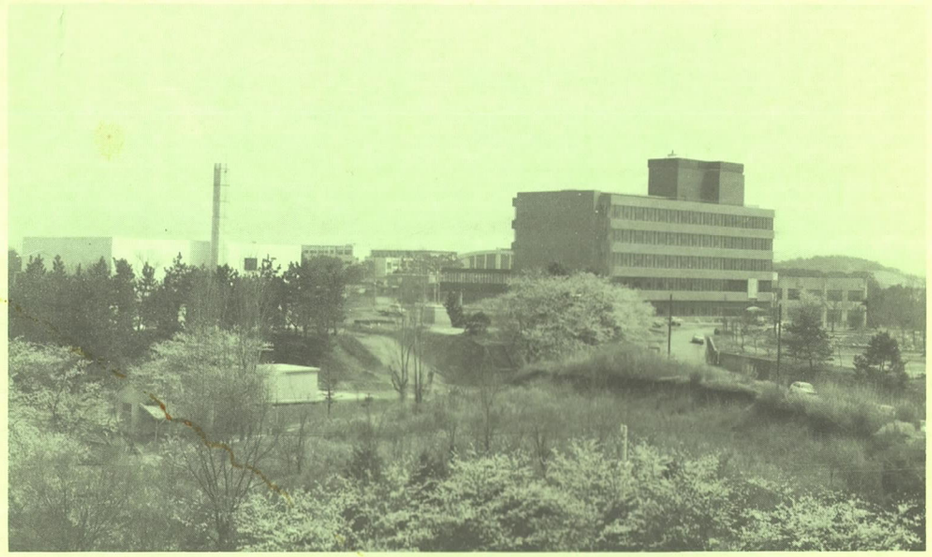
ISSN 0385−0560

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

分子科学研究所

分子研レターズ

昭和52年8月 NO.3, '77



昭和52年４月の分子研全景。写真右が実験棟，左の白い建物がエネルギーセンターである。中央後方には県立岡崎高等学校が見えている。ここは岡崎市のほゞ中央に位置する丘陵で，いくつかの学校が点在する文教地区である。まわりにはまだ自然がよく保存され，きじ，野うさぎなどがよく遊んでいる。夏には実験棟のすぐ近くにほたるも飛んでくる。野いちご，たらの木，山いも等もあり，時折研究者の胃袋にも収るようである。

目　　次

研究所の現況……分子研　井　口　洋　夫……1

分子研の大学院教育協力について……分子研　広　田　栄　治……3

レ　タ　ー　ズ……5

科学者にとって徳川時代とは何か……日本学士院　水　島　三一郎……5

学問における分化と統合……京大工　福　井　謙　一……7

My Impression of the Okazaki Conference and The Institute for Molecular Science.
……ユタ州立大　C. H. Wang……9

Postscript to a Visit……カナダ国立研　W. Siebrand……12

岡崎コンフェレンス……14

第３回岡崎コンフェレンス報告

分子性結晶における運動自由度……阪大理　千　原　秀　昭……14

第４回岡崎コンフェレンス報告

共鳴および非線形ラマン散乱……東大薬　坪　井　正　道……17

第４回岡崎コンフェレンス　Night Session

Luck－Good and Bad－In Spectroscopy……ピッツバーグ大　F. A. Miller……21

51年度の共同研究を顧みて……分子研　井　口　洋　夫……29

研　究　会　報　告……31

レーザー誘起化学反応……東大教養　土　屋　荘　次……31

ピコ秒パルス……分子研　吉　原　經太郎……33

金属錯体の立体化学……名大理　山　寺　秀　雄……35

相関分子科学と有機化学……東北大理　櫻　井　英　樹……38

有機分子性結晶における電荷の移動機構……
お茶の水大理　丸山有成・分子研　井口洋夫……40

光合成の初発反応……東大理　森　田　茂　廣……43

励起電子状態の動的過程……分子研　吉　原　經太郎……45
極端紫外連続光源……分子研　井　口　洋　夫……46
高励起原子・分子の生成と反応……東大理・分子研　朽　津　耕　三……48
外国人研究員紹介……52
C. H. Wang 教授について……阪大理　千　原　秀　昭……52
J. M. Morris博士について……分子研　吉　原　經太郎……52
R. F. Curl　教授について……分子研　広　田　栄　治……53
機器センターについて……分子研　吉　原　經太郎……55
分子研コロキウム……57
編　集　後　記……59

研究所の現況

分子研　井　口　洋　夫

1月20日過ぎ実験棟(総面積9,000m^{2}中第一期計画として5,200m^2)が完成して，総勢約50名のスタッフが移動を完了したのは1月末。年度末のあわただしい中で，着々整備を重ね，待望の内線回路を持った電話(代表岡崎0564—52—9770)が稼動状態に入ったのが3月末。そして間もなく創設（4月22日）2周年を迎えようとしている。

51年度に計画していた建物はすべて完成した。上記実験棟は無論のこと，将来の付属研究施設すべてを含めた全施設(生物科学総合研究機構のものも含む)のエネルギーを賄うエネルギーセンター(700m^2，2階建）及び排水処理施設が完成し，研究所として云はばその骨組みが出来上がった。そして，52年度では，化学試料棟(約1,000m^2)，機器センター棟(約1,000m^2)，装置開発室棟(約1,300m^2)及び研究棟(約2,850m^2)など，その肉づけとなる建物の建設が実行出来ることを期待している。

51年度15名の定員増が認められたが，その内訳は，管理部(技官を含む)9名，研究系及び付属研究施設6名であった。分子研レターズ1・2号の「研究所の現況報告」でもふれたように，最少のスタッフでの創設作業は，管理部にも，技術部門にも，そして又研究部門にも，切れ目ない形で進められているが，その人の和は自負に値している。この創設時の“人の和”は是非とも今後10年，20年と続けて行くことを期している。

上記のように51年度の研究部門の定員（理論研究系分子基礎理論第一部門教授1名，助教授1名，助手2名，化学試料室助教授1名）の増加をみた，52年度は相関領域研究系専任部門，相関分子科学第一部門教授1名，助教授1名，助手2，と共に，新しく2つの付属研究施設——極低温センター，電子計算機センター——の発足が認められた。これによって，5つの付属研究施設のすべてが設置されることとなる。上記の新しく発足する施設に対して，電子計算機センター助教授1名，極低温センター助手1名が認められ，早々に公募作業に入った。

所長の補佐機関として専任部門4(×2)客員部門4(×2)及び化学試料室助教授1名の17名のスタッフで構成している教授会議は，予定通り11月1日から発足し，赤松所長が先号の分子研レターズで触れておられるように，未だ定着していないリズムを，一日でも早く“リズミカル”な運営に乗せるべく努力を続けている。

創設以来，開かれた研究所としての運営の牽引力である3つの専門委員会については，充分慎重に討議を重ねた結果，所長の諮問機関としての独立した委員会——即ち人事選考委員会，運営に関する委員会及び共同研究委員会——として，運営されることとなった。その形態での委員会として，

既に運営されている。

所内の各種委員会や運営制度も充実して来ているが，国立大学共同利用機関として認められている大学院教育協力の制度が具体的に発足し，第一年度として２名の受託学生の参加を得た。この制度は，他大学の要請を受けて大学院の教育に協力することによって分子科学研究の次の時代を荷う研究者の養成に貢献し，更にその流動性に寄与することを目途としている。所外の研究者によってこの制度が正しく理解され，その発展的な定着がなされることを心より期待している。

