にも拘らず、来日直後より新しい実験 ( $C_{60}$  単結晶の光電導に関連した研究) に取組まれ、既にいくつかの成果をあげられた。大変真面目な努力家という印象がつよい。

今回は、ロシア貴族の面影を残した美しい御夫人も来日されており、日本でのショッピングを特に楽しんでおられるとのことである。岡崎での生活をエンジョイして頂くと同時に、いろいろなディスカッションを通じて、独特のアイデアをうかがえれば有難いと考えている。

(丸山有成記)



## 分子エネルギー変換研究部門

Leonid S. Grigoryan 助教授

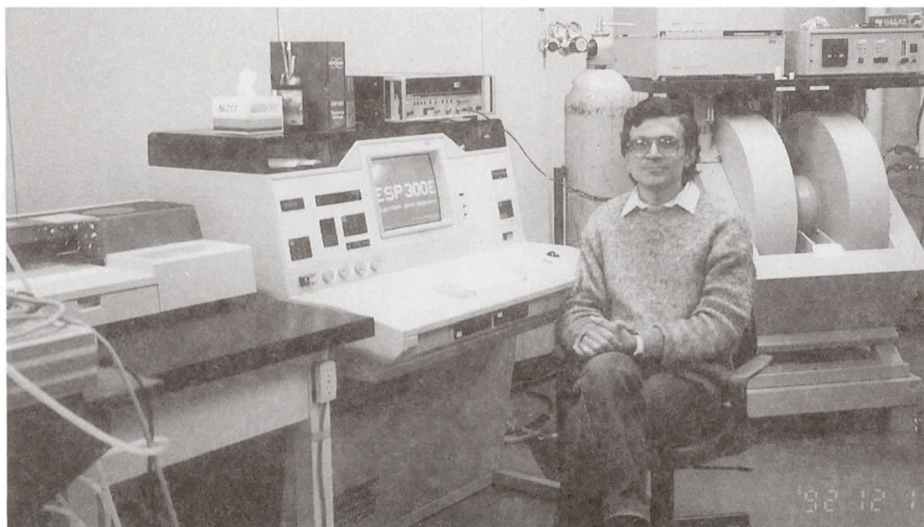
(アルメニア 物理学研究所固体物理及び高温超伝導部門磁気共鳴研究室室長)

グレゴリアン博士は1979年エレバン州立大学物理学科を卒業後、1985年アルメニア科学アカデミー物理学研究所において学位を取得した。現在同研究所において固体物理学研究系磁気共鳴グループのグループリーダーをつとめている。ご専門は固体の磁性に関する分野で、これまでに種々の金属フタロシアニン、銅酸化物超伝導体、フラーレン等の導電性と磁性に関係した研究を手がけてこられた。特にフタロシアニンについてはアルカリ金属をドーピングする事によって常温で強磁性を示す物質を多数発見するなど物理と化学の境界で研究されている。

分子研ではビスマス系酸化物超伝導体 ( $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ) の Bi-O 面にベンゼンや金属フタロシアニンをインターカレートしたユニークな層間化合物を作成してその磁性の研究を始められた。銅酸化物と有機分子という組み合わせが極めてエキゾチックで、本当に層間化合物ができているのかどうか半信半疑であったが、分子研での僅か3ヶ月の研究でその信憑性が非常に高くなってきている。しかもこの物質は常温で強磁性を示すなど今後の発展が期待される。

グレゴリアン博士を一言で表現するならば、沈着果敢という言葉がぴったりである。三島ロジには一家(奥方と2人の小学生の御子息)で住んでおられ、日本の生活にもすっかりとけこんでいる。

(薬師久彌記)



## 極端紫外光研究部門

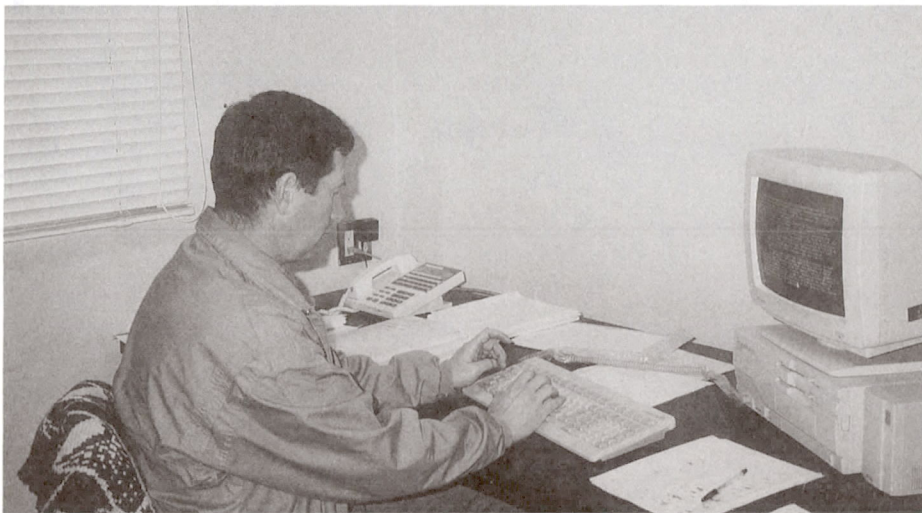
Krzysztof Stefanski 助教授

(ポーランド ニコラス・コペルニクス大学物理科助教授)

ステファニスキ博士は 1950 年ポーランドの首都ワルシャワの南西約 100 km の所にある Lodz に生れ, Torun のニコラス・コペルニクス大学を卒業, 同大学で修士, 博士号 (1981 年) を取得しておられる。学位論文の題目は「Stability investigation of semiclassical stationary solutions and a quantum description of a dye laser threshold region」で, 一次相転移を伴うレーザー系の理論であるが, その後多次元非線形系の問題に興味を持たれ現在に至っている。最近は「Semiclassical quantization of non-integrable systems using approximate integrable Hamiltonians」というレビュー論文を Phys. Reports に出され, アメリカ, 及びイスラエルでの海外共同研究の経験をも持っておられる。分子研滞在中にも「多次元非可積分系の半古典理論」について新しい有意義な協力研究が出来る事を期待している。

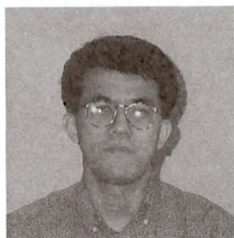
日本文化, 日本語に対する造詣が深く日本の歴史や武士道に関する知識には驚かされる。日本語の日常会話もカタコトながらすでに可能で, 滞在中の大きな進歩(?) が期待される。御家族がポーランドに残っておられるのは残念だが, ご本人は慣れておられる様だ。最後に, 名前 (ファースト・ネーム) を正しく発音出来る方おられますか? カタカナで書くとすると「クシシトフ」が一番近いそうです。苗字の方も「ン」ではなく「ニ」の方が近いそうです。

(中村宏樹記)





## 新任者紹介



### 鈴木 敏 泰

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 助手

平成4年6月カリフォルニア大学サンタバーバラ校大学院化学科博士課程修了。同年10月より現職。有機化学,特に有機超電導体および強磁性体の合成。当分はフラーレンの化学一色になりそうです。アメリカ生活4年,日系一世になる覚悟をしていたが,超不景気で就職はゼロ。思いがけず故郷三河でポジションを得て幸運だと思います。



### 野 村 恵美子

分子構造研究系 事務補佐員

大学卒業後,熊本にある(株)九州 NEC の IC 量産ラインで技術開発の担当を約5年していました。今年の1月に結婚と同時に熊本から岡崎にやってきました。こちらに勤務するようになり,1ヶ月が過ぎました。まだまだ不慣れで御迷惑をかけてばかりの毎日ですが,研究系の皆さんが,仕事のやりやすい環境をつくるつもりで頑張っていきたいと思います。



### 小 杉 信 博

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 教授

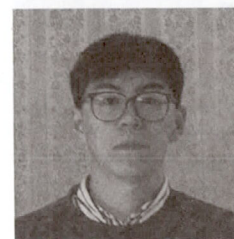
昭和56年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。日本学術振興会奨励研究員,東大理助手,講師,京大工助教授を経て,平成5年1月より現職。専門は放射光による内殻電子の光物性。今まで分子研には理論計算の関係でご厄介になってきましたが,これからはUVSORを利用した実験により放射光科学の発展に貢献したいと考えています。どうぞよろしく。



### 尾 関 博 之

分子構造研究系分子構造第一研究部門 助手

総合研究大学院大学博士課程修了。日本学術振興会特別研究員を経て,平成5年1月より現職。総研大の学生時代から4年近く分子研でお世話になっていましたが,今回研究室を移り,高分解能分子分光に取り組むことになりました。初心を忘れることなく,新しいテーマに意欲的に取り組んでいきたいと思っています。

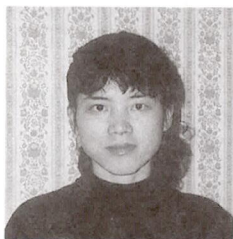


### 戸野倉 賢 一

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 助手

北海道大学大学院理学研究科博士課程修了。日本学術振興会特別研究員を経て,平成5年1月より現職。

専門はレーザー光化学。分子研では気相素反応動力学的研究を行います。めぐまれた研究環境の中,新鮮な気持ちで研究に取り組んでいこうと思います。趣味はサイクリング,登山などです。



## 山 室 憲 子

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 非常勤の講師

平成 4 年 3 月, 大阪大学理学博士の学位を取得。同大学理学部研究生, 兼奈良女子大学理学部非常勤講師を経て, 平成 5 年 1 月より現職。専門は固体物理で, これまで結晶の相転移を主に熱測定を通して扱ってきました。分子研では固体の核磁気共鳴に取組みます。趣味は愛猫と遊ぶことです。よろしくお願いします。



## Krzysztof Stefański

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 文部省外国人研究員

*Permanent affiliation:* Institute of Physics, Nicholas Copernicus University, Toruń, Poland

*Academic record:* I received M.Sc. (1973) and Ph.D. (1981) degrees in physics from the Nicholas Copernicus University. Since Nov. 1983 till Oct. 1984 I was a research associate with Professor Howard S. Taylor at the Department of Chemistry, University of Southern California, Los Angeles. In 1986 and 1988 I worked as a visiting scientist with Professor Eli Pollak at the Chemical Physics Department of the Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel.

*Research Interests:* Various applications of nonlinear dynamics with a special stress on: laser theory, chaotic dynamics in simple discrete-time systems, semiclassical quantization of a few-body bound and scattering systems, dynamical fractals.

*Other fields of interest at a non-research level:* nuclear and elementary particle physics, cosmology.

*Present research project:* At the IMS I have been working with Professor Hiroki Nakamura and Dr. Kiyohiko Someda on semiclassical theory of irregular inelastic and reactive scattering in model molecular systems.

*Hobbies:* Definitely too many—books, biology, helicopters and other aircrafts, ships, drawing, swimming, aikidō and quite a few other things. Non-hobbies though—fishing, chess, and recently, politics.

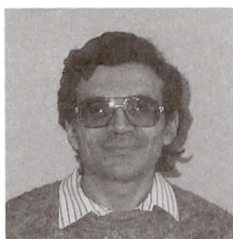


## Jihwa Lee

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 文部省外国人研究員

Seoul National Univ., B.Sc.Eng. in Applied Chemistry, 1972. University of Chicago, Ph. D. in Physical Chemistry, 1976–1980. Stanford University, postdoctor, 1981–1983. Univ. of California at Santa Barbara, postdoctor, 1983–1985. Seoul National Univ., Assistant Professor of Chemical Technology, 1985–1989. Seoul National Univ., Associate Professor, 1990–.

*Research Interests:* Dynamics of adsorption, desorption, and catalytic surface reactions on metal and semiconductor surfaces. Thin film processings and surface modifications using low temperature plasmas and lasers. Currently working in Professor Matsumoto's group on the dynamics of excimer laser-induced desorption and dissociation of SF<sub>6</sub> on Si (100) surface.

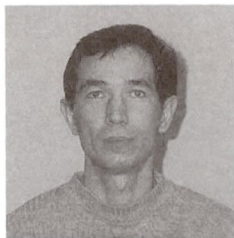


## Leonid Grigoryan

分子集团研究系物性化学研究部門 文部省外国人研究員

My permanent affiliation is in the Armenia, one of the former Soviet republics. Back at home I am the Head of Electron Paramagnetic Resonance Group in the Department of Solid State Physics, Institute for Physical Research, Armenian Academy of Sciences. I received my Candidate of Sciences (Physics) degree (which is approximately equivalent to Ph. D.) in 1985 from the Armenian Academy of Sciences, for study of charge-transfer salts of metal-phthalocyanines and conducting polyaromatic materials. After completing my thesis I worked also in the field of organic ferromagnetism, then switched to high temperature superconductivity, and paid a tribute to the newly emerged fashion - fullerenes. At present time I am trying to combine my "first love" - phthalocyanines and high-Tc superconductors, by intercalating the former into the latter. The resulting very complicated materials exhibit interesting properties which I am studying in IMS together with Prof. K. Yakushi and colleagues from his group.

My hobbies include yoga (with which I was infected during my one-year stay in India as a Visiting Professor), philosophy, soccer and music. Also I am fond of playing chess if there is a strong enough partner. My wife and two children who accompany me in Okazaki, share my opinion that it is a lovely place for work and living.



## Ilias Ikhlasovich Khairullin

分子集团研究系物性化学研究部門 学振外国人特別研究員

Born in 1958 in Tashkent. Graduated in physics in 1980 from Tashkent State University (Uzbekistan, USSR). Ph. D. in Electrophysics in 1991 from the Institute of Chemical Physics USSR Academy of Sciences (Moscow, Russia) under Prof. A. A. Zakhidov.

1980 - Senior Engineer, Tashkent State University;

1984 - Research associate, Institute for Nuclear Physics Uzbek Academy of Sciences;

1988 - Senior Researcher, Department of Thermophysics Uzbek Academy of Sciences (permanent affiliation);

1992 - JSPS Postdoctoral Fellow at IMS.

*Interests/Research Program:* ESR and Microwave absorption in conducting polymers, high-Tc and fullerene based superconductors. The aim of my current work in Professor Yakushi's group is the study of alkali-metal doped thin films, crystals and non-crystalline fullerenes using these techniques.

*Hobbies:* Reading, downhill skiing, carpentry.





## Eugene L. Frankevich

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 文部省外国人研究員

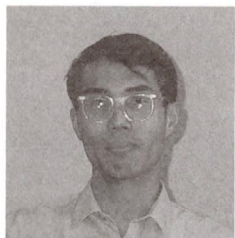
My permanent position is the Head of the Laboratory at the Institute of Energy Problems of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences, Moscow 334, Russia. Before 1987 the Lab belonged to the Institute of Chemical Physics of the Academy of Sciences of the USSR. I am Doctor of Sciences from 1966 and Professor in Chemical Physics at the Institute of Physics and Technology where I am a lecturer on the Physical Methods in Chemistry.

The Lab is engaged in studies of nonequilibrium electronic processes in molecular solids including polymers where electronic excited states, active species and charge carriers are involved. Magnetic Spin Effect and Reaction Yield Detected Magnetic Resonance (RYDMR) techniques were developed in the Lab as tools for studying such processes and allowed to get information on mechanisms of reactions in the condensed phase.

The Lab published more than 250 scientific papers within the fields of Radiation Physics, Organic Semiconductors, Magnetic Spin Effects in Electronic and Free Radical Processes, RYDMR, Photoconductivity of Molecular Crystals and Polymers, I-D Systems.

Here in Japan I am staying for ten months as Visiting Professor and going to study photophysical properties of new organic semiconductors working with Professor Y. Maruyama. We started from fullerene and its complexes.

My wife Irene stays with me and helps me to enjoy the work and life in Japan.



## Yanping Zhang

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 学振外国人特別研究員

*Academic Record:* I received the Graduate Student Awards from European Material Society at Strasbourg (France) and a Ph.D. degree at Goettingen University (Germany). From 1986 to 1992, I used to work as a visiting - Scientist at the Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie in Goettingen (Germany).

*Research Interest:* Basic and applied photochemistry in gas - and adsorbed - phase induced by VUV synchrotron radiation and UV excimer laser. My current work with Professor T. Urisu involves photoreaction induced by VUV synchrotron radiation for materials processing.

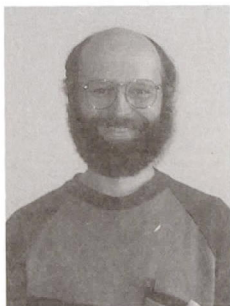
*Hobbies:* adventure, Italian opera, photography, badminton.