分子科学研究所の大きな仕事の一つである共同研究の現状については，本レターズ29頁を参照して戴きたい。

岡崎コンフェレンスは52年度は第５回及び第６回を行う予定にしている。第５回は，12月に「分子・分子性結晶の高エネルギー励起状態(Higher Excited States of Molecules and Molecular Crystals)」の題目を予定して居り，第６回は来年１～２月に，「興味ある物性を持つ有機半導体」を計画している。

最後になったが，52年度，この岡崎市明大寺地区に，生物科学総合研究機構の発足が予定されている。その順調な発展を願うことや切である。

（４月20日）

共同研究者宿泊施設（山手ロッジ）

昭和52年春に一部改装，修理した旧愛知教育大学の寄宿舎。現在家族室(大)と数名が宿泊できる施設が整っており，小さな会議等が開けるようになっている。今秋には改装が完了し，収容能力が増える予定である。

住所は岡崎市明大寺町字東山５－１　電話(管理人室)　0564－53－3229。

分子研の大学院教育協力について

分子研　広　田　栄　治

「研究所は研究に専念し，学生の教育に関与すべきではない」分子研の設立準備の段階からしばしば云われたことであり，また現在でも同じ意見をもっておられる方も多いと思う。これはもっともな考え方であり，分子研でも博士研究員の充実に努めてきた。しかし現在，各大学の大学院における“教育”の現状を見れば，研究と教育が単純に区別できないことは明らかである。事実大学での研究が，大学院生に負うている部分は大きい。最近まで大学に籍をおいて，大学院生の教育の一端を担ってきた筆者からみれば，研究所の建設に大学院学生が参加することはきわめて“教育的”であると思う。

昭和51年春頃から，所長を中心とし，主幹が集って，分子研の大学院教育への参加を熱心に討議した。上記“教育的”効果（これは大学院生の受けるメリットであるが）の他に，研究所としても若いエネルギーの参加は好ましいことである。しかし分子科学という分野が決して広くないこと，また冒頭に述べた意見等を斟酌し，分子研だけで独自の大学院をもつことは，少くとも現時点では好ましくないという結論に到達した。そこで，分子研と同じく共同利用研として先に発足した高エネルギー研での大学院学生受入れ制度を参考にしながら，分子研にふさわしい教育協力のあり方を探ることとした。規則上では国立学校設置法や大学院設置基準に，博士後期課程（いわゆる博士課程）の大学院生は，他の大学の大学院や研究所において研究指導を受けることができる旨うたっている。分子研組織運営規則にも同様の趣旨の条項が盛込まれており，分子研での大学院生受入れを定めている。これらの規則の意図するところは，一種の学問の流動性であり，研究と教育の密接な関係を前提とすれば，大学院生受入れは分子研における共同研究の一形態と考えることもできよう。

分子研大学院教育協力実施規則，同施行細則，および分子研大学院学生受入要項の原案は，その後数回にわたって創設協力者会議で討議され，さらに協力者会議の下部組織である大学院委員会，（委員：田中郁三，朽津耕三，田仲二朗，井口洋夫各教授と筆者）で詳細に検討された。この間問題になった主な事項は，受入れる学生の資格（いわゆる修士課程の学生をも対象とする場合の問題点），受入れ期間，単位の認定方法，各大学の大学院規則の改正，災害保障，夏期講座，学生の就職等である。所外から多数の参加をえた上記の会合での議論を経て，昭和51年11月12日の第１回教授会議でほゞ一つの成案をえることができた。次いで同12月22日の第４回評議員会議において了承され，「実施規則」は同日付で分子研内規第24号として施行されることになった。その主要な内容は次の通りである。受入れ学生の呼称については異論もあったが，とりあえず「受託学生」とした。

受託学生となる資格は，いわゆる修士課程のみをおく大学も多いこと，またその他考えられる種々の場合に対応できるように，修士，博士を問わず，国公私立大学の大学院に在学する学生とした。受託学生の人数が多すぎて，教育に対する比重が過大になることを防ぐため，１専任部門３名を限度とした。附属施設の教官は，それぞれ専門の近い研究系での教育協力に参加することにしている。受入れ期間は，原則として１年とし，延長はその都度審議の対象とする。受入れは毎年４月および10月に行う。分子研の教官は，とくに大学からの依頼がない限り，単位の認定や学位審査には参加しないが，分子研での研究指導が終了した時には「研究修了証明書」を発行し，必要があれば，より詳細な報告書を大学の研究科長あるいは指導教官に提出する。

以上のような趣旨の「実施規則」に基づいて受入要項が作成され，本年１月，理学系および工学系大学院をもつ全国の国公私立大学に受託学生の推薦を依頼した。その結果，東京都立大学・鈴木哲雄(後期課程１年)，上智大学・吉田和彦(前期課程２年)(以上分子構造研究系)，名古屋大学・相地敏明(前期課程２年)(以上相関領域研究系)の３君の受入れが決り，分子研での受託学生制度は無事発足をみた。

「実施規則」の原案作成にあたっては，北大，東北大，東大，東工大，名大，京大，阪大，九大におられる先生方に，それぞれの大学の大学院規則を送っていただき，参考にさせていただいた。こゝに厚くお礼申上げる。大抵の大学では，前記大学院設置基準の趣旨に沿って学内規則を変更しておられ，分子研での大学院生受入れには，規則上の大きな問題はないように見受けられる。もっとも一二の大学では規則の改正が行われていないし，また他のいくつかの大学では，大学（研究科長）と分子研（所長）の間の協議書交換を前提としておられるようである。近い将来，これらの大学においても，冒頭で述べたような趣旨，すなわち学問の流動性の促進，あるいは共同研究の推進といった観点から，大学院生が本制度を利用できるよう，便宜をはかっていただけると確信している。本制度は，いうまでもなく各大学の御理解と大学院生諸君の意欲があってはじめて健全に成長するものである。立案者の一人として，各位の御協力をえて，本制度を是非成功させたいと念じている。

レターズ

科学者にとって徳川時代とは何か

日本学士院　水　島　三一郎

岡崎は徳川250年の平和な時代をきずいた家康生誕の地である。この徳川時代と現代とを比べて芸術面では連続をみとめるひとが多いが，科学面では蘭学を除いてとかく断絶を考える。そのひとびとのうちには明治以来の日本の科学技術の発達は欧米をお手本にした１世紀にわたる努力のたまものにすぎないと考えるひとすらある。

しかしすこしでも研究で苦労したひとはいくらよいお手本があっても自分に素地のないことはまねしようと思ってもできないことがよくわかる。だから明治維新の時点で日本人に西欧科学を受容する基盤が全くなかったら，わずか１世紀の間に今日のようになったことを理解することは困難である。これをいい換れば科学の面でも徳川時代と明治時代の間に断絶を考えることは妥当でないということになる。

それなら幕末において日本人がすでに科学を理解する素地をもっていたもとを歴史の上でどこまでさかのぼれるかというと，それは幕府の初期から養われた合理的精神がもとだといわずばなるまい。(蘭学はこの精神がもとになって生れたものである)。周知の如く幕府は封建体制をささえる政治の学として儒教のうちから朱子学の客観的な「理」を導入したが，これが恐らく日本の思想界に合理的精神を生むもとになったと考えられる。それまでの日本人のメンタリティーは仏教的なものか或いは貴族社会の洗練された美意識がもとになって作られたものといってよかろう。