## 総合研究大学院大学平成 4 年度（10 月入学）新入生紹介

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	久司 美登	錯体物性	金属錯体による CO <sub>2</sub> の活性化
	Sobolev, Andrej M. (研究生, ~ 5.3.31)	分子構造学第一	The excitation mechanisms of interstellar molecules. 星間分子の励起機構
機能分子科学	Proshlyakov, Denis A.	分子動力学	Resonance Raman Study on Reaction Intermediates of Cytochrome P-450 and Related Proteins



久司 美登



Sobolev, Andrej M.



Proshlyakov, Denis A.

# IMS マシンの成果報告

分子科学研究所・装置開発室においては、その内部機構として「技術開発推進本部」を平成3年度から新しく設置した。この機構は、最近の分子科学関連技術の急速な広がりを考慮して、技術進歩に即応できる態勢を常に確保し、技術協力・技術導入が容易にできることを目的として設けられたものである。本部での最も重要な仕事の一つは、「アイデアの重視」と「所内外と装置開発室との共同開発」を基本とした新しい研究装置（名付けて「IMS マシン」）の企画・技術的調査・設計および試作を行うことである。この組織の専任者は、現在、装置開発室の助手2名（浅香修治、安 正宣）および技官1名（岡田則夫）があたっており、各テーマに応じて研究所内の研究者および技官が加わって共同開発の体制を確保している。将来的には、客員教授（助教授）や民間共同研究者の参加を得てより強固な開発体制を想定しているが、既にその基盤が整備されつつある。このIMS マシンを製作していく作業は、装置開発室の3つの工作セクション（メカトロニクス、エレクトロニクス、およびニューマテリアルセクション）の協力の下に行っている。このようなIMS マシンの創造と装置開発室のもう一つの仕事、サービス業務が両立して始めて装置開発室の責任を果たし得るものと考えている。

IMS マシンのテーマは、1年毎に分子研所内に広く公募し、その申請の中から「IMS マシン選定委員会」によって選定される。平成3年度に採択された課題は以下に示した3課題であり、それぞれに十分な成果を挙げることが出来た。その詳しい内容については、平成4年10月29日（木）の「IMS マシン成果報告会」にて発表されている。その中でも、総研大大学院生（高橋 聡君）から提案された高分解能マルチチャンネルFT 分光器（特許出願中）は、共同開発の過程で予期した以上の進展があり、その成果は分光分野において新しい展開を促すものとして注目に値する。

## 【平成3年度 IMS マシン課題】

### ○高感度・高分解能マルチチャンネルFT 分光器

提 案 者：総研大大学院生 高橋 聡

開発担当：高橋 聡、安 正宣助手、浅香修治助手

### ○超高速サイクリック・ボルタンモグラフ

提 案 者：錯体物性部門 田中晃二教授

開発担当：吉田久史技官（装置開発室）、浅香修治助手、田中晃二教授、長尾宏隆助手（錯体物性研究部門）

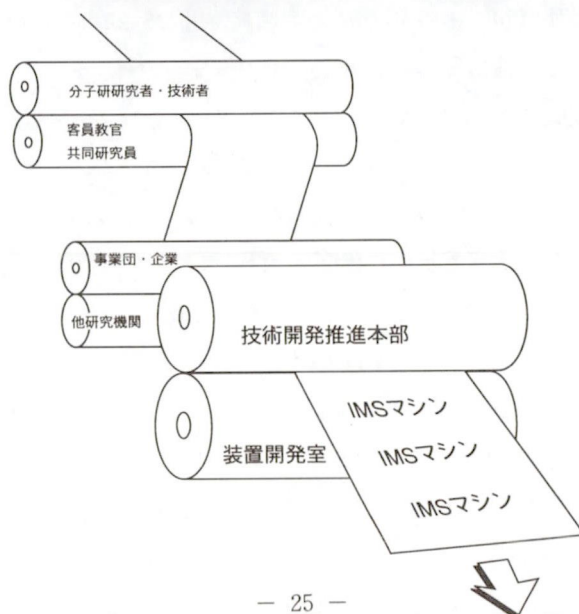
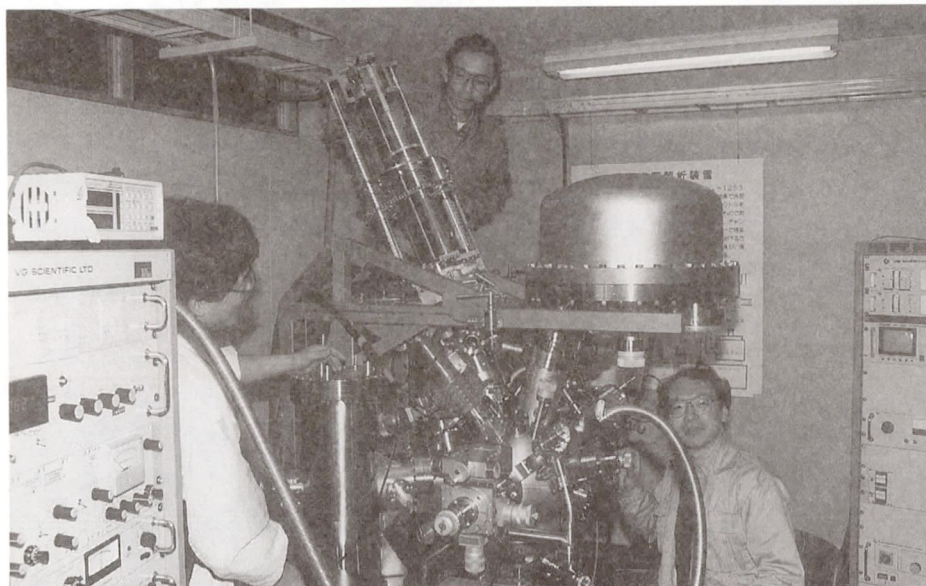
### ○ESCA 装置用極低温試料搬送機構の開発

提 案 者：装置開発室 堀米利夫技官

開発担当：岡田則夫技官，坂東俊治助手（機器センター），浅香修治助手

平成4年度には，新たなテーマが3件と内容を発展させての継続テーマが1件が採択され，いま，その製作中である。このような活動は，新しい装置を次々に生み出すと同時に，技術開発推進本部を中心として，研究者と技術者の間にこれまでにない新しいタイプの知的，技術的交流を創り出していることを付記しておきたい。

（浅香修治記）



## 新装置紹介

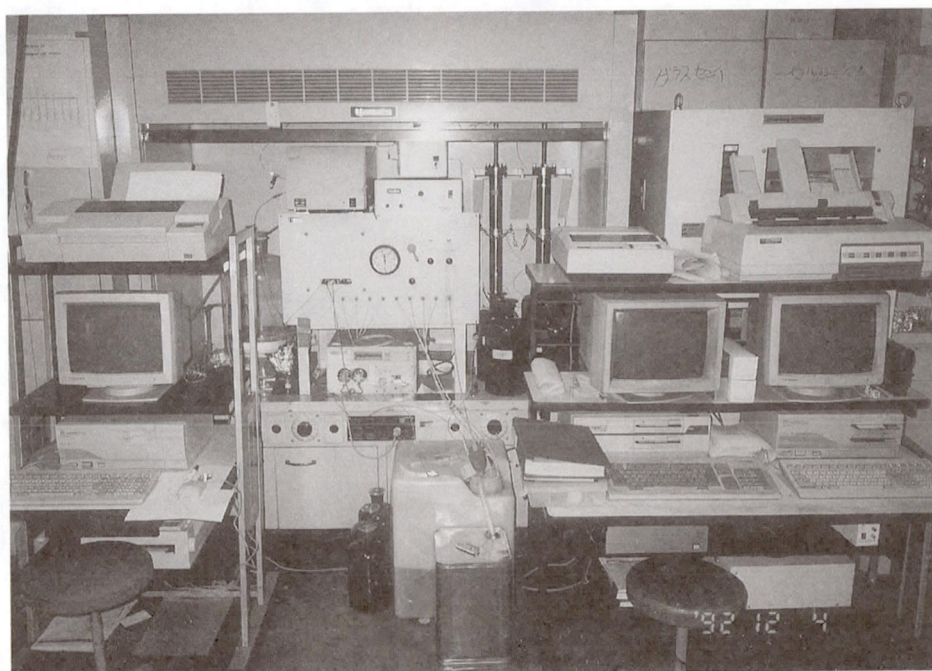
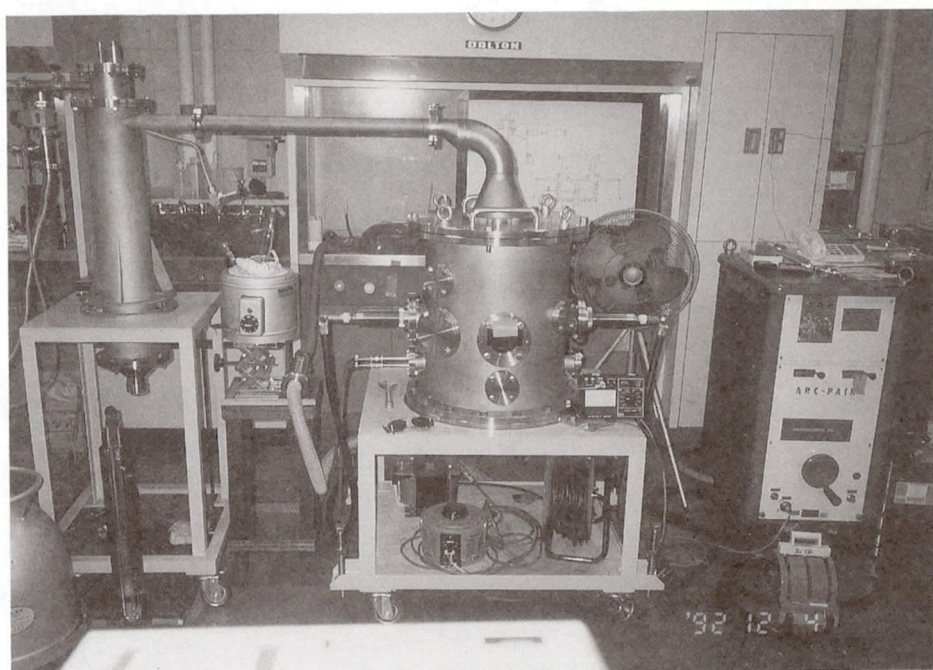
### フラーレン製造システム

最近フラーレンと呼ばれる新しい球状炭素クラスターが発見され、ダイヤモンド、グラファイトと異なる第三の炭素同素体として脚光を浴びており、新しい分子素材としての期待が寄せられている。フラーレン研究に対する関心の高まりによって、C<sub>60</sub>、C<sub>70</sub> 及び高次フラーレン類の効率的なグラム単位の製造が重要な課題となっている。ここに紹介する装置開発室マテリアルセクションに導入されたフラーレン製造システムは高純度(> 99.5%) 大量合成(C<sub>60</sub>; 5g/week)と同時に、高次フラーレンや金属フラーレンの探索を目指した装置で、国内では最大級のものである。

本システムはスス発生装置と分取用高速液体クロマトグラフ装置(HPLC)に大別される。スス発生装置は、スス発生室と回収室に分かれている。スス発生室では、カーボンロッドの電極間にアーク放電させることによりフラーレンを含むススを発生させる。その際金属蒸気を同時に発生させることができる。スス発生室で生成したススは、改造した掃除機(本体はスクラバー付ドラフト内)を用いて、人体に影響を及ぼすことなく、ソックスレー用円筒濾紙に回収される。また発生するススをヘリウムガスフローによって回収室へ導き、噴射トルエンと絡めて液体窒素でトラップすることにより、嫌気下でサンプリングすることもできる。特殊仕様の大型ソックスレー脂肪抽出器により、回収したススからフラーレンを抽出する。各フラーレン成分は全自動大型分取用高速液体クロマトグラフ装置(Shodex AUTOPREP-50)を用いて分離・分取している。溶離液として主にトルエンを用いている。本HPLCシステムでは内径50mmあるいは100mmの大型カラムが使用でき、中流量使用(0.1-150ml/min)と大流量使用(25-250ml/min)のポンプが装備されている。検出器には、UV検出器、RI検出器、及びフォトダイオードアレイUV-VIS検出器(DAD)が用意されており、特にDADでは*in situ*での三次元クロマト解析が行なえる。また、自動試料注入器、3液グラジエント、電磁弁方式リサイクルシステム、フラクションコレクター等が装備されている。本HPLCシステムの最大の特長はカラム部にある。現在ポリスチレン系GPCカラム充填剤を使用しているが、可動栓方式自動カラム充填機構によりカラム充填剤を別のものに簡単に置き換えることができ、フラーレン類の分離に最適な分取用カラムの開発に威力を発揮する。10日間の作業で純度99.5%以上のC<sub>60</sub>とC<sub>70</sub>をそれぞれ5gと1g得ることができる。高次フラーレンの分取については現在進行中である。またDADを利用した分離条件最適化自動システムを備えている分析用HPLC装置(HP 1090M)も用意されている。本フラーレン製造システムの導入により、フラーレン関連の研究がさらに活性化されることが期待される。

(北川 宏記)





## 岡崎コンファレンス報告

### 第 44 回岡崎コンファレンス

#### 化学反応理論の新しい展開

(New Development in Theory of Chemical Reactions)

開催日 平成 4 年 11 月 4 日—6 日

提案代表者 諸熊奎治 (分子研教授)

中村宏樹 (分子研教授)

中辻 博 (京大教授)

岩田末廣 (慶應大教授)

所内世話人 諸熊奎治 (分子研教授)

○中村宏樹 (分子研教授)

招待外国人講演者

H. J. Werner (Univ. Bielefeld, Germany)

T. Ziegler (Univ. Calgary, Canada)

J. Bowman (Emory Univ., U. S. A.)

D. Clary (Cambridge Univ., U. K.)

K. Wilson (Univ. Calif. San. Diego, U. S. A.)

K. Schulten (Univ. Illinois, U. S. A.)

#### 1. 本コンファレンスの趣旨

理論化学は、理論的方法論の改良、新しいアルゴリズムやプログラムの開発、コンピュータの高速化によって、この 10 年ほどの間に定性的理論から定量的理論へと大きな進歩と改革をとげた。このような発展をうけて、電子状態理論、分子反応動力学理論、分子統計理論という理論化学の諸分野の力を結集した化学反応理論の新しい展開が推進されつつある。本コンファレンスでは、異なる理論的アプローチをとる化学反応理論研究者が一堂に会し、化学反応理論の現状と到達点を確認し、問題点を議論するとともに、理論の新展開の方向と将来の可能性を探る事を目的とした。

外国人招待講演者の顔ぶれは、Ab initio 法によって大変精度良いポテンシャルエネルギー曲面の計算に成功している H. J. Werner 教授 (Bielefeld 大, ドイツ), 最近注目を集めている密度汎関数法による電子状態の精度良い評価で着目されている T. Ziegler 教授 (Calgary 大, カナダ), 少数原子系の反応動力学理論でモード選択性の発見など活発な研究を進めている J. Bowman 教授 (Emory 大, アメリカ), 多原子系反応動力学の正確な量子力学的研究で成果を上げている D. Clary 博士 (ケンブリッジ大, イギリス), クラスター内化学反応の分子動力学的研究でユニークな成果を上げている K. Wilson 教授 (カリフォルニア大・サンディエゴ校, アメリカ) 及び分子動力学手法で蛋白質の動力学を調べる精力的研究をしている K. Schulten 教授 (イリノイ大, アメリカ) の 6 名であった。

電子状態, 反応動力学, 凝縮系反応の 3 分野のそれぞれで第一線の研究をしておられる内外の研究者が一堂に会し将来の新しい発展を見据えた有意義な討論を行う事が出来た。

## 2. プログラム

### Nov. 4 (Wed.)

Chairman: K. Morokuma

13:30-13:50	H. Inokuchi (IMS)	Opening Address
13:50-14:35	H. J. Werner (Univ. Bielefeld)	Ab initio Studies of Elementary Reactions
14:50-15:15	----- Coffee -----	

Chairman: H. Nakatsuji

15:15-15:45	S. Iwata (Keio Univ.)	Photoabsorption Spectra and Photodissociation Processes of Some Triatomic Molecules
15:55-16:25	K. Hirao (Nagoya Univ.)	Calculation of Potential Energy Surfaces using Multireference Møller-Plesset Methods
16:35-17:15	S. Yabushita (Hiroshima Univ.)	Applications of Group Theory to the Spin-Orbit CI Method
18:15-	Banquet	

### Nov. 5 (The.)

Chairman: S. Kato

9:00-9:45	T. Ziegler (Univ. Calgary)	Approximate Density Functional Theory as a Practical Tool in Molecular Energetics and Dynamics
10:00-10:30	N. Koga (IMS)	Potential Energy Surface for Reactions of Transition Metal Olefin Complexes
10:40-11:00	----- Coffee -----	



		Chairman: A. Tachibana
11:00-11:45	J. Bowman (Emory Univ.)	Quantum Calculations of Mode Selectivity in Atom-Triatom Reactions
12:00-13:30	----- Lunch -----	
13:30-14:00	Y. Fujimura (Tohoku Univ.)	Reaction Dynamics of Molecules and Ions in Strong Laser Field
14:10-14:40	H. Nakamura (IMS)	Some Fundamentals of Chemical Reaction Dynamics
14:50-15:10	----- Coffee -----	

		Chairman: K. Sakimoto
15:10-15:55	D. Clary (Cambridge Univ.)	Quantum Reactive Scattering of Polyatomic Molecules
16:10-16:50	K. Yamashita (Inst. Fundam. Chemistry)	Theoretical Study on the Dynamics and Spectroscopy of Reactive Transition States
17:00-	----- IMS Tour -----	

Nov. 6 (Fri.)