徳川時代に入ってから合理的精神が支配階級に入っていた速度はかなりはやいものであった。それは何といっても家康のおかげで享受できた平和のおかげだが，元禄時代になると官吏化した武家の知的レベルは幕府成立前の武士のレベルに比べて比較にならないほど高くなっていた。当時の政治家新井白石などそのトップレベルにいた一人だが，彼の教養の高さは今日において始めて正当な評価ができるほどの近代的なものといわれている。彼の漢詩が中国において有名になったほどの漢学者でありながら，現代人にも読みやすい假名まじり文でその自叙伝「折りたく柴の記」をかいているが，これをよんでみるといたるところに合理的，科学的精神があふれている。白石が文字の威厳を主とする衒学をすててこのようなものを書いているところがすでに近代的であることは，近世哲学の祖といわれるデカルトが有名な「方法序説」を書いたとき当時の学術語であるラテン語によらず母国語のフランス語を用いたのと同じと考えてよかろう。（デカルトの有名な言葉「我思う故

に我在り」をコギト・エルゴ・スムというラテン語で教える先生があるが，あれは感心できない)。

白石と同時代には貝原益軒が出ているが，彼は朱子学の枠を守りつつも「心にある理」とともに「物にある理」をも追求することが真の儒教のあり方だとして儒教の立場にたちつつ自然科学探究の道をひらいている(大和本草)。彼の考え方は徳川合理思想史の注目すべき一断面である。

白石や益軒の時代には自然の中に人生を探求した芭蕉，人間の本能と欲望をありのままみつめた西鶴，人間の本来の愛情と社会の規律との矛盾をついた近松門左衛門なども活躍している。いわゆる元禄文化を代表するこれらのひとびとの創作活動はその時代に人間性のある自由の精神があったからこそ可能だったので，この自由の精神はきわめて近代的のものであり，やがて日本に生れるべき科学精神の沃土作りに役立った。もし幕府が朱子学の倫理観でこの時代の思想を圧迫していたらこれらのひとびとの活躍は望むべくもない。

このひとびとが一般民衆の知識水準をあげるために貢献のあったことはいうまでもないが，その水準はその後もひきつづいてあがり，幕末には文盲率は西欧諸国なみに低くなっている。これは近代化国家の必要条件である。先日テレビである南方の国の選挙風景が放映されていたが，文盲率の高いことが選挙の大きな障害になっていた。これでは近代国家になり難い。

徳川時代に対する批難にその封建制があげられる。この制度は不公平で，ひとびとは同じ階級の中で優れた人間になろうと努力するほかあるまい。しかしそれは必ずしも消極的な態度とばかり考えてはならない。というのは当時の社会の各層はかなり排他的で，それぞれ別のモラルをもち（ある意味では分業意識に徹して）自分の職業に誇りをもっていたと考えられるからである。元禄時代の芸術がどれも今日までひきつがれて発展していることをみてもその一端がうかがえるであろう。こうして日本の社会の各分野に人材がばらまかれていたことが，維新後本格的に流入した文明の新しい灯をともしえただけでなく，古きよき灯も消さずにともしえて全体の明るさをましたのではなかろうか。ここに日本が1世紀のうちに西欧の先進国と肩をならべるにいたった一つの秘訣があるかも知れない。

日本とちがって中国では今世紀の初めまで1300年も科挙の制度をつづけてきたが，これはどんな生れの人も政府の高官になる機会が与えられるという点で極めて合理的な社会制度である。しかしこの制度は日本の場合とちがって，ただ一種の価値観をもった人間つまり地位志向型の人間を多く作るおそれがある。その結果一般社会とくに実行部隊に人材がいないことになるとその国の近代化は望めない。それゆえ今日の日本のあるのが，地位志向型人間よりも分業意識をもった目的志向型の人間におうところが多いならば，そのもとになる徳川時代の封建制もそれなりの価値を認めなければならないだろう。（文明史家のうちかなりのひとびとが今日最も近代化しているくにぐに――日本とアルプス以北のヨーロッパ――は皆封建制を経験したくにばかりだといっている)。

ここでは限られた紙数の中であまり多くのことを書きすぎたので一部は趣旨の徹底しないところがあるかも知れない。しかし科学者にとっても徳川時代は全面的に否定さるべき時代ではなく，非西洋国の中で日本だけが科学技術の面を含めて先進国になったもとは，そのかなりの部分を徳川250年の平和な期間のうちに求められるという話のあらすじは述べることができたのではなかろうか。この考え方が妥当ならその時代の創始者である家康の生誕地岡崎は日本の自然科学とゆかりのある土地だといえるし，またそこに建てられた分子科学研究所の発展はわれわれはもとより，地下にねむる家康も心から祈るところであろう。

（5月8日）

学問における分化と統合

京大工　福　井　謙　一

「いかなる分野の学問でもまったく無関係ではありえないのは当然であるが，身近かな，しかもきわだった例を挙げれば，まず，1905年の特殊相対論の発表にひきつづき，Einsteinが一般相対論の思想を表現する言葉としてずっと探しつづけていたものは，すでに数学者Riemannが約60年も前につくりあげていた非ユークリッド幾何学にほかならなかったことはよく知られている。また，Schrödingerがその波動力学建設にあたって1926年に発表した最初の論文“固有値問題としての量子化”にあらわれた二階偏微分方程式の固有値問題は，数学の分野ではとっくに解かれていたものが多かった。たとえば水素原子の波動関数の各部分などは，すでに26年も前に発行されたSchlesinger著“微分方程式論”のなかにそっくり載っていたので，Schrödingerはその論文のなかで“下記中証明なしに述べたことについてはSchlesinger著‘微分方程式論’第3章，第5章参照のこと”などと述べている。」

以上は拙著“量子化学”（朝倉書店1968年刊）冒頭に述べた一文で，学問分野それぞれの相互関連における因縁の深さを示す一つの例として挙げたものである。そのなかで述べた二例は，世上周知の著名なもので，いまさらここでこと新しく紹介するまでもないが，今世紀の物理学上の二大発見に，予期しない他分野の知識が一役買っているのは，何度とりあげられても面白い。

ここでは物理学は“目的”，数学は“手段”の役目をしているように見える。しかし場合によっては，物理学のなかに包蔵された自然の理法に対する洞察が，数学の分野の発展に影響を与えることもある。エルゴードの問題と確率論との関係などがその例といえよう。

学問の分化が高度になるにつれて研究者の専門化が進む。大きく発達し解離した各専門分野の間

を埋めるためには，境界領域あるいは学際領域ということばで表わされるいろいろな分野，綜合野が現われた。

一人の人間のもつ学問力能力は昔からあまり変化がないとみるべきである以上，学問の発展につれて研究の“分業”はやむをえまい。人間の歴史は分割支配と再統合の繰り返しであるが，専門化したものをまとまりのあるものに再統合していくことは，いうべくしてなかなか困難なことである。いわゆる境界領域あるいは学際領域の旗印は，果して再統合に役立つであろうか。