		Chairman: H. Hosoya
9:00-9:45	K. Wilson (Univ. Calif. San Diego)	Reaction Dynamics in the Gas-Phase in Solution
10:00-10:20	----- Coffee -----	
10:20-10:50	I. Ohmine (IMS)	Relaxation and Chemical Reactions in Liquid and Cluster Water
11:00-11:40	K. Kitaura (IMS)	Ab initio MO Scheme for Solvated Molecule
11:40-13:30	----- Lunch -----	

		Chairman: M. Nagaoka
13:30-14:15	K. Schulten (Univ. Illinois)	Elementary Reactions in Proteins
14:30-15:00	H. Tatewaki (Nagoya City Univ.)	The Electronic Band Structure of $\text{LiF-Li}_n^+ \text{F}_m^-$ Cluster Embedded in Ionic Cage
15:10-15:20	K. Morokuma	Closing Remarks

### 3. 講演および討論要旨

講演はプログラムを見て分る通り、電子状態理論、反応動力学理論、凝縮系の反応理論の順番で進められた。

電子状態理論は更に小さい分子を扱うセッションと大きい分子を扱うセッションに分けられた。小さな分子の反応のポテンシャル面に関するセッションでは、先ず Werner が簡単な素反応の高精度 *ab initio* ポテンシャル面の計算結果を  $F + H_2$ ,  $Li + HF$ ,  $OH(X^2\Pi, A^2\Sigma^+) + H_2$  について発表した。たとえば、 $Li + HF$  については、 $Li^+ F^-H$  電子配置と  $LiF^-H^+$  電子配置の擬交差を正しく記述するため、大きな基底関数系と状態平均 MCSCF 法が必要なこと、 $OH + H_2$  の反応でも電子状態の間の円錐型交差の記述が重要なことなどを強調した。岩田は  $SiH_2$ , FCO の光解離反応のポテンシャル面について、平尾は最近提唱した多参照 Moller-Plesset 摂動理論について、藪下はスピン軌道 CI 法の理論とその ICN の光解離反応などへの応用について論じた。大きな分子の反応についてのセッションでは、Ziegler が密度汎関数の最近の進展を論じ、非局所補正項を加えることによって計算の信頼度が飛躍的に増大したことを示すとともに、Co 錯体によるヒドロフォルミル化触媒反応や Si 錯体による  $\sigma$ -メタセシス反応のポテンシャル面への応用を論じた。古賀は、*ab initio* 法を用いた、Zr 錯体触媒によるオレフィンのヒドロシリル化反応の研究結果を発表した。

反応動力学理論のセッションでは先ず Bowman が、4 原子系 ( $H_2 + CN$  や  $H + HOD$  等) における原子移行反応を回転自由度に関する断熱近似 (次元低減化近似) を用いる事によって量子力学的にかなり精度よく扱いうる事を示した。反応断面積や反応速度定数を良い精度で能率良く評価出来る。また、振動モードに関するモード選択性が見られるという興味ある事実を紹介した。藤村は、最近のホットな話題の 1 つであるレーザー場による分子の動的過程の制御について論じた。特に  $H_2^+$  のレーザー場による ATD (above-threshold dissociation) 及び  $HgI_2$  における解離のレーザー場による抑制の可能性について話した。中村は、3 原子系反応の超球座標による取扱い、大きな系における自由度分離の手法としての分離曲面解析の提唱、重なり共鳴と RRKM 理論の関係の明確化、Landau-Zener 問題の厳密解と新近似解の紹介及び非断熱トンネルを利用したスイッチングの可能性の提唱を行った。Clary は、 $H + H_2O$ ,  $OH + CO$ ,  $H_2 + CN$  等の 4 原子系の原子移行反応動力学を超球座標を用いて量子力学的に正しく取扱うという精力的計算を紹介した。全自由度をちゃんと取扱っている訳ではないが、それでも 3 次元固有値問題を DVR (離散変数表示) で解くなど現時点で最も進んだ計算である。最後に山下は、最近興味が持たれている遷移状態分光を理論的により強力に進める為に、複素エネルギー固有値を求める為の複素 DVR

法の開発及び3次元量子波束の時間発展を精度良く行う為の計算方法の開発について話した。

多体系の化学反応現象のセッションでは溶液内化学反応，生体内化学反応，固体，クラスターに関する講演が行われた。まず，カリフォルニア大学サンディエゴ校の Kent Wilson 教授が気相でのレーザーによる反応コントロールの例を取り上げ  $I_2$  光解離， $HOCl$  のオーバートーン励起による解離の最近の研究の話をし，この反応が溶液内で如何に変化するかの予想を行った。またこれらの反応の位相空間での様相をウイグナー表示を用いて示した。次に溶液内化学反応における遷移状態にいたる溶媒分子から溶質分子（反応系）へのエネルギー供給の仕方が溶媒分子によって大きく異なり，アルゴンではその運動エネルギーが，水中ではポテンシャル・エネルギーが溶質へ受け渡されることを示した。また溶媒中での Evans-Polany 則にふれその様相を示し溶液中では溶媒分子の揺らぎが遷移状態に達する並進運動エネルギーを供給している事を示唆した。X線パルスなどの Ultra-fast の実験法の新しい可能性にもふれ実験と理論が如何に反応機構の解明に融合すべきかなど非常に幅広い講演であった。講演の最後にこれらの反応に関する3次元立体映画が上映され，反応の具体的な様子が示されると同時に，Wilson 教授が自ら選んだ色調，音楽に反応分子のスターウォーズを楽しんだ。イリノイ大学の Klaus Schulten 教授は生体内化学反応の例として，生体膜内でのバクテリオ・ロドプシンの光反応異性化と，生体光合成中心の電荷移動過程について最近の研究を発表した。バクテリオ・ロドプシンでの光異性化過程では，生体膜，蛋白質をまともに取り入れた分子動力学計算を行い，それらが用意する場において如何に反応が進行するかを示し，最近の Ippen らの実験事実（200 フェムト秒で異性化が完了する）を説明した。この膨大な計算には自らの研究室で開発したパラレル・コンピューターが用いられておりその構成，性能の説明も行われた。つぎに，光合成中心の電荷移動反応に於て電荷の移動に伴う緩和過程に言及し，緩和を決めている要因を調べた。また蛋白質の構造変化揺らぎの様相を示した。この緩和に依って反応の一方向性（逆方向の電荷移動が起こらない）が如何に決っているかを明らかにした。この様相をスピنبソンのモデルを用いて解析を行った。分子研の高峰は水の溶液とクラスターのダイナミックスに於て水素結合のネットワークの性質が如何に効いているかを示し，北浦は自ら開発した分子間相互作用の記述法を用いて行った，幾種類かの分子の溶液，クラスター，結晶構造などの解析に関する発表を行った。名古屋市大の館脇は固体  $LiF$  の電子状態が，クラスターの電子状態とマーデリング・ポテンシャルによって如何に記述し得るかの詳細な研究について発表を行った。

## 国際協力事業報告

### 日本・イスラエル共同研究事業

本国際協力事業は平成2年度から3年度文部省国際学術研究（共同研究）として認められたもので、ヘブライ大学のフリッツ・ハーバー分子動力学研究センター（R. D. Levine 教授が当初のセンター長）と分子科学研究所（中村宏樹が日本側代表者）の間の理論を主とした共同研究事業である。Levine 教授と井口所長の間で旅費・滞在費に関する約束を含めた覚書を交していた。研究題目は「分子動力学と化学反応性に関する研究」である。御存知の通り、イスラエルは人口400万位の小さい国であるが、基礎科学の研究水準は非常に高く、特に上記分野では世界をリードする位の立場にさえある。

平成2年には例の湾岸戦争で派遣計画を一部変更せざるを得ない事態になり、運営の難しい面はあったが有意義な共同研究を行う事が出来たのではないかと考えている。

第一回合同シンポジウム（於エルサレム、諸熊、大峰、中村出席）の開催、第二回合同シンポジウム（於分子研）の開催、若手研究者の派遣と受け入れ（染田（分子研）、山下（基礎研）、Hammerich（ヘブライ大）、馬場（京大））、日本・イスラエル協力の総括的討議及び実験研究における協力の検討（井口分子研所長及び花c分子研教授のイスラエル訪問）等の活動を行った。協力研究では、具体的成果も上っている。第二回合同シンポジウムでは、分子研研究会との合流により他財団（森野基金、仁科記念財団、井上科学振興財団）の援助を得て6名の著名なイスラエル科学者（Jortner, Levine, Haas, Shapiro, Kosloff, Nitzan の6名）を招き有意義な会を持つ事が出来た。（本号、分子研研究会「分子動力学と化学反応性」の報告を参照）。日本の研究水準の高さに感銘を受けたというイスラエル人参加者の印象を伺う事が出来たのは大きな喜びである。

平成4年度で本国際学術研究は一応終るが、第二回シンポジウムにおいてこのような交流と協力の事業を更に継続していく事の意義が双方によって確認・合意された。今後、分子研所長初め多くの方々のお力添えを得て新たな展開を目指して努力して行きたいと思っている。

（中村宏樹記）

## 第4回日中合同シンポジウム

### ——有機固体における導電性及び それに関連した現象について——

標記シンポジウムが、平成4年10月27日より10月29日までの間分子研において開催された。これは、1983年の北京での第1回シンポジウム以来、中国と日本で交互に2年おきに開催しているもので、今回はその4回目にあたる。因みに、第2回は1986年に分子研で、第3回は1989年天安門事件の直前に中国合肥で行われた。

今回は、中国側からは北京の化学研究所を中心に各地より25名の研究者が、日本側は47名が参加し、それ以外の分子研からの任意参加者を含めると計70～80名の会合であった。中国側参加者の大部分は、10月25日大阪空港で入国し、同夕岡崎に到着した。翌日は、岡崎市内の三菱自動車とユニチカの両工場を昼食をはさんで見学し、夕方から日本側参加者をまじえてのレセプションが行われ、旧交あるいは新交を暖めた。

会議は27日朝より開始され、中国側と日本側がほぼ交互に口答発表を行い、大変活発な討論もなされた。口答発表は40件、又27日夕刻に行われたポスターセッションでは27件の発表があった。発表の内容は、ポリアセチレン、ポリアニリン等の導電性（機能性）ポリマーの新しい諸問題、BEDT-TTF塩を中心とする有機導体・超伝導体の合成と物性、LB膜、光電子分光、有機非晶体、有機磁性、フラーレン等であった。詳しくはプログラム又は要旨集（残部多少あり）を参照されたい。論文、討論の内容は、会を重ねる毎に高まっており今回は現時点でのこの分野の非常にホットな問題について行われたといえる。

10月29日午後4時頃に3日間の会議を終え、分子研ツアーを行った。又、翌30日は研究所のマイクロバス等で浜松方面に出かけ、新工業団地（電線総合技術センター）、浜松ホトニクスを見学し、夜は三ヶ日簡保センターで一泊し交歓を行った。翌31日はフラワーパーク、浜名湖、太平洋等を観光し、夕刻無事岡崎に帰着した。大部分の方々は翌日大阪空港から帰国されたが、何人かの方はさらに何日間かを日本国内に滞在されるべく各地へ向われた。

以上が今回の日中シンポジウム及び関連行事のあらましである。なお今回の開催にあたり、資金の面では井上科学振興財団、東京応化科学技術振興財団、大幸財団、中部電力基礎研究所の御援助をうけた。又、開催中は管理局の方々及びサングリア（サンフード）の御協力を得た。紙面を借りて御礼申し上げる。

なお、第5回シンポジウムは1995年に中国浙江大学で開催される予定である。中国の方々の

たくましいエネルギーと暖かさが改めて印象に残った一週間であった。

(丸山有成記)



## The IVth China-Japan Joint Symposium Program

### *Oct. 27 (Tuesday)*

Chairperson Maruyama, Y.

- |             |  |                     |   |
|-------------|--|---------------------|---|
| 9:00-9:10   | Opening address  | 井口洋夫 (Inokuchi, H.) |   |
| 9:10-9:35   | 銭人元 (Qian, Renyuan)  |                     | 1 |
|             | Some physical properties of free standing polypyrrole film                                 |                     |   |
| 9:35-10:00  | 白川英樹 (Shirakawa, H.)   |                     | 3 |
|             | Synthesis of highly conducting polyacetylene films by solvent-free ziegler-natta catalysts |                     |   |
| 10:00-10:25 | 景遐斌 (Jing, Xiabin)   |                     | 5 |
|             | Preparation, structure and doping property of sulfonated polyaniline                       |                     |   |
| 10:25-10:45 | Coffee or Tea Break  |                     |   |

Chairperson Jing Xiabin

- |             |   |  |   |
|-------------|---|--|---|
| 10:45-11:10 | 李永舫 (Li, Yongfang)  |  | 7 |
|             | Effect of solution anions on the electropolymerization of pyrrole |  |   |
| 11:10-11:35 | 田仲二郎 (Tanaka, J.)   |  | 9 |
|             | Electronic structure of metallic polyacetylene                    |  |   |

11:35-12:00	穆 紹 林 (Mu, Shaolin)	11
	The photoelectrochemical properties of poly-o-methylaniline	
12:00-13:30	Lunch	
	Chairperson Tanaka, J.	
13:30-13:55	斎藤軍治 (Saito, G.)	13
	Organic superconductors based on BEDT-TTF	
13:55-14:20	吳 培 基 (Wu, Peiji)	15
	Preparation and properties of the new organic conductor (BEDT-TTF) <sub>3</sub> Cu <sub>2</sub> Cl <sub>4</sub>	
14:20-14:45	安西弘行 (Anzai, H.)	17
	The effect of guest molecules for crystal growth of (BEDT-TTF) <sub>2</sub> Cu(SCN) <sub>2</sub>	
14:45-15:10	矢持秀起 (Yamochi, H.)	19
	Structural factor to produce $\kappa$ -type BEDT-TTF salts	
15:10-15:30	Coffee or Tea Break	
	Chairperson Zhu, Daoben	
15:30-15:55	王 萍 (Wang, Ping)	21
	Physical properties and structure properties of a novel quasi three-dimensional organic conductor (BEDT-TTF) <sub>4</sub> Cu(C <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	
15:55-16:20	村田惠三 (Murata, K.)	23
	20K transition in $\beta$ -(BEDT-TTF) <sub>2</sub> I <sub>3</sub> in relation to high T <sub>c</sub> - and low-T <sub>c</sub> superconducting phases	
16:20-16:45	張 殿 林 (Zhang, Dian-Lin)	25
	Raman spectroscopy of the $\lambda_d$ -phase (BEDT-TTF) <sub>2</sub> I <sub>3</sub>	
16:45-17:10	鹿野田一司 (Kanoda, K.)	27
	Fermi-surface topology and superconductivity in molecular conductors	
17:10-17:35	泉岡 明, 菅原 正 (Izuoka, A., Sugawara, T.)	29
	Organic metal and semiconductors derived from novel twin-ET donors	
17:35-19:30	Dinner	
	Chairpersons Hoshi, H. and Wu, Peiji	
19:30-21:30	Poster Session	