生物学や医学では，物理学や化学は“手段”として用いられる。この意味では，生物的科学と物理的科学との関係は物理学と数学とのそれに似ている。生化学，医化学などという分野の名称は，通常の命名の常法からいえば，「生」，「医」が修飾，「化学」が主体を表わすべきであろうが，現実は，あくまで生物学，医学を化学的手段で推進するのを本旨とするとみるべきであろう。生物学，医学に用いる化学的手段と，一般の化学で用いる化学的手段と，格別の違いがあるわけではないから，化学が生物学・医学に負うところよりは，生物学や医学が化学に負うことの方がより大きいのは当然のように思われる。

しかし果してそうであろうか。自然の理法の深遠な考察が抽象学の進歩に貢献したように，生物の精妙なしくみのなかにこそ，化学の原理的な発展をもたらす要素がひめられているのではなかろうか。もともと，生物のからだの中では，現代の化学の知識以上に化学が発達しているのは間違いないのであるから，人間のつくっていく化学がそれに学ばない法はないであろう。「生物学に学ぶ化学」という意味の“生化学”にもっと注意を向けるべきではなかろうか。

細分化した学問分野の再統合によって一つの学問分野の飛躍的な展開が期待されるためには，単に複数の分野の重なりあった部分という意味での境界領域の研究では不充分で，むしろ全くかけはなれた分野同士による相互啓発が必要なのではないか。これには，複数の分野の動向にたえず眼を光らせている優れた綜合科学者が居て，一見かけはなれたようにみえる分野のあいだを結ぶ隠された糸をひき出す役目をしてくれなければならない。このような綜合科学者は少くとも他人の倍は勉強する多岐的な専門家で，そのような学者の育成は，現在のわが国の学術機構のもとでは一般には困難というほかはない。いまのところ，限られた条件下においてのみその可能性をもちうる。

分子科学は，たしかにすべての物理的科学の基礎である。他分野は分子科学を土台にして発展すべきであるという自負は，分子科学者にとってたしかに必要である。その一方で，自然の理法，とくに生物や人間のからだの精妙なしくみのなかに，われわれ分子科学に携わるものに対して天啓のごとき閃めきを与えてくれる宝珠がかくされていると期待するならば，恵まれた環境のもとで，宝さがしをするのに躊躇しないことであろう。とくに次代を擔う方々に期待したい。

専門が深くなればいきおい視界が狭くなる。「獼師山を見ず」という警告もある。私など，狭い

凝り固まった領域でいつも同じような仕事ばかりしていると，その反省と同時に，つい以上のような愚痴と注文が頭をもたげてくるのをお許し願いたい。

(1977年4月)

My Impression of the Okazaki Conference and The Institute for Molecular Science

ユタ州立大　C. H. Wang

The third Okazaki Conference on Motion and Molecular Freedom of Solids chaired by Professor Chihara was held at the IMS from December 5 to 8, 1976. Professor Jack Powles and myself were the only foreign speakers. It was a pity that more than twenty Japanese participants had to put up with us and conducted the whole conference using their non-native tongues. It was no doubt that the conference would have been more informative to our Japanese colleagues if the language used were in Japanese, but the conference conducted with the so called “English”, using Japanese only in emergency, turned out to be quite lively; the atmosphere was relaxed and was more amiable than many of the conferences which I attended elsewhere in the past. Professor T. Yamamoto’s pronounciation of CD_4 as “CD Yon” was better enjoyed than if he were to speak using the “real” English.

The two Okazaki Conferences which I had attended in the last three months were all of high quality. They rival well with the established Gordon Conferences in the U.S., and perhaps someday there may exist a joint Okazaki-Gordon Conference to be held alternatively in Japan and in the U.S.A.

At the third Okazaki Conference I had the opportunity to meet several enlightening scientists to whom I also subsequently went back to visit and for discussion in their respective laboratories. Among the people I have met, I mention only Professors T. Yamamoto, S. Hoshino, and M. Ito. Professor Yamamoto’s theoretical work on solid methane is authorative and this work has won him a nickname of “Mr. Methane”. The thermal property and spectroscopic features such as Raman, IR, neutron and NMR of solid methane have all been investigated by him and his associates in Kyoto. His recent more than 30 page manuscript to be published in the Journal of Chemical Physics

is the last word on this subject. I thoroughly enjoyed our friendship and my visits with him at his office and also in his home. Professor Hoshino's work on inelastic neutron scattering paper on solid HCl happens to report independently the anomaly at 120 K which he has also found using quasielastic neutron scattering. Professor Ito's work on Raman spectroscopy is popular and has actually commanded great respects among American and European scientists in his field. After my visit to his laboratory at Sendai, I become even more impressed by the quality of his work and the simplicity of his equipment. To me, he examplifies many Japanese scientists to a large extent. That is, many good science can be carried out using modest or homemade equipment.

After the third Okazaki Conference I went back to Osaka to collaborate with Dr. H. Suga and his student in Professor Seki's laboratory on project connected work the phase transition in $SnCl_2 \cdot 2H_2O$. $SnCl_2 \cdot 2H_2O$ displays a protonic order-disorder phase transition. To elucidate the nature of the phase transition is of great interest at present. We tried to mention the effect of the phase transition on the lattice vibrations using Raman scattering. The work has turned out well and we have in fact prepared a manuscript for publication based upon this work.

I came to stay in the IMS apartment on December 24. The apartment and furniture were both brand new when I moved in. The provision of practically everything I need to live in is perhaps the type of hospitality original in Japan. I was almost spoiled by this. At this time, the IMS was still located in the old building which they said formally was a library. Dr. Siebrand of NRC and I shared the same office. It was difficult to work in this office especially in the winter time. The situation changes completely when the IMS was moved to the new building at the end of January. Our office in the new building is spacial and warm. It is also air-conditioned. I was able to write two papers in this office: one on $SnCl_2 \cdot 2H_2O$ and the other based on the work my student carried out at my laboratory in Utah. But I must admit that the writings of papers at the IMS were done with significant assistances from Osaka. To be sure, a better equipped library would without doubt make the writing considerably easier. The library at the IMS is still primitive.

But like every new-born child, the IMS is evolving with the unavoidable pain to the people who are associated with the institution at the early stage. In order to properly guide the new institute, I personally saw Professors Inokuchi, Hirota and Yoshihara labored with their people late into the night, simply wanting to make sure that the new IMS was given a proper care and needed nourishments. I saw several chaotic spots when I first came to the IMS, but the problems soon took care of themselves after moving to the new building. The administration and technical personnels have so far directed the

new born institution expertedly. The progress is made steadily everyday. The new institute is now pilotted admirably in the direction pointing upward. At the present time, the IMS is growing like a plant in the spring time, and I feel fortunate to be able to watch the evolution of the IMS in its initial stage first-hand.

Dr. Siebrand and I work in our office in the IMS in the morning and at about noon-time we joined with the young scientists to lunch somewhere in the "downtown" Okazaki. In this routine, we soon became acquainted with many IMS scientists. There are about three or four research divisions at the IMS; personally I came to know better the people in Professor Yoshihara's division of electronic (excited state) chemistry. The people working with him are mostly young and vigorous. Their present effects are directed to setting up a laser physics and photochemistry laboratory to carry out the time resolved spectroscopy at the nonosecond and picosecond time scales. In this laboratory, the scientists work day and night. They have also divided duties: some work on lasers and alignments, some on detection and others on electronics. As a group, they altogether attended computer initiation and software programming classes offerred in Nagoya. They left home before seven in the morning and came back late at night. In a short time, a modern laser spectroscopy laboratory was in full swing. I watch them working admiringly and personally cannot help but envy the many nice and modern equipment this group has got.