**Oct. 28 (Wednesday)**

	Chairperson Yakushi, Y.	
9:00-9:25	王 佛 松 (Wang, Fosong)	31
	Polyanilines with different structures	
9:25-9:50	井口洋夫, 李 永 舫 (Inokuchi, H., Li, Yongfang)	33
	Electrical and thermal properties of cytochrome c thin films	
9:50-10:15	劉 去 圻 (Liu, Yunqi)	35
	Synthesis of a novel disubstituted polydiacetylene derivative and characterization of its Langmuir-Blodgett film	
10:15-10:35	Coffee or Tea Break	

	Chairperson Liu, Yunqi	
10:35-11:00	袁仁寬 (Yuan, Renkuan) Faraday magneto-optical effect of polyaniline	37
11:00-11:25	李鉄津 (Li, Tiejin) Structure and properties of some organized functional films	39
11:25-11:50	松本睦良 (Matsumoto, M.) Conducting LB films of metal-dmit, BO and related compounds	41
11:50-13:30	Lunch	

	Chairperson Mitani, T.	
13:30-13:55	那須奎一郎 (Nasu, K.) New aspects of many-electron system coupling strongly with nonlinear phonons	43
13:55-14:20	小谷正博 (Kotani, M.) Excitonic photoemission from organic photoconductors	45
14:20-14:45	黄頌羽 (Huang, Songyu) Study of the characteristic of the metal-free phthalocyanine/aluminum (H <sub>2</sub> Pc/Al) Schottky barrier	47
14:45-15:10	関一彦 (Seki, K.) Photoemission study of merocyanine dye-AgBr interfaces in relation to spectral sensitization	49
15:10-15:30	Coffee or Tea Break	

	Chairperson Li, Tiejin	
15:30-15:55	城田靖彦 (Shirota, Y.) Hole transport in amorphous molecular materials	51
15:55-16:20	毕先同 (Bi, Xian-Tong) Studies on liquid crystalline electrical conductive composite	53
16:20-16:45	松崎 晋 (Matsuzaki, S.) Electrical conductivity measurements at high pressures by use of a diamond anvil cell	55
16:45-17:10	秦金貴 (Qin, Jingui) A new type of molecular structure for SHG: tetragonal pyramidal coordination compounds	57
17:10-17:35	今枝健一 (Imaeda, K.) Hall effect observation in the new organic semiconductor BTQBT	59
18:30-	Banquet	

**Oct. 29 (Thursday)**

	Chairperson Saito, G.	
9:00-9:25	朱道本 (Zhu, Daoben) Preparation and characterization of Langmuir-Blodgett films of C <sub>60</sub> and C <sub>70</sub>	61
9:25-9:50	傅荣堂 (Fu, Rong Tang) Bond distortion and layer structure in charged C <sub>60</sub>	63
9:50-10:15	徳本 圓 (Tokumoto, M.) Superconductivity and Magnetism of doped C <sub>60</sub>	65
10:15-10:35	Coffee or Tea Break	



	Chairperson Bi. Xiantong	
10:35-11:00	严 继 民 (Yan, Ji-Min) Electronic structures of alkali--containing AC <sub>60</sub> (A = Li,Na,K,Rb,Cs) and conductivities of the solids alkali-containing AC <sub>60</sub> and alkali-doped A <sub>x</sub> C <sub>60</sub> (x = 0 → 6)	67
11:00-11:25	日野照純 (Hino, S.) Photoelectron spectra of higher fullerenes and their potassium complexes	69
11:25-11:50	丸山有成 (Maruyama, Y.) Some aspects of electrical conduction in metal-doped C <sub>60</sub>	71
11:50-13:30	Lunch	
	Chairperson	
13:30-13:55	張 德 清 (Zhang, Deqing) Magnetic studies on a series of α-nitronyl nitroxide radicals	73
13:55-14:20	榎 敏明 (Enoki, T.) Organic conductors with magnetic ions	75
14:20-14:45	三谷洋興 (Mitani, T.) Photoconductivity, luminescence, and photoinduced absorption in the M-X chain compounds	77
14:45-15:10	田島裕之 (Tajima, H.) Magnetoresistance and reflectance spectra of M(dmit) <sub>2</sub> salts	79
15:10-15:30	Closing Remark	

## Oct. 27                      Poster session (19 : 30-21 : 30)

	Chairpersons Hoshi, H. and Wu, Peiji	
P-1	吳 培 基 (Wu, Peiji) The synthesis of organic donor cycle-ET	81
P-2	小松徳太郎 (Komatsu, T.) Structural and physical properties of θ-(BEDT-TTF) <sub>2</sub> Cu <sub>2</sub> (CN)[N(CN) <sub>2</sub> ] <sub>2</sub>	83
P-3	松川 望 (Matsukawa, N.) Isotope effect of κ-(BEDT-TTF) <sub>2</sub> Cu(CN)[N(CN) <sub>2</sub> ]	85
P-4	常 友 明 (Chang, You-ming) The crystal, molecular structure and electrical conductivity of 3-cyano-5-(2-(3-ethyl-2-benzothiazolidene ethylidene)-4-phenyl-2-(5H)furanone	87
P-5	朴 弘 烈 (Park, H. Y.) Magnetic properties of one-dimensional metal complexes: K[M {S <sub>2</sub> C <sub>2</sub> (CN) <sub>2</sub> }] <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O (M = Ni, Pd, Pt)	89
P-6	岩崎賢太郎 (Iwasaki, K.) Crystal structures of metallic and insulating molecular complexes between (TSeN)(BTDA-TCNQ) and (TSeN)(BTDA-TCNQ)(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Cl)	91
P-7	山下敬郎 (Yamashita, Y.) Cation radical salts of Bis(1, 3--dithiole)donors containing a 1, 2, 5-Thiadiazole unit	93

P-8	芥川智行 (Akutagawa, T.) Multi-electron and proton transfer in Biimidazole (Hx-BIM; $x = 0 \sim 4$ ) derivatives	95
P-9	叶 成 (Ye, Cheng) Growth of NPP crystal and investigation of its structure by using AFM	97
P-10	叶 成 (Ye, Cheng) Synthesis of nonlinear optical polymers	99
P-11	田中彰治 (Tanaka, S.) Novel quinonoid polymers containing thieno[3,4-c]thiadiazole units	101
P-12	橋本慎平 (Hashimoto, S.) Electrical conduction in BTQBT and its related compounds	103
P-13	李 鉄 津 (Li, Tiejin) Recognition improved monolayer formation on air-water interface	105
P-14	孫 克 治, 中原弘雄 (Sun, Ke Zhi, Nakahara, H.) The molecular orientation and electrical behaviors in the LB films of phthalocyanine derivatives with eight alkyl chains	107
P-15	張 文 斌 (Zhang, Wenbin) In-situ conductivity, Raman and photoluminescence spectroelectrochemical studies on poly(3-methylthiophene)	109
P-16	白 鳳 蓮 (Bai, Fenglian) Study of the fluorescence spectra in poly(3-hexylthiophene) solution	111
P-17	穆 紹 林 (Mu, Shaolin) Bioelectrochemical activities of the polypyrrole uricase electrode	113
P-18	李 素 珍 (Li, Suzhen) Synthesis of conductive PPY-PVK composites by laser-enhanced electrochemical polymerization	115
P-19	黃 頌 羽 (Huang, Songyu) Carrier transport mechanism in organic solid solar cell of p-n junction	117
P-20	袁 仁 寬 (Yuan, Renkuan) Photoelectric transformation process of p-PAN/n-Si heterojunction	119
P-21	楊 慕 杰 (Yang, Mujie) A novel photoconductive thermoplastic holographic material based on polyphenylacetylene	121
P-22	稻田安治, 那須奎一郎 (Inada, S., Nasu, K.) Enhancement, reduction and inversion of isotope effects due to anharmonic phonons	123
P-23	田中一義, 山邊時雄 (Tanaka, K., Yamabe, T.) Magnetic properties of fullerenes	125
P-24	岩野 薫, 那須奎一郎 (Iwano, K., Nasu, K.) Nonlinear optical spectra in MX-chains	127
P-25	劉 忠 範 (Liu, Zong-Fan) X-ray photoelectron spectroscopic studies of pseudomonas-cytochrome $c_{551}$	129
P-26	周 淑 琴 (Zhou, Shuqin) Carrier transport properties of poly (substituted phenyl acetylene)s	131
P-27	周 淑 琴 (Zhou, Shuqin) X-ray photoelectron spectroscopy characteristic of a novel organic semiconductor BTQBT and its derivations	133

## 研究会報告

# 「振動分光法による物質の時間・空間変化の追跡 ——時間・空間分解赤外ラマン分光——」

阪大工 中 島 信 一  
関学大理 小 山 泰  
分子研 北 川 禎 三

この数年間、赤外・ラマン分光の技術、特にパルスレーザー技術と顕微赤外・ラマン分光技術の発展が目ざましく、高精度の時間分解、空間分解スペクトルを測定できるようになってきた。これらの手法は化学の分野では、励起状態の分子構造、光化学反応中間体の分子構造、不均一系の物質分布、界面の構造、表面吸着分子の構造や電極反応等の解析に応用されてきている。物理、工学の分野では励起電子の緩和過程の研究や結晶成長過程、局所的な構造及び組成の変化過程の研究に応用されており、更に界面、表面原子（分子）の結合状態を調べる事も可能になってきた。このような物質の時間的、空間的变化の検出を対象とした振動分光学的研究の最近の発展をふまえ、標題の研究会が平成4年6月29日、30日、7月1日の3日間にわたって開催された。そのプログラムは下に示すとおりである。

この研究会の特色の一つは、化学と物理、理学と工学という、普段は学会を異にするため顔を合わすことの少ない研究者が一堂に会して意見を交換する事にある。この研究会では化学と物理からはほぼ同数の参加者があった。以前にも分子研で同じような振動分光学的研究会が開催され、化学と物理の人がお互いに用語の意味がわからず、定義を尋ね合う光景が見られたが、今回の研究会ではそのような言語の障害(?)はほとんどなく、共通の土台でつっこんだ討論のできたことは非常に有意義であった。時間・空間分解振動分光法は、現在では対象物がまだ限られているが、今後その範囲が広がると共に、時間と空間を同時に分解する研究が進展することを期待したい。

# プログラム

【6 /29 日】

午 後

開会挨拶

中島 信一（阪大 工）

[座長] 櫛田 孝司

13:00-13:40

濱口 宏夫（神奈川科学技術アカデミー）

時間分解振動分光法：ピコ秒時間分解ラマンおよび100 ナノ秒時間分解赤外分光法

13:40-14:20

高橋 博彰（早大 理工）

時間分解ラマン分光法による励起分子の構造

[座長] 濱口 宏夫

14:20-15:00

佐藤 信一郎・浅野 素子・北川 禎三（分子研）

ボルフィリン及び金属ボルフィリン励起状態の時間分解共鳴ラマンスペクトル

15:00-15:20

休 憩

15:20-16:00

伊藤 紘一（早大 理工）

時間分解ラマン分光法による電極表面でのヘプチルピオローゲンの還元過程の研究

[座長] 北川 禎三

16:00-16:40

竹内 英夫・丸山 輝彦・大塚 美和・原田 一誠（東北大 薬）

膜結合ペプチドの可視および紫外ラマン分光—アミノ酸側鎖の膜内位置解析

16:40-17:20

小山 泰（関学大 理）

時間分解（過渡）ラマン分光法の光合成色素への応用

＜懇 親 会＞

【6 /30 日】

午 前

[座長] 高橋 博彰

9:00-9:40

櫛田 孝司・渡辺 純二・栗田 厚（阪大 理）

溶液中色素分子の光スペクトルと緩和のダイナミクス

9:40-10:20	小林 孝嘉・Scott Hale・吉沢 雅章（東大 理） フェムト秒ラマン利得スペクトルとフォノン媒介シュタルク効果
10:20-10:40	休 憩
	[座長] 小山 泰
10:40-11:20	岡本 裕巳・伊名波 良仁・吉原 經太郎・田隅 三生（東大 理・分子研） フェムト秒時間分解 CARS による分子振動ダイナミクスの実時間観測
11:20-12:00	増谷 浩二・坂本 章・古川 行夫・田隅 三生（日本電子㈱・東大 理） 時間分解フーリエ赤外／ラマン分光法
午 後	
	[座長] 新井 敏弘
13:00-13:40	中島 信一・播磨 弘（阪大 工） SiC 結晶内の積層欠陥の空間分布
13:40-14:20	末元 徹（東大 物性研） 高分解能ラマンと時間分解ラマン
	[座長] 潮田 資勝
14:20-15:00	黒田 規敬・酒井 政道・仁科 雄一郎（東北大 金研） 白金錯体における圧力誘起二相共存相の顕微ラマン分光
15:00-15:20	休 憩
15:20-16:00	Brian J. E. Smith (RENISHAW Transducer Systems Ltd.) Raman Imaging and Spectroscopy
	[座長] 山本 恵一
16:00-16:40	坂本 謙二・潮田 資勝（東北大 電通研） 表面吸着分子膜のラマン散乱断面積
16:40-17:20	前田 敏輝・佐々木 芳郎・堀江 忠児・大沢 雅俊（石巻専修大 理工） ラマン分光法による硫酸水溶液中 Pt 電極表面反応のその場観察

17:20-18:00 邑瀬 和生・松田 理・井上 恒一（阪大 理・阪大 産研）

GeSe<sub>2</sub> ガラスの中距離構造と光誘起結晶化

【7 / 1 日】

午 前

[座長] 小林 雅通

9:00- 9:40 尾崎 幸洋・片山 詔久・藤本 安彦・寺下 慎一（関学大 理）

赤外ラマン分光法による単分子膜の構造評価

9:40-10:20 梅村 純三・竹田 諭司・竹中 亨（京大 化研）

脂肪酸とその金属塩 LB 膜の熱安定性—基板からの距離依存性

10:20-10:40 休 憩

[座長] 中島 信一

10:40-11:20 小林 雅通・金子 文俊（阪大 理）

顕微赤外ラマン分光法による長鎖分子の結晶成長と相転移

11:20-12:00 古川 行夫（東大 理）

近赤外ラマン分光とその導電性高分子研究への応用

午 後

[座長] 邑瀬 和生

13:00-13:40 薬師 久彌（分子研）

顕微分光法を用いた電荷移動錯体の研究

13:40-14:20 新井 敏弘・大成 誠之助・田中 順章（筑波大 物工系）

半導体超微粒子のラマン散乱

14:20-15:00 林 真至（神戸大 工）

固体マトリックス中の微結晶成長とラマン散乱

閉会挨拶 小山 泰

# 「構造制御された多中心金属イオンによる 複合反応場の設計」

研究会代表者 北大触研セ 市 川 勝

分子研 田 中 晃 二

所内世話人 分子研 磯 邊 清

近年、合成された金属クラスター化合物および複合多核錯体を用いて人工的な窒素ガス、炭酸ガスの還元あるいは水の光分解反応を組み立てる研究がさかんになりつつある。また金属や複合金属の集積効果に基づく高効率の触媒的な炭化水素の選択酸化反応、(CO 変換反応や不斉合成反応) を目指した研究も精力的に行なわれている。一方、多数の金属イオンを分子中の三次元空間に合理的にしかも構造を制御しつつ配列することにより分子認識度の高い局所構造を精密合成する研究もこの数年の間に飛躍的に発展した。こうした配位子空間に集合した金属イオンの特徴を活かした反応場の設計のための総合的な学理的研究は極めて重要である。

本研究会では上記三分野の研究者を一堂に会し、将来の大きな目標として“多中心金属イオンの集合配列を制御して、効率の良い電子プロトン移動、物質変換を行なう動的触媒反応場を分子構築する”指針を得ることを目的とした。

第一セッションでは多中心金属イオンの合理的配列による新化合物の合成：単核種のセルフアセンブリー反応あるいは多面体構成単位の縮合反応等による複合酸化状態の金属イオンをもつクラスター化合物、マイクロ反応場としての無機細孔内超分子多核錯体の合成の開発と理論的考察について討論した。またそれらの新化合物の構造、結合（金属—金属，金属—炭素，金属—イオウ等）および反応性の特徴を明らかにし、複合反応場の分子構築に向けての基礎的データを提出した。

第二セッションでは、金属イオンの集積効果を利用した触媒機能：金属錯体クラスターや配位子空間を含めて複合多核錯体をどの様に構造制御すれば高効率でしかも高度な分子認識度を有する触媒活性中心を分子構築することができるか？を主題にし、金属イオンの集積効果とその配位子空間の構造制御が触媒反応場に及ぼす影響について明らかにした。

第三セッション—多段階プロトン及び電子移動系としての多中心金属錯体：光合成系の酸素発生中心、水の光分解あるいはニトロゲナーゼの窒素固定活性中心などは、多中心金属イオンの巧

三日間 28 名の発表によるかなりハードなスケジュールにもかかわらず終始活発な議論があり、本研究会の目的は十分に達せられた。尚、参加者は、約 60 名であった。以下にプログラムを示す。

14:30-14:40 開会の辞 市川 勝（北大・触研セ）

## 第一セッション

座長 磯邊 清

14:40-15:10 配位不飽和な二核ルテニウム錯体による不飽和炭化水素の活性化  
鈴木 寛治 (東工大・工)

15:10-15:40 単核ならびに複核錯体の電子状態と反応性  
古賀 伸明・諸熊 奎治 (分子研)

15:40-16:10      チオラートを架橋配位子とする複核ルテニウム錯体の合成とその特  
異な反応性      千綱 眞信（東大・工）

16:10-16:30	休憩
-------------	----

座長 田中 晃二

16:30-17:00  $\mu$ -エチンジール複核錯体の合成と性質  
高橋 成年 (阪大・産研)

17:00-17:30 ジチオレンを配位した鉄—硫黄クラスターの合成, 構造, 反応  
萩野 博 (東北大・理)

17:30-18:00 銅クラスターから銅錯体ポリマーまでの構造制御と機能付与  
北川 進（都立大・理）

18:20-20:00 懇親会

◆ 6 月 26 日 (金)

座長 北川 進

9 :00- 9 :30 酸化物クラスターを用いた反応場 磯邊 清 (分子研)

9 :30-10:00      ヘテロポリアニオン上での触媒反応場の設計と分子状酸素を用いた  
選択酸化反応      水野 哲孝 (北大・触研セ)

10:00-10:30	Raft 型クラスター錯体の合成と構造	齋藤 太郎 (東大・理)
-------------	---------------------	--------------



10:30-10:50 休 憩

## 第二セッション

座長 堂免 一成

10:50-11:20 表面—分子相互作用系の理論的研究 中辻 博 (京大・工)

11:20-11:50 金属カルボニルの表面光化学—サブカルボニル種の作製とその反応性 佐藤 真理 (分子研)

11:50-12:20 Breathing Ru カーバイドクラスターの触媒作用 岩澤 康裕 (東大・理)

12:20-13:40 昼 食

座長 高橋 保

13:40-14:10 Group 6 金属カルボニルによるゼオライト細孔を反応場とするジェンの立体選択的水素化反応 岡本 康昭 (阪大・基礎工)

14:10-14:40 金属クラスター錯体を利用する複合反応場の設計 市川 勝 (北大・触研セ)

14:40-15:10 層空間を利用する反応場の構築 堂免 一成 (東工大・資源研)

15:10-15:30 休 憩

座長 水野 哲孝

15:30-16:00 C<sub>60</sub> ポリマーパラジウム錯体の合成と触媒作用 伊藤 健児 (豊橋技科大・物質工学)

16:00-16:30 遷移金属ケテン錯体の還元反応—二核ビニロキン金属錯体を經由するエチレングリコールの生成 宮下 晃 (埼玉大・工)

16:30-17:00 ジルコノセン錯体と有機マグネシウム化合物による複合反応場の設計 高橋 保 (分子研)

17:00-17:20 休 憩

座長 福住 俊一 (阪大・工)

17:20-17:50 不斉水素化触媒と分子認識 高谷 秀正 (京大・工)

17:50-18:20 シクロデキストリンを用いるポルフィリンの機能制御 黒田 裕久 (京大・工)

18:20-18:50 有機リガンドによるクラスターのラッピング 山村 剛士 (東京理大・理)

## ◆ 6月27日 (土)

## 第三セッション

座長 鈴木 正樹

- 9 :00- 9 :30             $\text{Fe}_4\text{S}_4$  クラスターへの多段階プロトン化反応  
田中 晃二, 神林 秀 (分子研)
- 9 :30-10:00           鉄—硫黄クラスターと芳香環の相互作用, モデル錯体による研究  
上山 憲一 (阪大・理)
- 10:00-10:30           金属錯体及びプロトンの電子移動触媒作用  
福住 俊一 (阪大・工)

10:30-10:50           休憩

座長 山村 剛士

- 10:50-11:20           疏水性ビタミン  $\text{B}_{12}$  の電気化学的触媒機能  
久枝 良雄 (九大・工)
- 11:20-11:50           二核化配位子による  $\mu$ -パーオキシ鉄及びコバルト錯体の酸素親和  
性制御  
鈴木 正樹 (金沢大・理)
- 11:50-12:20           金属たんぱく質の活性部位モデルとなる 2 核鉄及びマンガン錯体の  
合成とその 2 電子酸化還元挙動  
諸岡 良彦・北島 信正 (東工大・資源研)
- 12:20-12:40           研究会の総括と閉会の辞  
大瀧 仁志 (分子研)

# 「分子動力学と化学反応性」

分子研 大 峰 巖

最近の化学反応動力学の研究の発展は目ざましく、非経験的分子軌道法、素反応動力学理論、溶液理論等を駆使して、その研究対象は素反応の詳細な動力学因子の決定、固体表面反応、触媒反応、溶液内反応、またレーザーによる反応動力学の制御性などへと広がってきており、分子ビームやピコ、サブピコ秒などの実験法の発展と相俟って飛躍的にその内容が豊かに成ってきている。本研究会は分子研、大峰、中村、花崎が提案者となり、Levine, Jortner, Kosloff, Shapiro, Nitzan, Haas 教授らのイスラエルの理論及び実験研究者 6 名が来日する機会をとらえ 1992 年 11 月 13 日—15 日の 3 日間に渡り開かれた。日本側の講演者は理論 10 名、実験 6 名であった。会場に響き渡る Jortner 教授のクラスターのサイズ効果に関する講演に始まり、分子動力学の諸分野、とくに

- (1) クラスターの構造、反応、物理的性質、
- (2) 素反応や表面反応のポテンシャルエネルギー面と化学反応性に関する理論、
- (3) 溶液内化学反応〔特に電荷移動反応〕のダイナミックスの理論、溶液の揺らぎに関する理論、
- (4) レーザーによる反応のコントロールの理論、
- (5) 広範な化学反応動力学の実験研究、

など幅広い研究分野の発表が行われ活発な討論がなされた。

研究会のプログラムは以下のとおりである。

13 (Tue)

9:30-9:50	Opening Remarks; Inokuchi, Jortner
9:50-10:50	J. Jortner, Energetic and Dynamic Size Effects in Clusters
10:50-11:10	----- Coffee -----
11:10-11:35	T. Nagata, Photo-and Collision-Induced-Dissociations of Ar Cluster Ions
11:35-12:00	S. Iwata, Photoabsorption and Photodissociation of $\text{Ar}_n^+$ Clusters
12:00-12:30	R.D. Levine, Exploration of Phase Space with Special Reference to Raman Spectroscopy
12:30-12:50	----- Coffee -----
12:50-13:15	S. Kato, Theoretical Studies of the Dynamics of Photochemical Processes in Solution
13:15-13:40	K. Someda, A Generalized Langevin Equation Satisfied by Wave Function
13:40-14:05	K. Kitahara, Fluctuations in Chemical Reactions and Hydrodynamics under Nonequilibrium Conditions

16:05-16:25	----- Coffee -----
16:25-16:50	I. Ohmine, A Theoretical Study of Dynamics of Hydrogen Bond Network Systems
16:50-17:15	H. Nakatsuji, A Theoretical Study on Halogen Chemisorption on Alkali Metal Surface
17:15-17:40	Y. Matsumoto, Photochemistry of N <sub>2</sub> O Adsorbed on Metal Surfaces
18:30-	Banquet
14 (Wed)	
9:30-10:30	M. Shapiro, Coherent Control and Adiabatic Passage of Molecular Dissociation
10:30-10:50	----- Coffee -----
10:50-11:15	Y. Fujimura, Reaction Dynamics in Strong Laser Fields
11:15-11:40	H. Nakamura, Theory of Nonadiabatic Transition
11:40-12:05	S. Tsuchiya, Spectroscopy of Vibrational Chaos in Highly Excited Polyatomic Molecules
14:15-15:15	R. Kosloff, Explicit Time Dependent Methods of Quantum Mechanics
15:15-15:30	----- Coffee -----
15:30-15:55	K. Morokuma,
15:55-16:55	A. Nitzan, Simulations of Nonadiabatic Processes in Condensed Phases
16:55-17:10	----- Coffee -----
17:10-17:35	K. Yoshihara, Observation of Direct and Solvent-Controlled Electron Transfer in Femtosecond timescale
17:35-18:00	M. Tachiya, Solvent Effect on Electron Transfer Rates and the Energy Gap Law
15 (Thrs)	
9:30-10:30	Y. Haas, Jet-Cooled Exciplexes: Are They Intermediates in Biomolecular Reactions?
10:30-10:50	----- Coffee -----
10:50-11:15	I. Hanazaki, The Lambda-doublet Formation in the OH Radical Produced in Chemical Reactions
11:15-11:40	H. Shobatake, Vacuum UV Photochemistry Rg..Cl <sub>2</sub> (Rg=Xe,Kr) van der Waals Complexes
11:40-12:05	K. Mitsuke, Positive Ion-Negative Ion Coincidence Spectroscopy of H <sub>2</sub> and O <sub>2</sub>
12:05-12:15	Concluding Remarks; Nakamura
14:00-	IMS Tour

## 分子研コロキウム

- 第 557 回    平成 4 年 9 月 2 日    極性分子の液晶におけるリエントラント相転移と分子運動  
(宮島 清一)
- 第 558 回    9 月 9 日    画像観測法による帰相反応の研究    (鈴木 俊法)
- 第 559 回    9 月 16 日    有機金属フォトニクス—フォトクロミック有機金属化合物の分子設計と  
光情報記憶ストレージへの応用—    (宮下 晃)
- 第 560 回    9 月 30 日    効率的な電子伝達系構築に基づく酸化反応    (平尾 俊一)
- 第 561 回    10 月 6 日    Electron-deficient Boranes as Novel Electron-donon Ligands  
(N. N. Greenwood)
- 第 562 回    10 月 21 日    高酸化活性フラビンを用いる酸化反応    (矢野由美彦)
- 第 563 回    11 月 18 日    ポリエーテル錯体の溶液内反応と構造    (澤田 清)
- 第 564 回    11 月 25 日    自然輻射寿命を決めるマイクロ分子環境の解明    (平山 鋭)
- 第 565 回    12 月 2 日    CIDNP 検出 ESR 法による反応中間体ラジカルの研究    (安積 徹)
- 第 566 回    平成 5 年 1 月 13 日    振動分光法によるオキシエチレン化合物のコンホメーショ  
ンの研究    (松浦 博厚)
- 第 567 回    1 月 20 日    有機伝導体における強磁場電子状態    (大嶋 孝吉)
- 第 568 回    1 月 27 日    有機金属錯体の手法を用いる  $\pi$  共役導電性高分子の合成と物性  
(山本 隆一)

## 共同研究採択一覧

### 平成5年度（前期）共同研究

#### 課 題 研 究

励起金属原子の緩和と反応

○東工大理	網島 滋	慶應大理工	岩田 末廣	分 子 研	富宅喜代一
岡 山 大 理	山本 峻三	福岡女短大	笠谷 和男	東大教養	山内 薫
東工大理	梅本 宏信	分 子 研	美齊津文典		

#### 協 力 研 究

多原子分子の高振動励起状態に関する理論的研究	工業技術院化技研	青柳 睦
水のエネルギーゆらぎに関する理論的研究	京大工	田中 秀樹
AIO ラジカルの電子構造の分光学的解析	長岡技科大	伊藤 治彦
シュタルク効果を用いた3次元電界強度分布計測	群馬大工	高橋 佳孝
励起状態におけるプロトン移動の共鳴ラマン分光法による研究	愛媛大理	長岡 伸一
ハロゲン架橋金属錯体における光キャリアのダイナミクス	東北大科学計測研	岡本 博
一次元白金錯体のミッドギャップ吸収帯	東大教養	松下 信之
Caged 化合物を用いた生体反応極限計測法の開発	大阪大理	岡本 明弘
食細胞 cytochrome b558 のヘム鉄の配位構造と電子伝達機構の共鳴ラマンスペクトルによる解析	東大医科研	上野 郁子
共鳴ラマン分光法によるチトクローム P-450 の反応機構の研究	慶應大医	江川 毅
共鳴ラマン分光法によるヘモグロビンの構造と機能に関する研究	金沢大医療技術短大	長井 雅子
ラマン分光法による有機超薄膜の特性評価	東北大科学計測研	高橋 正彦
金属入りフラーレンとその錯合体の分子構造及び電子状態に関する研究	東京都立大理	鈴木 信三

フラーレン類の電気化学的酸化機構の解明	名大教養	小山 宗孝
フォトフラグメント分光法によるアセトアルデヒドの光 解離反応における磁場効果の研究	北大工	太田 信廣
フロー形式熱交換熱量測定法による化学振動反応の研究	お茶の水女子大理	藤枝 修子
非線形化学反応における光効果の研究	奈良教育大	松村 竹子
d <sup>10</sup> 閉殻中心金属錯体の最低励起状態の磁氣的、分光学 的性質	東北大理	池田 滋
気相化学反応の外部磁場効果	静岡理工科大	住谷 實
導電性フタロシアニン錯体の合成と物性	千葉大工	松本 和雄
Pd-dmit 錯体の高圧下での偏光反射スペクトル	東邦大理	内藤 俊雄
活性炭素繊維の構造と物性	東工大理工	中山 敦子
ポルフィリンキノン遷移金属錯体を用いた分子集合体の 合成研究	大阪大産業科学研	杉浦 健一
<sup>13</sup> C-NMR による伝導性有機固体の研究	お茶の水女子大理	河本 充司
超低温における有機伝導体の物性	岡山大理	大嶋 孝吉
ルテニウムリン化合物の超伝導	室蘭工大	城谷 一民
有機電荷移動錯体の構造と物性	北大理	稲辺 保
スピנקロスオーバー錯体の蒸着膜の磁氣的性質	東大教養	阿波賀邦夫
陽電子消滅による層状物質の電子構造の研究	国際基督教大	佐野 瑞香
有機超伝導体の開発	京大理	斎藤 軍治
RbH-GIC の NMR	東工大理	榎 敏明
シクロホスファゼン誘導体液晶の <sup>31</sup> P 及び <sup>1</sup> H NMR	岐阜大工	守屋 慶一
一次元混合原子価錯体のスピンドYNAMIX	名大理	浅地 哲夫
金属錯体によるプロトン移動と共役した電子移動系の構 築	三重大教育	芳賀 正明
超不安定化合物, チエピン及びチエピンオキシドの合成 [3.3] シクロファン類の遷移金属錯体の合成と物性	大阪教育大	西埜敬太郎
ランタノイド触媒を用いるグリコシル化反応	九大理	新名主輝男
白金族元素と金属酸化物イオンによる多核錯体の合成	九大理	花本 猛士
多機能性不斉金属錯体の合成と応用	北大理	馬越 啓介
	高知大理	小槻日吉三