I am somewhat at awe to see the intensity of drive this group of people have displayed. The altitude to work and to excel is unmatched elsewhere. To be sure, it is also nature to expect people in other divisions also carrying out their work with the same intensity and dedication, but a period of three months is just too short to see everything going on at the IMS. I simply describe what I have seen in this division which also happnes to interest me the most. There are just too many hard working people at the IMS.

From what I have seen, it is now easy to understand the reason why Japan can construct such an awesome technological and industrial base and blossoms in a relative short time since her debacle in 1945 and seven years of occupation until 1952. The all-out relentless dedication to work and the limitless enthusiasm to perform are the contributing factors to success. These make the Japanese people to stand out and be counted. As a Chinese, I have a great respect for Japan and her people. Now I approach the end of my stay at the IMS. Tomorrow I shall leave the IMS with an admiring heart, but I hope to return some day. At that time, the IMS will be a fully grown institution and already shines in the world.

Finally, I would like the acknowledge Professors Inokuchi and Hirota and Drs. Sakata, Koyano and Tanaka for their assistances. The contributions of the administrative personnels also recognized.

Postscript to a Visit

カナダ国立研　**W. Siebrand**

In trying to summarize my impressions of this 15-week visit, I may have difficulty in keeping the singal-to-noise ratio above the minimum acceptable level, since any expression of praise and gratitude could be suspected to be a polite platitude. Let me therefore begin with some factual information.

During the period of my visit, I participated in one conference and two informal symposia in Okazaki. I visited laboratories and research institutes belonging to seven universities and gave about a dozen lectures on a variety of topics representative of my past and present research interest. During one of these visits a tentative arrangement, subject to official approval, was made for one Japanese scientist to go to Ottawa and work with me for a year or longer. In general, the main thrust of my visit was the exchange of scientific information. Particularly effective in this respect were free-wheeling bull-sessions in which also junior staff members and graduate students participated. Although I tried to pursue my normal research activities, there was not enough time left to finish a specific project during my visit. This is not meant to express (self-) criticism but only to indicate the kind of visit it turned out to be.

The greatest obstacle I encountered in my communication with Japanese scientists was the language barrier. In contrast to the cultural barrier which I found to be of no consequence at all, the language barrier was a continuing source of frustration. While I blame myself for not speaking Japanese, a more permanent solution can only be obtained if Japanese scientists improve their English, since English which, by the way, is not my native tongue either, is the internationally accepted language of science. These language problems are not only encountered in oral communication but also affect the publications of many Japanese scientists. On average, I found the quality of the research in fields I am familiar with, to be very high in Japan and to be on the same or a higher level than comparable work in Western Europe where academic research is organized along similar lines. However, this high quality is not always reflected in publications because of these language problems. Most of the senior scientists in Japan have solved their language problem by spending a year or two abroad. To those scientists for which this solution is not (yet) available, I may perhaps recommend my own method which I have practiced ever since I graduated from a Dutch high school: read plenty of English books to develop an ear for the living langauge.

As a member of the permanent staff of NRC in Ottawa, I am familiar with the

operations of a research institute, such as IMS, that is not connected with a university and where the staff has no teaching duties. These institutes have obviously a greater need to justify their existence than have university institutes. In my opinion the best and most convincing justification should be found in the quality and scope of the research carried out by its staff. In addition, the Institute can provide essential services to the scientific community as a whole in the areas of planning and communication. I believe that the Institute had a competent and enthusiastic staff that is well qualified to cope with these problems. The Institute has also assured itself of the best possible Canadian advisor by appointing Dr. Gerhard Herzberg of NRC to its Board of Councillors. I therefore have no new advice to offer but agree wholeheartedly with its chosen course.

Finally I should like to assure you that the Institute and Japan in general are extremely attractive places to visit for a North-American or European scientist. This is one place where he can combine business with pleasure, where he can be a fellow-scientist and a tourist at the same time. In general I found the science to be excellent and the interest in science to be high. On the other hand, I found the Japanese culture and art to be endlessly fascinating and stimulating. I believe that no western scientist will fail to be stimulated by the difference between the Japanese culture and his own. Such comparisons open up new horizons and are the best remedy against ignorance and narrow-mindedness. And this in my opinion is the ultimate aim of scinece.

In summary, I consider the period spent in Okazaki and Japan to be one of the happiest and most invigorating of my career. I hope to be able to return frequently because there remains much for me to learn. It is my privilege to offer my sincerest thanks to everyone who made this visit possible and contributed to its success.

---

* The author was a visiting scientist at the Institute for Molecular Science during the period Dec. 20, 1976–March 31, 1977. Born and educated in the Netherlands, where he graduated as a physical chemist from the University of Amsterdam in 1963, he is presently employed as a senior research officer at the National Research Council of Canada.

岡崎コンフェレンス
第3回岡崎コンフェレンス報告
分子性結晶における運動自由度

阪大理　千　原　秀　昭

昭和51年度に採択された二つの岡崎コンフェレンスの一つとしてMolecular freedom of motion in molecular solidsというテーマで昭和51年12月5～8日に分子研の仮住まいで開催された。

出席者は外国人2名を含み，所外から23名で最初の予定よりも多人数となったうえ，講演も後出のように予定より3件増えて14件もあり，全体として非常な盛会であった。

近年いわゆるmolecular dynamicsが注目されるようになって来たのは，スペクトルや電子物性などを理解するためには結晶内の分子の運動について，デバイ理論を超えた詳しい情報を得る必要が生じていることと，一方ではそのような固体内のmolecular dynamicsの研究手段が豊富になって，しかもかなり細部までわかって来たことが背景となっている。しかし，研究手段が多種多様であることと，それらの方法が適用できる物質，あるいは，適用して最も有用な情報を得られる対象が，手段ごとに異なっているため，研究が系統的でないきらいがあった。多くの研究者が興味をもつ対象がバラエティに富んでいることも一つの理由であろう。

この岡崎コンフェレンスは，このような現状に照らして，理論家を含めて，なるべく異なる研究分野をカバーするように参加者を選定した。そのため6名の方々に世話人をお願いして参加者をきめた。参加者からの話題提供のテーマは自由とし，講演予定者に選んで頂いた。現在日本では研究設備の関係であまり盛んでない中性子非弾性散乱と核磁緩和の分野が淋しく，研究者数の多い赤外吸収がにぎやかになった，アンバランスは，やむを得ないこととはいえ残念であった。

プログラム　最終的に実施されたプログラムはつぎのとおりになった。

どの講演も，問題点をはっきりさせた歯切れのよいpresentationで，そのおかげで討論も予想以上に活発になった。世話人は，はじめ研究手段の違う人たちの集まりで果して議論がかみ合うかを心配していたが，この点については杞憂であった。一つ一つの講演とその内容について，また討論について紹介するだけの記録をとっていないし，紙数も限られているので，概括的な記述にとどめさせて頂く。

第1日，12月6日(月)

1．Structure of Molecular Crystals and Intermolecular Forces. T. Kihara (Univ. Tokyo)

2．Intermolecular Forces and Phase Transitions of the Rotator Phase of n-Paraffins. M. Kobayashi (Osaka Univ.)

3．Translational and Reorientational Motion in Molecular Crystals by Nuclear Spin Relaxation. J. G. Powles (Univ. of Kent at Canterbury)

4．Disorder and its Freezing in Molecular Crystals. H. Suga (Osaka Univ.)

第2日，12月7日(火)

5．Proton Tunnelling Process and Dielectric Loss in the Polyethylene Crystal. Y. Wada (Univ. of Tokyo)

6．Lattice Defects as seen from Electronic Spectra. T. Azumi (Tohoku Univ.)

7．Vibrational Spectra and Frequency Distributions of Molecular Crystals：Polyethylene and Benzene. T. Miyazawa (Univ. of Tokyo)

8．Low-frequency Vibrations of n-Paraffins. M. Tasumi (Univ. of Tokyo)

9．Light Scattering Studies of Phase Transitions and Molecular Motion in Molecular Crystals. C. H. Wang (Univ. of Utah)

10．Nuclear Resonance Study of Molecular Motion and Phase Transition in Crystals. N. Nakamura (Osaka Univ.)

第3日，12月8日(水)

11．Molecular Motion in Hydrogen Halides. S. Hoshino (Univ. of Tokyo)

12．Librons and Rotons in the Ordered Solid Hydrogen. M. Fujio and T. Nakamura (Osaka Univ.)

13．What have we learnt from a Study of Methane Solids？ T. Yamamoto (Kyoto Univ.)

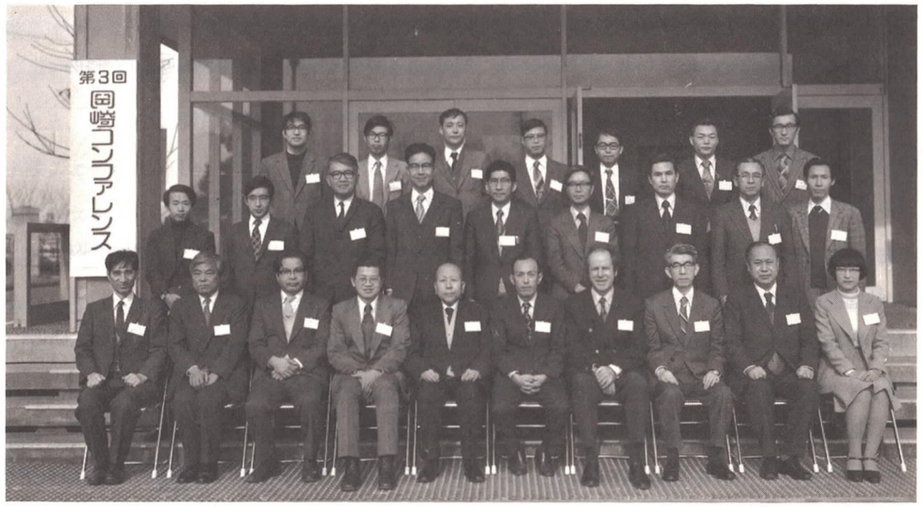
14．Neutron Scattering and Molecular Dynamics. Y. Yamada (Osaka Univ.)

15．Round-table Discussion.

第3日の最後のRound-table Discussionは，いろいろの角度から眺めた分子運動の諸断面を構造と分子間力の立場からある程度まとめ，我々の知識がどこまで達しているか，これから何を目ざすべきかを探れればという悲願から計画したものであったが，司会の不手際から，ほんの序の口だけで時間切れになってしまった。全体としてプログラムが過密であったと反省している。

講演と討論すべてを英語でしたことは，たいして障害とはならなかったと思う。分子科学とその関連分野は日本の科学界の中でも国際性の強い分野で，研究の水準も高いからであろう。12月5日の夕方のミキサーと第1日の夕食(いずれも有料)，第2日の研究所のレセプション，いずれも非常に賑やかで，2人の外国からの参加者もすぐにうちとけて，3日間のコンフェレンスを円滑に運営する上で大きな役割を果した。

今後の岡崎コンフェレンスを計画するときの御参考までに外国人参加者の取扱いについて二，三触れておきたい。すでに指摘されていることであるが，正規の予算措置ができる招待者は１名であるので，国際研究集会と名づけるために，たまたま学術振興会など他の機関ないし国際会議で来日中の外人学者に参加を呼びかけるなどの連携プレーが必要となる。第３回の場合には適当な人が得られなかったので，分子研に非常な無理をお願いして，３ヶ月滞在の枠を頂いて，２名の参加が可能となった。しかし，このため派生的に多くの無理を重ねる結果となった。その大部分は，分子研の設備・人員が整備されて研究が実際にできるようになるにつれて解消する性格のものであるが，それにしても，開催決定から開催日までの時間的余裕がもうすこしあればと思う。sabbatical year をどのように過すかは前年のうちにほとんど決める人が多いから，そのような情報が前もって手にはいれば，計画立案の段階でも，実施面でも格段に円滑な運営が可能となるだろう。日本ではあまり盛んでないが海外では活発だというような分野の研究者を招くことが，日本の分子科学の発展に大きな寄与をすると思われるので，そのような配慮が望ましい。



第３回岡崎コンフェレンス出席者

このコンフェレンスは分子研独得のユニークな企画であり，国の予算でする会合として例外的にスマートなものなので，ついでにもう一つ小さな希望をつけ加えれば，将来管理棟ができたら，前庭に旗竿を立て，外国からの訪問者があるときはその国の旗を掲げるくらいのお祭り精神があってもいいと思う。

このコンフェレンスは閉じた形のものなので，休憩時間も討論がゆっくりでき，その面の利点が大いに生かされたと思っている。参加者各位の御協力があってはじめてできたことである。また井

口教授には心ならずも大きな負担をおかけする結果となり感謝するとともに申しわけなく思っている。所長以下事務室の諸氏のお力添えで，非力ながら何とか会議を成功裡に閉じることができた。あわせてお礼を申しあげる次第である。

（1977年５月16日）

第４回岡崎コンフェレンス報告

共鳴および非線形ラマン散乱

東大薬　坪　井　正　道

分子あるいは固体からのラマン散乱の散乱断面積は，散乱光の波長に依存するのはもちろんであるが励起光の波長にも大きく依存する。特に励起レーザー光の波長を試料の吸収帯内またはその近傍にもって来てラマン散乱を観測するといろいろ面白い現象に遭遇する。昔はラマン散乱の測定は，試料に吸収されないような光を励起光として行なうのが常であったが，最近は好んで試料に吸収されるような光を使う。この場合特定のラマン線の散乱断面積が通常よりも２桁も３桁も高く，このようなラマン散乱を共鳴ラマン散乱という。ちょうど今，レーザーが次第に広い波長範囲でtunableになり普及しつつあるので，それらを使った共鳴ラマン散乱の実験がふえつつある。従ってその解釈をめぐっての論議や，これらの応用の開発も盛んである。

一方またごく最近注目を集めている現象にCARS（Coherent Anti-Stokes Raman Scattering）というのがある。通常のラマンスペクトル中ではアンチストークス線は弱い。これは常温で分子の振動励起状態（たとえば $v=1$）にある分子の数が少ないためである。ところが励起用のレーザー光（波数 ν_1）と同時に，出るべききラマン光（ストークス線）と同じ波数（ν_2）のレーザー光をも同時に入射すると一種の誘導放射によって $v=1$ における分子のpopulationが急激に高まる。もともとの励起レーザー光（ν_1）は依然として入射しているので，ここにアンチストークスラマン散乱（波数 ν_3）がちょうどレーザーのように発振，放射されることになる。これは一種の非線形ラマン散乱である。