有機結晶の構造規則：ドナー，アクセプター交互カラム の形成と固体物性の解明	長岡技科大	小林 健二
ポリアリーール環を有する不斉素子の合成と構造	九大理	稲永 純二
鉄多核錯体の反応性	金沢大理	林 宣仁
多核金属錯体の合成における金属原子配列の制御	姫路工大理	小澤 芳樹
金属ポルフィリンの物性研究	京大理	永田 央
中性子補捉療法のための新キャリアーの合成	東北大理	山本 嘉則
新規機能性触媒の分子設計	熊本大工	大久保捷敏
アントラセン—アルゴン錯体カチオンの光電子振動スペ クトルの研究	北陸先端科技大	木村 克美
ルプレンのファンデルバルス錯合体形成と分子内緩和 大きなクラスター中の電子緩和	京都工繊大繊維 大阪府立大総合科	平山 鋭 田中富士雄
有機金属気相成長法による化合物半導体の作製及び評価	佐賀大理工	郭 基新
サイト選択蛍光法による非晶質系の振動モードに関する 研究	大阪大理	兼松 泰男
芳香環の縮環したイリデンマロノニトリル類の研究	日本大工	向井 利夫
金属錯体結晶の構造異性に伴う相転移とガラス転移	東工大理	小國 正晴
機能性錯体の物性と溶液内挙動	お茶の水女子大理	益田 祐一
テトラケトナートで架橋した二核及び多核金属錯体の合 成と物性	福井大工	星野 由雅
アミノポリホスホン酸の錯形成	新潟大理	鈴木 俊雄
混合キレート配位子錯体の合成，構造及び性質	新潟大教養	湯川 靖彦
金属ポルフィリンの短寿命反応中間体の構造	佐賀大理工	田端 正明
非イオン性界面活性剤の錯形成反応と構造	岩手大教育	菊地 洋一
白金族イオン溶媒和錯体のX線構造解析	東工大総合理工	鈴木 炎
光合成系Ⅱにおけるマンガンクラスターのモデル化	金沢大理	鈴木 正樹
ポリピリジニルテニウム多核錯体の合成及び光励起 CO <sub>2</sub> 還元への応用	大阪大理	古江 正興
混合錯体触媒系を用いたアミン合成に関する研究	埼玉工大	岩崎 政和
抗腫瘍性貴金属錯体と生体分子の相互作用の研究	東大理	宮本 健



複素環芳香族配位子錯体の合成と利用

お茶の水女子大生活科

小川昭二郎

多核金属錯体の構造解析

東北大理

伊藤 翼

有機ラジカル金属錯体の構造と電子状態

東北大理

大塩 寛紀

1, 1—ジチオレート配位子とするモリブデン錯体の  
合成

山形大理

鵜浦 啓

## 研 究 会

若手分子科学研究者のための物理化学研究会

筑波大

高橋 央宜

金属錯体のメソスコピック相における化学

大阪大理

海崎 純男

## UVSOR 課題研究

SOR 光による表面光化学反応の研究

○北大触媒セ	佐藤 真理	分 子 研	宇理須恒雄	分 子 研	正島 宏祐
北大触媒セ	栃原 浩	北大電子研	川崎 昌博	東 大 理	岩澤 康裕
静岡大電子研	福田 安生	豊橋技科大	英 貢	阪大基礎工	奥山 雅則
分 子 研	西尾 光弘				

スピン偏極光電子分光測定装置の開発

○分 子 研	鎌田 雅夫	大阪市立大工	藤井 康夫	大阪市立大工	石黒 英治
大阪府立大工	市川 公一	大阪府立大工	曾田 一雄	福 井 大 工	福井 一俊
分 子 研	大原 繁男	分 子 研	田中慎一郎	分 子 研	中川 和道
分 子 研	磯山 悟朗	分 子 研	浜 広幸	分 子 研	渡邊 誠
分 子 研	平谷 篤也	分 子 研	酒井 楠雄	分 子 研	松戸 修
分 子 研	木下 敏夫	分 子 研	蓮本 正美	分 子 研	山崎潤一郎
分 子 研	中村 永研				

## UVSOR 協力研究

偏光光源による多原子分子の光解離励起過程の研究

いわき明星大理工

神田 一浩

HNCO の光分解過程について

東工大理

疋田 巧

UVSOR 光によるハロゲン置換ベンゼン誘導体の励起状  
態の研究

東工大理

市村禎二郎

光励起・衝突励起における発光と解離のダイナミックス	大阪大理	笠井 俊夫
分子一希ガス及び異種希ガス混合ファン・デル・ワール ス分子の光イオン化過程	東工大理	旗野 嘉彦
フラーレンアルカリ金属化合物の光電子分光	東北大理	高橋 隆
角度分解光電子分光法による有機固体薄膜の分子配向・ 電子状態研究	千葉大工	上野 信雄
Ge-L edge スペクトルの酸素吸着効果	金沢大教養	直江 俊一
機能性有機固体の光電子分光	名大理	関 一彦
完全性の高い準結晶の光電子分光	名大教養	森 昌弘
フッ素化合物の蛍光収量法による XANES 分光	名大理	大内 幸雄
イオン結晶の内殻励起発光の励起スペクトルの研究	京都教育大	村田 隆紀
内殻吸収測定によるアモルファスカルコゲナイド半導体 の電子状態の研究	広島大理	細川 伸也
金属リンカルコゲナイドの価電子帯の研究	熊本大自然科学	藤本 斉
InN の光電子分光Ⅱ	福井大工	福井 一俊
電子線照射によりイオン結晶内に形成された金属微粒子 の状態分析	大阪大産業科学研	大脇 成裕
鉄蒸着薄膜の光電子分光	大阪市立大工	藤井 康夫
半磁性半導体の光電子分光	広島大理	谷口 雅樹

## UVSOR 招へい協力研究

新 BL8B1 用気体分光測定装置の整備	京都教育大	伊吹 紀男
BL8B1 新分光器の立上げ	大阪市立大工	石黒 英治
真空紫外分光システムの設計	大阪府立大工	市川 公一
スピン偏極光電子分光装置の製作	大阪府立大工	曾田 一雄

## UVSOR 施設利用

1—Ⅶ化合物ヘテロ構造の光物性	東大教養	江尻 有郷
オージェ・フリー発光スペクトルの時間分解測定	信州大工	伊藤 稔
金属添化物混晶におけるクラスター励起子状態の研究	京都大総合人間	林 哲介

無機ハライド化合物の固有発光の時間分解測定	京都大理	神野 賢一
多結晶半導体ダイヤモンド薄膜の光電子放出特性の評価	大阪大工	平木 昭夫
Ⅲ—Ⅶ化合物における内殻励起子スペクトル	大阪電通大	大野 宣人
液体希ガス中のフラーレン等の光物性	神戸大発達科学	中川 和道
励起子吸収帯の圧力効果	神戸大理	太田 仁
重金属ハライドの光学スペクトル	海上保安大学校	藤田 正実
真空紫外レーザー用ミラーの開発	宮崎大工	黒澤 宏
シリカガラス中の酸素不足型吸収体の構造と第二高調波発生	分子研	川副 博司
BL1B の整備	分子研	鎌田 雅夫
Sc を内包したフラーレンの軟X線吸収スペクトルによる研究	東北大工	田路 和幸
遷移金属塩化物の C12p 内殻励起子の消滅過程	大阪府立大工	市川 公一
ポリエステルフィルムの内殻電子エネルギー分布	鳥取大教養	大内 伊助
電子伝導性 $ns^0$ スピネル系酸化物の電子構造	分子研	川副 博司
電子伝導性酸化物の電子構造の解析	分子研	川副 博司
半導体表面からの光脱離の研究	分子研	田中慎一郎
二価金属ハライド結晶における励起子緩和	福井大工	中川 英之
放射光励起によるヘテロエピタキシャル薄膜の作製と評価	豊橋技科大	吉田 明
極薄蒸着膜表面での光誘起反応過程の研究	和歌山大教育	宮永 健史
SR 光照射によるアルカリハライドからのアルカリ原子の放出	分子研	鎌田 雅夫
多価分子イオンの生成と分解過程の研究	京都教育大	伊吹 紀男
1 ～ 3 価分子イオンの生成と解離過程の研究	大阪市立大工	増岡 俊夫
$NF_3$ 及び $Cl_3SiSiCl_3$ の光イオン化解離	姫路工大理	小谷野 猪之助
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	愛媛大理	長岡 伸一
二原子分子及び $\pi$ 電子系炭化水素分子の一光子直接二重イオン化過程の研究	分子研	奥山 克彦

希ガス固体表面における電子的励起緩和の動的過程	学習院大理	荒川 一郎
極端紫外線領域での反射鏡及び検出器の性能評価	名大理	山下 広順
半導体X線画像検出器の性能評価	大阪大極限物質研セ	有留 宏明
ピコ秒電子分光法の開発 I	神戸大理	桜井 誠
凝縮系に生成する超励起状態からの負イオン生成	分子研	見附孝一郎
多層膜回析格子の効率測定	分子研	渡邊 誠
液体の遠赤外スペクトルと分子の共同的再配向運動	北大理	井川 俊一
超イオン導電体のミリ波分光研究	東北学院大工	淡野 照義
Ti, Ni 酸化物の遠赤外反射スペクトル	東大理	十倉 好紀
水素結合物質のフォノン構造	大阪大基礎工	小林 融弘
KBr 微粒子の遠赤外高圧分光実験	神戸大理	難波 孝夫
BL6A1 の整備	分子研	鎌田 雅夫
NiPS <sub>3</sub> の Ni2p 偏光吸収スペクトルの測定	宇都宮大工	中井 俊一
担体上に生成した金属過酸化物の構造に関する研究	東京学芸大	長谷川 貞夫
シリカに担持された MgO の水添加による構造変化	京都大工	吉田 郷弘
Ni-MgO 固溶体中の NiL 殻吸収スペクトル (2)	京都大工	田中 庸裕
ペロブスカイト型物質の構造相転移における局所構造の研究	岡山大理	西畑 保雄
多孔質シリコンの軟X線吸収と発光	鳴門教育大	松川 徳雄
電子伝導性 p-block ns <sup>0</sup> 酸化物の伝導帯構造	分子研	川副 博司
ウィグラー光利用のための整備 (Ⅲ)	分子研	渡邊 誠
希土類酸化物の真空紫外反射スペクトルの測定	東北大科学計測研	木村 真一
BaF <sub>2</sub> , CsCl, CsBr, RbF などのオージェ・フリー発光の研究	立教大理	窪田 信三
非晶質シリカ中の点欠陥及び希土類イオンの真空紫外域での光学的性質	早稲田大理工	大木 義路
筋線維及び筋蛋白質の低温時分割偏光発光	名大理	谷口美恵子
アセチルグリシンオリゴマーとL-グルタミン酸オリゴマーの真空紫外スペクトル	名工大	岡林 博文
半導体微粒子含有ガラスの紫外反射率	三重大工	松岡 純

シアン化アルカリにおける相転移と励起子スペクトル	京都教育大	橋本 哲
蛍光スペクトル・蛍光寿命解析による固体内部環境の研究	香川大教育	川瀬 雅也
RDX 結晶の光学スペクトル	分子研	鎌田 雅夫
BL7B の整備	分子研	鎌田 雅夫
50nm 分解能を持つ X 線顕微鏡の開発と生物像観察への応用	自治医大看護短大	木原 裕
UVSOR を用いたダイヤモンドの成膜	名大工	後藤 俊夫
2 光源光 CVD プロセスに関する研究	名大先端技術共同研セ	森田 慎三
極端紫外光を用いた薄膜形成初期過程の解明	豊橋技科大	吉田 明
放射光による回析格子の製作	大阪市立大工	石黒 英治
SOR 光による蓄積フォトンエコー	香川大教育	伊藤 實

## 施設利用実施一覧

### 平成4年度（前期）UVSOR 施設利用

層状絶縁体（雲母）の光物性	信州大工	伊藤 稔
金属沃化物混晶における励起電子緩和のエネルギー依存性	京大教養	林 哲介
$\sigma$ 発光減衰特性の時間分解測定	京大理	神野 賢一
Cu <sub>2</sub> Sb 型結晶の光反射スペクトル測定	大阪大基礎工	菅 滋正
超臨界希ガス中にドーブしたフラーレン等の光吸収・光イオン化スペクトルの測定及び光イオン化機構の研究	神戸大教育	中川 和道
層状結晶中の内殻励起子の偏光特性	海上保安大	藤田 正実
真空紫外レーザー用ミラーの特性評価	宮崎大工	黒澤 宏
BL1B の整備	分子研	鎌田 雅夫
共鳴光電子分光によりアルカリ塩化物の Cl <sub>2p</sub> 内殻励起子の消滅過程の研究	大阪府大工	会田 修
ポリエステルフィルムの偏光内殻吸収スペクトル	鳥取大教養	大内 伊助
銅酸化物高温超伝導体の Cu-M <sub>33</sub> 吸収スペクトル	鳴戸教育大	松川 徳雄
BL2B1 の整備	分子研	鎌田 雅夫
半導体表面の光電子分光（Ⅲ）	分子研	田中慎一郎
イオン結晶における光励起状態の動的性質	福井大工	中川 英之
電子励起 SiCl <sub>3</sub> ラジカルの発光測定	京都教育大	伊吹 紀男
極紫外光照射によるイオン結晶表面光誘起反応過程	和歌山大教育	宮永 健史
SOR 光励起エッチング過程における脱離化学種の検出	分子研	正畠 宏祐
放射光励起エピタキシーによる半導体ヘテロ界面の作製と評価	分子研	吉田 明
アンジュレーター光照射による励起アルカリ原子の放出	分子研	鎌田 雅夫
BL3A1 の整備	分子研	鎌田 雅夫
1-3 価分子イオンの生成と解離過程の研究	大阪市大工	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	愛媛大理	長岡 伸一
希ガス原子及び分子の単一光子二重イオン化過程の研究	分子研	奥山 克彦

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
磁性半導体 $Gd_2S_3$ の遠赤外反射スペクトル	東北大科学計測研	木村 真一
超イオン導電体のミリ波分光研究	東北学院大工	淡野 照義
氷の高圧相の遠赤外分光	大阪大基礎工	小林 融弘
$La_2NiO_4$ の磁場下遠赤外スペクトル	神戸大理	本河 光博
微粒子の遠赤外超高压分光実験	神戸大理	難波 孝夫
電解質溶液による遠赤外吸収	愛媛大理	百々 太郎
遠赤外ビームラインの整備	分子研	鎌田 雅夫
銅酸化物高温超伝導体の $Cu_{2P}$ 吸収スペクトルの測定	宇都宮大工	中井 俊一
ASTRO-D 衛星搭載用 GIS 装置の較正	東大理	牧島 一夫
2, 3 の酸化物に担持した Na 系触媒の NaK - エッチ XAFS による構造解析	東京学芸大	長谷川貞夫
X線望遠鏡の反射率測定	宇宙研	山下 広順
CCD の X 線光学特性	大阪大理	常深 博
軟 X 線分光素子の回折効率の測定	大阪市大工 (分子研)	石黒 英治
$PO_4$ 四面体の局所構造解析によるリン酸 2 水素カリウム系 強誘導体の相転移機構の解明	関西学院大理	寺内 暉
半導体微粒子分散光機能高分散膜における半導体の電子構 造	香川大教育	川瀬 雅也
$Zn_{1-x}Fe_xS$ 及び $Zn_{1-x}CO_xS$ の X 線吸収	分子研	渡邊 誠
ウィグラー光利用のための整備	分子研	渡邊 誠
希土類酸化物の真空紫外反射スペクトル	東北大科学計測研	池沢 幹彦
合成シリカガラスの塩素に起因する研究	東工大工材研	橋本 拓也
アルカリ・ハライド混晶系におけるオージェ・フリー発光 の研究	立教大理	窪田 信三
シリカガラスにおける真空紫外光励起発光スペクトル	早稲田大理工	大木 義路
筋蛋白質の低温時分割蛍光分光	名大理	谷口美恵子
BL7B の整備	分子研	鎌田 雅夫
ゾーンプレートを用いた X 線顕微鏡によるウェット試料の 観察	自治医大看護短大	木原 裕
SOR 光によるインコヒーレントホトンエコー IV	香川大教育	伊藤 寛

吸着層の SOR 光による光分解を利用した ZnTe の MOVPE 成長	佐賀大理工	小川 博司
極端紫外光励起による薄膜形成	分子研	吉田 明
内殻励起による気体分子のフラグメントからの発光	大阪市大工 (分子研)	石黒 英治
Mg 酸化物系有機反応触媒材料の XAFS による構造解析	京大工	田中 庸裕
アセチルグリシンオリゴマーと L-グルタミン酸オリゴマーの真空紫外スペクトル	名工大	岡林 博文
真空紫外窓材料の透過率の測定	分子研	富宅喜代一



## 平成4年度（前期）施設利用 (I) 機器利用

ポルフィリン金属錯体の分子内磁氣的相互作用の機構	北大理	藤井 浩
電子スピン共鳴 (ESR) によるトラッキング劣化の検討	福島工専	鴨沢 勅郎
柔粘性イオン結晶の相転移と分子運動	筑波大	池田 龍一
抗腫瘍性白金化合物の化学	東大理	宮本 健
ピロリン酸ニオブにおける不定比性の研究	東大理	井本 英夫
PbO 薄膜の電子構造	沼津工専	浜渦 允紘
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
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
粉体の形状による物性の変化	豊橋技科大	角田 範義
$\text{Ca}_{2-x}\text{Ln}_x\text{MnO}_4$ (Ln = 希土類) の相転移	豊橋技科大	高橋 純一
有機物/a-SiO <sub>2</sub> 複合材料の光物性に関する研究	愛知工大	高橋 欣弘
金属超微粒子の電子状態の研究	三重大教育	佐光三四郎
アルカリ金属二原子分子の状態間相互作用と磁気前期解離	京大教養	馬場 正昭
ミスフィット層状化合物 (RES) <sub>1.2</sub> NbS <sub>2</sub> (RE = 希土類) の磁氣的研究	京大理	寺嶋 太一
3 元系銅硫化物 A-Cu-X (A = Na, K, Rb, Cs, X = S, Se) の構造と物性の研究	京大理	佐藤 博彦
新規な電子供与体を用いた有機伝導体の開発	京大工	御崎 洋二
有機導電性材料の構造と物性に関する研究	京大工	西尾 悟
有機磁性材料の構造と物性に関する研究	京大工	高田 明
有機磁性材料の構造と物性に関する研究	京大工	伊藤 彰浩
2 成分超微小金属粒子の生成	京大原研	東野 達
アルカリ金属二原子分子の励起状態の解離ダイナミックス	神戸大理	加藤 肇
色素の高励起状態の蛍光寿命測定	福岡女子大家政	笠谷 和男
化合物半導体エピタキシャル膜の結晶学的・光学的評価	佐賀大理工	小川 博司
有機典型化合物の磁氣的性質について	岐阜大工	村井 利昭
熱音響振動系における非線形動力学と熱伝達について	愛知教育大	矢崎 太一
金属錯体の溶液中及び固体状態での分光学的性質	愛知県立大	田浦 俊明
遷移金属酸化物系の結晶構造	筑波大	小野田雅重

有機磁性金属の設計と構築	東大教養	泉岡 明
準結晶合金単結晶の磁性	名大教養	松尾 進
金属間結合をもつ白金族錯体	大阪市大理	大井俊一郎
金属微粒子，薄膜の結晶学的研究	名大教養	西田 功
トランスノルボルナンジアミンを配位子とする金属錯体の合成	愛知県立看護短大	斎藤 玲子
超微粒子の極低温での比熱測定法の確立（断熱法と DSC 法との比較）	鈴鹿工専	大矢 弘男
芳香族有機結晶の高励起状態からの発光	学習院大理	加藤 隆二
アミノポリホスホン酸錯体の溶液内構造	新潟大理	鈴木 俊雄
錯体の構造と反応及び溶液内挙動	愛教大	中島 清彦
遷移金属錯体触媒を用いる新規触媒反応の開発	京大工	太田 哲男
有機導電性材料の構造と物性に関する研究	京大工	吉沢 一成
複核金属錯体の反応性と溶存状態に関する研究	奈良女子大理	阿部百合子
電子伝導性酸化物の電子構造の解析	東工大総合理工	小俣 孝久
電子移動反応における不安定中間体の構造と反応性に関する研究	名大工	石黒 勝也
・ ビタミン B <sub>6</sub> 型反応モデルとしてのケチミン型中間体を經由するピリドキシリデンーアミノ酸 Co（Ⅲ）錯体の合成	名工大	増田 秀樹 橋本 拓也
・ (N)(O) <sub>3</sub> 型光学活性多座配位子を有する Co（Ⅲ）錯体へのアミノ酸の配位選択性		
・ フェノール性多座配位子と鉄（Ⅱ，Ⅲ）イオンとの錯形成反応		
生体関連物質と金属イオンとの相互作用に関する構造化学的研究	豊橋技科大	青木 克之
X線光電子分光によるポリシラン，ポリゲルマンの電子状態の研究	名大理	石井 久夫
超微粒子の物性	姫路工大理	木村 啓作

## 国際交流

### 海外からの招へい研究者

(4.11.1 ~)

#### 1. 評議員

Peter Day (イギリス ロイヤルインスティテューション所長) 4.11. 7 - 4.11.12

#### 2. 外国人客員研究部門

Eugene L. Frankevich	$\left\{ \begin{array}{l} \text{ロシア 化学物理エネルギー研究所 研究室長} \\ \text{アルメニア 物理学研究所固体物理及び高温超伝導部門 磁気共鳴研究室室長} \\ \text{フランス エコールポリテクニク量子光学研究所所長} \\ \text{ポーランド ニコラス・コベルニクス大学物理科 助教授} \end{array} \right\}$	4. 9.10 - 5. 6. 9
Leonid S. Grigoryan		4. 9. 1 - 5. 8.31
Christos Flytzanis		4. 9. 1 - 4.12.31
Krzysztof Stefanski		4.11. 1 - 5. 8.31

#### 3. 文部省招へい外国人研究員

Kim, Sehun	(韓国 韓国高等科学技術院準教授)	{ 4. 6.20 - 4. 8.20 5. 1. 7 - 5. 3. 7
Kim, Hong Lae	(韓国 江原大学化学学科助教授)	{ 4. 6.24 - 4. 8.11 5. 1. 4 - 5. 3. 6
Park, Joon Taik	(韓国 韓国高等科学技術院準教授)	{ 4. 7. 1 - 4. 8.28 4.12.16 - 5. 2.19
Lee, Jihwa	(韓国 ソウル国立大学準教授)	4. 9. 1 - 5. 8.31
Timothy C. Steimle	(アメリカ アリゾナ州立大学化学学科助教授)	4.11. 6 - 5. 2. 5
Vadim Yu Kukushkin	(ロシア レニングラード州立大学助教授)	4.12. 1 - 5. 4.30

#### 4. 日本学術振興会招へい外国人研究者 (\*\* 外国人特別研究員)

Martin Charles Roy Cokett**	(イギリス サザンプトン大学化学学科博士研究員)	3. 1. 9 - 5. 1. 8
Djamaladdin G. Musaev**	$\left\{ \begin{array}{l} \text{ソ連 ソ連科学アカデミー新化学問題研究所研究員} \\ \text{アメリカ カリフォルニア大学バークレー校 博士研究員} \\ \text{フランス パリ第 11 大学理論化学研究室 教育助手} \\ \text{イギリス エディンバラ大学化学学科 博士研究員} \\ \text{イギリス ダーラム大学物理学科 博士研究員} \end{array} \right\}$	3. 4.17 - 5. 1.16
Kim, Bongsoo**		3.11. 1 - 5.10.31
Jean-Frederic Riehl**		4. 2. 8 - 4.11.30
Philip John Jewsbury**		{ 4. 2.23 - 5. 2.22 5. 2.23 - 6. 2.22
Roger James Whitehead**	(イギリス)	4. 3.30 - 5. 3.29
Denis Y. Kondakov**	(ロシア レニングラード州立大学研究員)	4. 6.20 - 5. 6.19
Yan-Ping Zhang**	(ドイツ マックスプランク研究所 博士研究員)	4.11.27 - 5.11.26

Ilias I. Khairullin**	(ウズベキスタン    ウズベク科学アカデミー 熱物理学研究所上級研究員)	4.10.25 – 5.10.24
-----------------------	--	-------------------

## 5. 岡崎コンファレンス

Tom Ziegler	(カナダ    カルガリー大学教授)	4.11. 3 – 4.11. 6
H. J. Werner	(ドイツ    ビーレフェルト大学教授)	4.11. 2 – 4.11. 7
David C. Clary	(イギリス    ケンブリッジ大学リーダー)	4.10.31 – 4.11. 7
Joel M. Bowman	(アメリカ    エモリー大学教授)	4.11. 2 – 4.11. 7
Kent R. Wilson	(アメリカ    カリフォルニア大学教授)	4.11. 3 – 4.11. 8
Klaus Schulten	(アメリカ    イリノイ大学教授)	4.11. 1 – 4.11. 6
A. G. Sykes	(イギリス    ニュー・キャッスル・アボン・タイン大学 教授)	4.12. 6 – 4.12.11
N. D. Yordanov	(ブルガリア    ブルガリア科学アカデミー教授)	4.12. 7 – 4.12.11
G. Zimmerer	(ドイツ    ハンブルグ大学教授)	4.12.15 – 4.12.18
I. Lindau	(スウェーデン    ルント大学教授)	4.12.15 – 4.12.19
P. Weightman	(イギリス    リバプール大学教授)	4.12.15 – 4.12.18
S. Krinsky	(アメリカ    ブルックヘーブン国立研究所 研究員)	4.12.14 – 4.12.19
W. Braun	(ドイツ    ドイツ電子シンクロトン放射研究所 教授)	4.12.14 – 4.12.18
P. Lablanquie	(フランス    パリ南大学研究員)	4.12.15 – 4.12.18

## 6. 招へい協力研究員

E. V. Khoroshilov	(ロシア    レベデフ物理学研究所)	4. 7. 3 – 4. 7.10
Etienne Forest	(アメリカ    ローレンス・バークレー研究所研究員)	4. 7.16 – 4. 7.17
井口 道生	(アメリカ    アルゴンヌ国立研究所主任研究員)	4. 7.26 – 4. 7.28
Mel Okamura	(アメリカ    カリフォルニア大学教授)	4. 8.23 – 4. 8.30
Dongho Kim	(韓国    韓国標準科学研究所主任研究員)	4. 8.23 – 4. 8.26
I. H. Munro	(イギリス    ダーズベリ研究所教授)	4. 8.26
Valery A. Ivanov	(ロシア    ロシア科学アカデミー教授)	4. 8.27
Yehuda Haas	(イスラエル    ヘブライ大学教授)	4. 8.30 – 4.11. 1
B. Venkataraman	(インド    タータ基礎科学研究所教授)	4. 9. 1 – 4. 9. 3
Michael J. Cook	(イギリス    イーストアングリア大学準教授)	4. 9. 3
Edward I. Solomon	(アメリカ    スタンフォード大学化学科教授)	4. 9.16
P. F. Barbara	(アメリカ    ミネソタ大学教授)	4. 9.16 – 4. 9.18
唐 敖慶	(中国    国家自然科学基金委員会主任)	4. 9.20 – 4. 9.22

徐 光憲	(中国 北京大学教授)	4. 9.20 - 4. 9.22
張 存浩	(中国 国家自然科学基金委員会委員長)	4. 9.20 - 4. 9.22
曹 陽	(中国 蘇州大学教授)	4. 9.20 - 4. 9.22
劉 峰	(中国 吉林大学外事処)	4. 9.20 - 4. 9.22
N. N. Greenwood	(イギリス リーズ大学教授)	4.10. 5 - 4.10. 7
J. Jortner	(イスラエル イスラエル科学アカデミー会長)	4.10.12 - 4.10.18
Mats Larsson	(スウェーデン スウェーデン王立工科大学)	4.10.19 - 4.10.21
Zhu Zhenghe	(中国 成都科学技術大学 原子物理研究所所長)	4.10.21 - 4.10.25
王 佛松	(中国 中国科学院副院長)	4.10.25 - 4.10.31
James Kincaid	(アメリカ マーケット大学教授)	4.10.30
Carlo Bellitto	(イタリア Consiglio Nazionale delle Ricerche 主任研究員)	4.10.31 - 4.11. 2
張 国棟	(中国 中国科学技術大学教授)	4.11.12 - 4.11.13
王 秋平	(中国 中国科学技術大学研究員)	4.11.12 - 4.11.13
蔡 生民	(中国 北京大学教授)	4.11.17 - 4.11.19
Igor I. Morozov	(ロシア ロシア科学アカデミー教授)	4.12. 4 - 4.12. 5
P. M. Raja Rao	(インド バーバ原子研究センター研究員)	4.12.15 - 4.12.19
Yuan T. Lee	(アメリカ カリフォルニア大学教授)	4.12.15 - 4.12.18

## 7. 特別協力研究員

劉 忠範	(中国 豊田理化学研究所特別研究員)	{ 3. 9. 1 - 4. 8.31 4. 9. 1 - 5. 8.31
Victor Denisov	(ロシア セント・ペテルスブルグ州立大学 化学科上級研究員)	4. 5.20 - 5. 5.19
Alexander Mebel	(ロシア 新化学問題研究所量子化学室 研究員)	4. 6. 1 - 4.11.30
Masatsugu Suzuki	(アメリカ ニューヨーク州立大学助教授)	4. 8.20 - 4.12.19
Itsuko S. Suzuki	(アメリカ ニューヨーク州立大学博士研究員)	4. 8.20 - 4.12.19
李 加波	(中国 シャーメン大学助教授)	4. 9.21 - 4.12.20
Alan E. Johnson	(アメリカ ミネソタ大学化学科大学院生)	4. 9.10 - 4.12.31
海 洋	(中国 北京高能物理學研究所助手)	4.10. 1 - 5. 3.31
Alain Dedieu	(フランス ルイバスツール大学 量子化学研究室室長)	4.10. 1 - 4.10.30
Moshe Shapiro	(イスラエル ワイズマン研究所教授)	4.10.12 - 4.10.17
Raphael D. Levine	(イスラエル ヘブライ大学フリッツハーバー分子動力学 研究センター教授)	4.10.12 - 4.10.17
Jerzy Moc	(ポーランド ウラツワフ大学化学科講師)	4.10.15 - 5. 1.15
Ki-Jung Paeng	(韓国 ヨンセイ大学教授)	4.10.16 - 4.10.25

James Kincaid	(アメリカ マーケット大学教授)	4.10.16 – 4.11.15
王 萍	(アメリカ アラバマ大学博士研究員)	4.10.18 – 4.11.18
Arkady Yartsev	(ロシア ロシア科学アカデミー 分光学研究所研究員)	4.10.24 – 5. 4.23
李 永舫	(中国 中国科学院化学研究所助教授)	4.11. 1 – 4.12.31
Jim McMurdo	(イギリス イーストアングリア大学 上級研究員)	4.11. 6 – 4.12.11
鄭 伯昆	(台湾 台湾大学物理学科教授)	4.11.29 – 4.12.19
彭 維鋒	(台湾 淡江大学物理学科助教授)	4.11.29 – 4.12.19
Stephen Roy Meech	(イギリス ヘリオット・ワット大学化学科講師)	4.12.15 – 5. 1.15
Choi, Young-Sik	(韓国 インハ大学化学科助教授)	4.12.21 – 5. 2.20
Kim, Taek-Soo	(韓国 インハ大学大学院学生)	4.12.21 – 5. 2.20
席 振峰	(中国 河南化学研究所研究員)	5. 1. 1 – 5.12.31
Huh, Chul	(韓国 インハ大学化学科大学院学生)	5. 1. 5 – 5. 2.28
Dong-Eon, Kim	(韓国 浦項科学技術大学物理学科助教授)	5. 1.18 – 5. 2. 6
Hang-Woo, Lee	(韓国 浦項科学技術大学大学院学生)	5. 1.18 – 5. 1.24
Seong-Ho, Kim	(韓国 浦項科学技術大学大学院学生)	5. 1.31 – 5. 2. 7

## 海外からの訪問者

E. V. Khoroshi	(ロシア レベデフ研究所研究員)	4. 7. 3 – 4. 7.10
Dongho Kim	(韓国 韓国標準科学研究所)	4. 8.23 – 4. 8.26
T. J. Schaafsma	(オランダ ワーゲニング農業大学教授)	4. 8.26
James Durrant	(イギリス インペリアル大学)	4. 9. 2
Minhaeng Cho	(アメリカ シカゴ大学)	4. 9. 3 – 4. 9.24
朴 永穆	(韓国 韓国基礎科学センター)	4. 9. 7 – 4. 9. 8
雀 鐘淳	(韓国 韓国基礎科学センター)	4. 9. 7 – 4. 9. 8
Linda Powers	(アメリカ 分子機能設計のための国立センター 研究員)	4. 9.15 – 4. 9.16
Horia Metiu	(アメリカ カリフォルニア大学教授)	4. 9.24 – 4. 9.26
Walter G. Klemperer	(アメリカ イリノイ大学教授)	4. 9.25 – 4. 9.26
Sanche Leon	(カナダ シャーブルック大学教授)	4. 9.26 – 4. 9.29
Gregory Peter Morley	(イギリス ブリストル大学)	4. 9.28 – 4. 9.30