第４回岡崎コンフェレンスは，このような最近のラマン散乱を主題として，1977年１月18，19，20の３日間分子研において実施された。世話人は広田栄治（分子研），伊藤光男（東北大理），田隅三生（東大理），平川暁子（東大薬），坪井正道（東大薬）。参加者は外国人４人を含めて合計34名であった。会議のプログラムおよび参加者名は次の通りである。

1月18日午前　開会リマーク，坪井正道(東大薬)；複雑な分子からの共鳴ラマン散乱，T. G. Spiro (Princeton)；コメント，坪井；ヘム蛋白の共鳴ラマンスペクトルと鉄—リガンド相互作用，北川禎三(阪大蛋白研)；コメント，西村善文(東大薬)；コメント，飯塚哲太郎(慶大医)。

午後　電子縮重基底状態をもつイオンの振動ラマンスペクトルにおけるanomalous polarization，浜口宏夫(東大理)；コメント，安積徹(東北大理)；2573Åレーザーで励起したアミド，ポリアミノ酸のラマンスペクトル，原田一誠(東大理)；コメント，京極好正(阪大蛋白研)。

夜　モデルの建設と破壊，島内武彦(東大理)；分光学における幸運不運，F. A. Miller (Pittsburg)。

1月19日午前　重なった吸収帯をもつ分子系の共鳴ラマン散乱，W. Siebrand (NRC. Ottawa, 現在，分子研)；コメント，安積；コメント，小日向俊介(東工大資源研)；共鳴ラマンスペクトルと電子励起状態のポテンシャル面，平川暁子(東大薬)；コメント，茅幸二(東北大理)。

午後　前期共鳴ラマン効果から知られる振電相互作用，伊藤光男(東北大理)；コメント，中島威(東北大理)；電子ラマン散乱，前田史朗(東工大資源研)；コメント，宇田川康夫(東北大理)；CARS，前田，コメント，Spiro.

1月20日午前　共鳴ラマン散乱の理論的側面，豊沢豊(東大物性研)；コメント，Siebrand；半導体の共鳴ラマン散乱，櫛田孝司(東大物性研)；閉会のリマーク，田隅三生(東大理)。

上記以外の参加者：安部雅子(松蔭女子大)，遠藤泰樹(分子研)，広田栄治(分子研)，柿本政雄(分子研)，川田建太郎(分子研)，森岡義幸(東北大理)，生越久晴(京大理)，斉藤修二(分子研)，田仲二朗(名大理)，塚田捷(分子研)，C. H. Wang (Utah大学，現在，分子研)，山田千樫(分子研)。

次にこの会で話題となったことをいくつか拾ってみよう。

ラマン散乱テンソルの逆対称要素が出現する機構。ふつう溶液や液体のラマン線の偏光解消度ρは，非全体称振動の場合$\rho=3/4$で全対称振動の場合$\rho<3/4$；前者をdepolarized，後者をpolarizedと呼んでいる。ところが共鳴ラマン散乱では$3/4<\rho<\infty$の場合があり得る。このことは既に，1934年にG. Placzekによって予言されていたが，実験的には1972年にT. G. Spiro (このコンフェレンスに参加)とT. C. Strekasとによってはじめて報告された。彼等はヘモグロビンのポルフィリン鉄部分をD_{4h}をもつ分子とみなした場合A_{2g}振動に相当するラマン線が$\rho\fallingdotseq\infty$となることを見出した(これをinverse polarizationといっている)。

ところがシトクロムCの相当するラマン線では，偏光解消度ρが3/4よりは大きいが∞よりはずっと小のものを見出した(これはanomalous polarizationといわれている)。いずれにしろこの現象は，理想的D_{4h}分子のA_{2g}振動に対してはラマン散乱テンソルの成分が$\alpha_{xy}=-\alpha_{yx}$，$\alpha_{xx}=\alpha_{yy}=0$という性質をもつことを示しているとみなされる。しかしその機構の実体は何か？については，

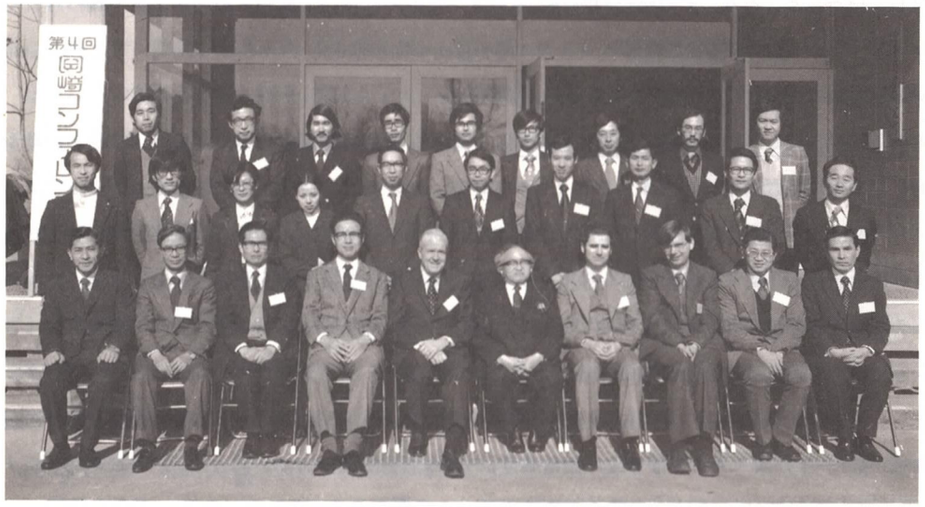
その後の多くの実験的および理論的努力にかかわらず確定していない。

このコンフェレンスでは，この問題に関連した話がしばしばあらわれた。まず，発見者のSpiro自身によるレビューがあり，大阪，京都グループによるポルフィリン関連の広範な研究結果の一部が北川，飯塚によって述べられた。このグループは安部，北川を中心としてポルフィリンの基準振動およびその^{15}N同位体効果の研究をも行なっているが，その結果は同じA_{2g}振動でもどういうモードの振動は強い共鳴ラマン散乱を起こし，どういうモードはこれを起こしにくいかを明らかにしつつある。西村は金属ポルフィリンのA_{2g}振動ラマン励起プロフィルの実験結果を示し，いつもQバンド領域にだけピークが出現し，Soretバンド領域にはピークが現われない点を強調した。平川は「Qバンドに相当する縮重電子励起状態内の，核運動量演算子を通じての振電相互作用というものが$\alpha_{xy}-\alpha_{yx}\neq 0$の原因となり得る」という東大薬グループの提案を示し，特にA_{2g}振動モードと共鳴ラマン散乱強度との関係について詳細に論じた。なお，ここでは論ぜられなかったが茅，伊藤らは同じくD_{4h}の対称性をもつsquarate ion ($C_4O_4^{2-}$) には共鳴条件でもA_{2g}振動ラマン散乱があらわれないことを見ている。Spiroもポルフィリン系以外の分子でinverse polarizationを示すラマン散乱があらわれる例はないか？の探索を行なっている模様で，これがまだみつかっていない点に言及している。ところが，その唯一の例外ともいうべきものは浜口，原田，島内によって調べられた$IrCl_6^{2-}$や$IrBr_6^{2-}$である。これらの分子では電子基底準位が縮退している。それがどうしてanomalous polarizationの原因になり得るのかを浜口が説明した。