ボリス イワノビッチ	(ロシア モスクワ大学レーザーセンター)	4.10.10 – 4.10.11
Thomas P. Fehlner	(アメリカ ノートルダム大学教授)	4.10.15 – 4.10.17
朱 正和	(中国 成都科学技術大学教授)	4.10.21 – 4.10.25
R. H. Herber	(アメリカ ニュージャージー大学教授)	4.10.23 – 4.10.24
Vincenzo Aquilanti	(イタリア ペールジア大学化学科教授)	4.10.24 – 4.11. 8
丁 侍風	(中国 中国科学院化学研究所研究員)	4.11.16
俞 书勤	(中国 中国科学技術大学教授)	4.11.16
Roman Osman	(アメリカ マウント・シナイ医学校教授)	4.12. 2 – 4.12. 3

## 海外渡航 (4. 6 ～ 4.12)

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
丸 山 有 成	分子集団研究系 教 授	4. 6. 1 ～ 4. 6. 7	フ ラ ン ス	ヨーロッパにおける分子システムに関する研究の 情報収集のために E-MRS 会議に出席するため
神 取 秀 樹	電子構造研究系 非常勤の講師	4. 6. 5 ～ 4. 6.14	イ ギ リ ス フ ラ ン ス	レチナル蛋白質の異性化反応機構等についての 調査のため
吉 原 経太郎	電子構造研究系 教 授	4. 6. 5 ～ 4. 6.18	フ ラ ン ス	分子環境の超高速現象に及ぼす影響に関する調査 のため
奥 山 克 彦	極端紫外光科学研究系 助 手	4. 6. 7 ～ 4. 6.19	ア メ リ カ	「多光子過程」に関するゴードンコンファレンス に参加するため
加 藤 立 久	分子構造研究系 助 教 授	4. 6.18 ～ 4. 6.30	ア メ リ カ	Gordon Research Conference への招待講演のため
澤 田 清	錯体化学実験施設 助 教 授	4. 7. 4 ～ 4. 7.26	ロ シ ア ス イ ス	「第 5 回溶解現象に関する国際会議」, 「第 29 回 錯体化学国際会議」及び Bern 大学での講演のため
福 田 豊	錯体化学実験施設 教 授	4. 7. 4 ～ 4. 8. 3	オーストリア	学術振興会特定国派遣研究者事業による研究実施 のため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	4. 7. 5 ～ 4. 7.11	ロ シ ア	第 5 回溶解現象に関する国際会議出席及び IUPAC 溶解データ委員会出席のため
高 橋 保	錯体化学実験施設 助 教 授	4. 7. 5 ～ 4. 7.26	ス イ ス フ ラ ン ス ド イ ツ	第 29 回錯体化学国際会議出席及びフランス ESCIL で講演, ドイツ Merck, Darmstadt 大学, Murster 大学でそれぞれ講演のため
諸 熊 奎 治	理論研究系 教 授	4. 7. 6 ～ 4. 7.14	フ ラ ン ス	化学反応遷移状態の電子構造と動力学の理論計算 に関する研究のため
吉 原 経太郎	電子構造研究系 教 授	4. 7. 7 ～ 4. 7.12	イ ギ リ ス	「物理・化学・生物学におけるサブピコ秒過程」 に関する研究会に出席するため
鎌 田 雅 夫	極端紫外光実験施設 助 教 授	4. 7.17 ～ 4. 8. 4	フ ラ ン ス ド イ ツ ロ シ ア	VUV-10 国際会議における発表並びにドイツ及び ロシア共和国におけるシンクロトン放射光研究 の視察のため
山 下 敬 郎	化学試料室 助 教 授	4. 7.17 ～ 4. 7.28	カ ナ ダ	第 7 回新芳香族化合物に関する国際シンポジウム に参加, 研究発表のため



氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
新名主 輝 男	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	4. 7.17 ～ 4. 7.28	カ ナ ダ	第 7 回新芳香族化合物国際会議出席のため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	4. 7.18 ～ 4. 7.26	ロ シ ア ス イ ス	第 29 回錯体化学国際会議出席のため
中 筋 一 弘	相 関 領 域 研 究 系 教 授	4. 7.18 ～ 4. 7.26	カ ナ ダ	第 7 回新芳香族化学国際会議 (ISNA-7) 出席並び に研究発表のため
長 尾 宏 隆	錯体化学実験施設 助 手	4. 7.18 ～ 4. 7.29	ス イ ス	第 29 回錯体化学国際会議出席のため
田 中 晃 二	錯体化学実験施設 教 授	4. 7.18 ～ 4. 7.26	ス イ ス	第 29 回錯体化学国際会議出席及び論文発表のため
森 田 紀 夫	分子 構 造 研 究 系 助 教 授	4. 7.20 ～ 4. 7.28	ア メ リ カ	国際研究集会「New Developments and Challenges in two-Electron atoms and Ions」に出席・講演のため
田 中 慎一郎	極端紫外光実験施設 助 手	4. 7.24 ～ 4. 8.11	フ ラ ン ス ド イ ツ ロ シ ア	第 10 回真空紫外物理国際会議 (VUV10) への参加 及び施設見学・研究打合せのため
渡 邊 誠	極端紫外光実験施設 助 教 授	4. 7.24 ～ 4. 8. 4	フ ラ ン ス ド イ ツ ロ シ ア	第 10 回真空紫外物理国際会議 (VUV10) に出席及 びクリチャトフ研究所訪問のため
平 谷 篤 也	極端紫外光実験施設 助 手	4. 7.25 ～ 4. 8. 2	フ ラ ン ス	第 10 回真空紫外物理国際会議 (VUV10) に参加する ため
三 島 正 章	相 関 領 域 研 究 系 助 手	4. 7.29 ～ 4. 8.13	カ ナ ダ ア メ リ カ	有機反応中間体に関するトロント国際会議及び第 11 回 IUPAC 物理有機化学国際会議への出席並び に物理有機化学に関する研究調査のため
南 部 伸 孝	電子計算機センター 助 手	4. 7.29 ～ 4. 8. 9	カ ナ ダ	理論化学の分野における国際会議に出席するため
大 峯 巖	理 論 研 究 系 助 教 授	4. 7.29 ～ 4. 8.10	ア メ リ カ	日米科学技術協力事業の共同研究のため
諸 熊 奎 治	理 論 研 究 系 教 授	4. 8. 1 ～ 4. 8. 8	オ ラ ン ダ	第 8 回均一系触媒に関する国際会議に出席及び講演 のため
古 賀 伸 明	理 論 研 究 系 助 手	4. 8. 1 ～ 4. 8.31	フ ラ ン ス	化学反応遷移状態の電子構造と動力学の理論計算 に関する研究のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
森 田 紀 夫	分子構造研究系 助 教 授	4. 8. 3 ～ 4. 8.21	ス イ ス	科学研究費補助金研究課題のうち、異常長寿命反陽子ヘリウム原子に関する実験を行うため
今 枝 健 一	技 術 課 技 官	4. 8. 6 ～ 4.10. 2	イ ギ リ ス	分子及び分子錯体の反応と物性に関する共同研究及び研究動向調査のため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	4. 8. 6 ～ 4. 8.12	ア メ リ カ	環太平洋化学会議（1995 年）組織委員会出席のため
鈴 木 教 之	錯体化学実験施設 助 手	4. 8. 7 ～ 4. 8.15	ポ ー ラ ン ド	第 15 回有機金属化学国際会議に出席及び発表のため
森 健 彦	分子集団研究系 助 手	4. 8.11 ～ 4. 8.20	スウェーデン	合成金属の化学と技術に関する国際会議に出席するため
薬 師 久 彌	分子集団研究系 教 授	4. 8.11 ～ 4. 8.24	スウェーデン	合成金属の化学と技術に関する国際会議に出席するため
田 中 彰 治	化 学 試 料 室 助 手	4. 8.11 ～ 4. 8.20	スウェーデン	合成金属の化学と技術に関する国際会議に出席及び研究発表のため
北 川 宏	装 置 開 発 室 助 手	4. 8.11 ～ 4. 8.25	スウェーデン	合成金属国際会議出席及びフィリップス大学ゴープル研究室にて研究打合せ
鹿野田 一 司	分子集団研究系 助 教 授	4. 8.11 ～ 4. 8.22	スウェーデン	合成金属の化学と技術に関する国際会議に出席するため
北 川 禎 三	分子構造研究系 教 授	4. 8.27 ～ 4. 9.10	ド イ ツ フィンランド	第 13 回国際ラマン分光学会及び第 4 回生命系へのレーザーの応用国際学会に出席のため
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 教 授	4. 8.27 ～ 4. 9. 7	チェコスロバキア	第 9 回ヨーロッパ分子衝突動力学会議に出席のため
鶴 川 彰 人	分子集団研究系 助 手	4. 9.10 ～ 4.12.15	ア メ リ カ	日米科学技術協力における新材料に係る調査研究のため
諸 熊 奎 治	理 論 研 究 系 教 授	4. 9.13 ～ 4. 9.17	ア メ リ カ	計算化学に関する研究打合せのため
美斎津 文 典	機 器 セ ン タ ー 助 手	4. 9.14 ～ 4. 9.26	ア メ リ カ	第 6 回微粒子及び無機クラスターに関する国際会議に出席・発表のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
富 宅 喜代一	機 器 セ ン タ ー 助 教 授	4. 9.14 ～ 4. 9.26	ア メ リ カ	クラスター国際シンポジウムに出席及び研究発表のため
ベテック ハルボエ	電子構造研究系 助 手	4. 9.19 ～ 4. 9.25	ア メ リ カ	国際学会会議招待講演出席のため
吉 原 経太郎	電子構造研究系 教 授	4. 9.24 ～ 4.10. 5	ポ ー ラ ン ド	電子移動及びその関連現象に関する実験及び理論に関する会議において招待講演をするため
中 筋 一 弘	相 関 領 域 研 究 系 教 授	4. 9.27 ～ 4.10. 4	ス ペ イ ン	「分子科学の分野における日本-スペイン二国間シンポジウム」への参加のため
磯 邊 清	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	4. 9.27 ～ 4.10. 4	ス ペ イ ン	「分子科学の分野における日本-スペイン二国間シンポジウム」への参加のため
ベテック ハルボエ	電子構造研究系 助 手	4. 9.30 ～ 4.10. 3	ア メ リ カ	大学でのセミナー講演及び研究テーマの調査及び討論のため
吉 田 明	極端紫外光科学研究系 教 授	4.10.10 ～ 4.10.19	オ ラ ン ダ	第 12 回真空国際会議及び第 8 回固体表面国際会議にて研究発表並びに討論を行うため
那 須 奎一郎	理 論 研 究 系 助 教 授	4.10.30 ～ 4.11.10	メ キ シ コ	第 2 回チンベスタブ超伝導国際シンポジウムに参加・発表及びメキシコの固体物理研究センターを訪問し講演するため
斎 藤 真 司	技 術 課 技 官	4.11.10 ～ 4.12. 8	ア メ リ カ	日米科学協力事業共同研究（超高速分光法による分子構造変化と振動ダイナミクスの研究）により、シカゴ大学で研究を行うためのプログラム開発のため
磯 邊 清	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	4.11.18 ～ 4.11.21	韓 国	韓国における放射光利用分子科学研究の動向調査のため
渡 邊 誠	極端紫外光実験施設 助 教 授	4.11.18 ～ 4.11.21	韓 国	韓国における放射光利用分子科学研究の動向調査のため
田 中 晃 二	錯体科学実験施設 教 授	4.11.20 ～ 4.11.24	台 湾	国際無機及び有機化学シンポジウムにおいて招待講演を行うため
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 教 授	4.11.21 ～ 4.11.28	ア メ リ カ	日米科学技術協力事業（学振）に基づく共同研究の実施のため
岩 野 薫	理 論 研 究 系 助 手	4.11.29 ～ 4.12. 6	ア メ リ カ	ボストンで行われるシンポジウム「フラレン物質の科学と技術」に参加のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
丸 山 有 成	分子集団研究系 教 授	4.11.29 ～ 4.12. 9	ア メ リ カ	日米科学技術協力における新材料に係る調査・研究のため
中 村 宏 樹	理論研究系 教 授	4.12. 8 ～ 4.12.17	中 国	日本学術振興会論博事業に基づく論博研究者の研究指導及び打合せのため
澤 田 清	錯体化学実験施設 助 教 授	4.12.12 ～ 4.12.19	タ イ	バンコック（タイ）チュラロンコン大学で開催される第3回 EUASC2S（ユーラシア化学会議）に出席し、研究発表を行うため
大 瀧 仁 志	錯体化学実験施設 教 授	4.12.13 ～ 4.12.19	タ イ	第3回ユーラシア化学会議の主催と研究発表のため
吉 田 明	極端紫外光科学研究系 教 授	4.12.13 ～ 4.12.20	イ ン ド	第2回半導体材料国際会議及び集中講義コースにおいて、招待講演および集中講義を行うとともに、情報交換を行うため
正 島 宏 祐	極端紫外光科学研究系 助 教 授	4.12.25 ～ 4.12.30	台 湾	台湾の原子分子科学研究所で開催される「分子科学シンポジウム」に参加し招待講演をするため
松 本 吉 泰	電子構造研究系 助 教 授	4.12.25 ～ 4.12.30	中 国	「分子科学に関するシンポジウム－擬態物性及びその合成について」に出席、講演及び原子・分子科学研究所の視察のため
丸 山 有 成	分子集団研究系 教 授	4.12.27 ～ 4.12.30	台 湾	台湾中央科学院原子科学研究所における「分子科学のシンポジウム」に出席するため

## 人事異動 (4.10 ～ 5. 2)

異動年月日	異 動 前	氏 名	異 動 内 容	備 考
4.10.11	事務補佐員 (極端紫外光科学研究系)	陸 田 美 恵	辞職	基礎電子化学研究部門
4.10.15	非常勤の講師 (電子構造研究系)	神 取 秀 樹	退職 (理化学研究所基礎科学特別研究員)	
4.11. 1		野 村 恵美子	事務補佐員 (分子構造研究系) に採用	
4.11.11	事務補佐員 (分子構造研究系)	彦 坂 潮 里	辞職	
4.11.16	助教授 (理論研究系)	那 須 奎一郎	教授 (高エネルギー物理学研究所放射光実験施設) に昇任	分子基礎理論第二研究部門
4.11.25		内 田 章	休職 (期間更新)	技術課長 (5. 2.28 まで)
5. 1. 1	助教授 (京都大学工学部)	小 杉 信 博	教授 (極端紫外光科学研究系) に昇任	基礎光化学研究部門
5. 1. 1	特別研究員 (日本学術振興会)	尾 関 博 之	助手 (分子構造研究系) に採用	分子構造学第二研究部門
5. 1. 1	特別研究員 (日本学術振興会)	戸野倉 賢 一	助手 (電子構造研究系) に採用	電子状態動力学研究部門
5. 1. 1		山 室 憲 子	非常勤の講師 (分子集団研究系) に採用	分子集団動力学研究部門
5. 1.31	助手 (電子構造研究系)	PETEK HRVOJE	辞職 (日立製作所基礎研究所研究員)	基礎電子化学研究部門
5. 2. 1		杉 浦 千穂子	事務補佐員 (技術課) に採用	
5. 2.26	事務補佐員 (技術課)	岸 津 子	辞職	

## 編 集 後 記

本号の巻頭記事は、理論研究系の諸熊奎治教授と錯体化学実験施設長の大瀧仁志教授の研究紹介です。ご退官されるお二方にとってきわめて貴重なお時間を割いて玉稿をご執筆いただきましたことに心からお礼を申し上げます。

さて、各種研究会・国際協力事業の報告および新任者紹介などに見られるように、研究活動の国内外への発展に対応して研究所の人事交流は益々盛んになっています。一方、別の視点から見ると、ここ数年間続いた世代交代はだんだんと収束に向かいつつあるような気がします。そして今春、研究所の歴史とともに歩まれてきた井口所長が、新しい方にバトンを引き渡されます。

バルセロナの金メダリストの岩崎恭子さん流に言えば、1992年は公私両面においてこれまでの人生のなかで最も幸福な年の一つでした。その締めくくりとして本誌の編集を担当させていただき感慨深いものがあります。ご多忙にもかかわらず、貴重な原稿をお寄せくださった執筆者の方々に感謝いたします。

### 分子研レターズ編集委員

薬 師 久 彌 (委員長)

見 附 孝一郎 (本号編集担当)

花 崎 一 郎

北 川 禎 三

山 下 敬 郎

那 須 奎一郎

高 橋 保

### 分子研レターズ管理局編集担当

桑 原 博 明

分子研レターズ No. 28

発行年月	平成 5 年 3 月
印刷年月	平成 5 年 3 月
発 行	岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所
編 集	分子研レターズ編集委員会
印 刷	株式会社 荒川印刷