振電相互作用している状態の振電波動関数。一般に，非全対称振動のラマン散乱は，その振動を通じての振電相互作用に起因すると考えられている。たとえば，伊藤，茅，宇田川らはピラジン，(V_h)の920cm^{-1}の面外変角振動(B_{1g})のラマン散乱は，330nm吸収帯に相当するn→π^*電子励起状態$\tilde{A}-B_{3u}$と$\pi\rightarrow\pi^*$電子励起状態$\tilde{B}-B_{2u}$との振電相互作用によると考えた。この考えによって$\tilde{A}$のポテンシャル曲線の非調和性も説明できるし，N_2レーザー励起のケイ光に920cm^{-1}の長いプログレッションがあらわれることも説明できる。ただし，この場合，ケイ光スペクトルには一つのプログレッション中にv''=偶のバンドもv''=奇のバンドも両方出現するのである(v''は電子基底状態での振動量子数)。これは「$\tilde{A}$における或る振電準位pの振電波動関数が$\Psi_p=\sum_{k\text{偶}}a_{pk}|e>|k>+\sum_{l\text{奇}}b_{pl}|S>|l>$(ここでは$|e>$は$\tilde{A}$の電子波動関数，$|S>$は$\tilde{B}$のそれ)のような形に書けるからである；つまり電子的には$\tilde{A}$の性質も$\tilde{B}$の性質も兼ね備え，振動的には偶関数の性質も奇関数の性質も同時に持つからである」と説明するのである。しかし，ここで次のような至極もっともな疑問が出された。「$\tilde{A}$電子状態のポテンシャルがどんなに変形しても，分子の対称性は保たれている筈であり，そうとすればそのようなポテンシャル内でのB_{1g}振動の波動関数は偶であるか，しからずんば奇でなければならず，そこから発するケイ光遷移の終点はv''=偶のみ，もしくはv''=奇のみでなければ

ならない」会場ではこれには満足な答が得られないまゝで終わった。

ダンピング定数。共鳴ラマン散乱テンソルの表式中「周波数分母」がゼロとならない為に，あるいはテンソル成分値が無限大とならない為に，分母に$i\Gamma$なるダンピング定数項を加えておくのが常である。Γは物理的には問題の遷移の行き先の準位の寿命に反比例するはずの定数であるが，実際にはラマン強度の励起周波数依存性プロフィルの実験結果に合うように調節して定めているのがふつうである。このコンフェレンスでもこのΓが時々議論の対象となった。たとえば，ラマン励起プロフィルのピークのブロードニングは必ずしも中間状態の寿命が短いこと(1)に起因すると限らない。中間状態が接近していくつもあるため(2)であることもある。その場合には分母に大きな$i\Gamma$を加える代りに(Γの値は小さくしておいて)中間状態の数だけKramers-Heisenberg型の項の和を取らねばならない。この(1)，(2)の区別は励起プロフィルの形から判断できることもあり得るというコメント(Siebrand)，また，中間状態がcontinuumである場合$i\Gamma$はどういう物理的意味を持つであろうか？などという疑問も出された。将来，ラマン強度の励起波長依存性プロフィルが次第に詳細に求められてくると，ダンピング定数の値も信頼性の高いものが得られ，それが蓄積されていくと新しい情報の源ともなり得るであろう。



第4回岡崎コンフェレンス出席者

CARS。 既に述べたCARSの実験を最近はじめた2人(前田，Spiro)の経験談あるいは苦心談が披露された。この方法がケイ光による妨害を避け得るという長所のあることは確かである。たとえば，フラビン残基を含むいくつかの重要補酵素については既に多くの研究者がその共鳴ラマン効果観測を試みたのであるが，強いケイ光に妨害されて成功しなかった。SpiroはCARSでFAD（フラビンアデニンジヌクレオチド）の良好なラマンスペクトルを得，更にFADが蛋白と相互作用すると1355cm^{-1}のラマン線が2つに分離することを見出した。この実験はCARSの有用性をじゅうぶんデモンストレートした。たゞし単にケイ光を避けるというだけなら，場合によっては他に方法がないわけではない（たとえば東大薬，西村は，2，3のフラビン補酵素の第1吸収帯でなく第2吸収帯内の励起光363.8nmを使うことによって共鳴ラマン効果を観測している——ケイ光は第2吸収帯付近の波長領域には現われないからである)。CARSの本来の取得はコヒーレントな発光が得られることにある。更にシグナルレベルの高いことをも利用し，低圧気体の高分解能ラマン分光などに有用の筈であるが，このコンフェレンスではそのような議論にたち入る時間はなかった。

Luck — Good and Bad — In Spectroscopy

ピッツバーグ大 **Foil A. Miller**

Luck, or chance, plays a considerable role in our lives. The career we choose, the job we take, the person we marry --- all can be influenced by chance events. Scientific research is a human activity, so it too can be affected by luck and some of bad.

1. Michelson's Accident [1]

There have been many cases of bad luck involving accidents, of course. My first example concerns an unfortunate incident which befell A.A. Michelson. Michelson, a distinguished physicist and a skilled experimentalist, was the first American to receive a Nobel Prize in science (for Physics, in 1907). In 1900 he turned his attention to the problem of making diffraction gratings, and built a much-improved ruling engine for the purpose. By 1915 he had ruled two very large, excellent gratings with it — much larger and better than any made previously. One in particular was notable, with 110,000 lines in a ruled area 22 cm wide × 11 cm high and a resolving power of 600,000.

Michelson was going to make a trip to Europe, and decided to take this grating with him to show to spectroscopists there. On the way he stopped in New York City to attend a dinner given in his honor. During his after-dinner remarkas he held up the grating to show the audience. It slipped out of his grasp, fell, and broke ! He never ruled another equal to it.

If I have a student who is unduly discouraged because he has had an accident in the laboratory, I tell him this story. Even the greatest experimentalists can have moments of disastrous bad luck.

2. R.W. Wood and the Raman Effect

The next example is also a case of bad luck. I have never seen this story in print, but have heard it verbally from two different individuals [2].

In 1923 Smekal developed a theory for the dispersion of light. It predicted what is now known as Raman scattering. If an optically clear, transparent sample is illuminated with monochromatic radiation, the main feature in the feeble scattered light (at 90°, for example) has the same frequency as the exciting radiation. This is termed "Rayleigh scattering". Smekal's theory also predicted some new and much weaker scattering at different frequencies (now called Raman bands). In 1925 Kramers and Heisenberg extended and refined the theory. They calculated the ratio of the intensity of the Raman bands relative to the Rayleigh scattering, but it is now known that their estimate of the Raman intensity was too small by many powers of ten.

At this time Prof. Robert W. Wood of Johns Hopkins University was one of the world's leading workers in experimental optics and spectroscopy. He had done outstanding research in fluorescence and in dispersion by sodium vapor. Therefore Kramers and Heisenberg wrote Wood, so the story goes, to ask whether he thought there was any possibility of observing the predicted new scattering at displaced frequencies. Wood looked at the intensity ratio which they had calculated, and having considerable familiarity with the intensity of Rayleigh scattering, concluded that there was no hope of observing such feeble radiation. He informed Kramers and Heisenberg of this, and dropped the matter.

It was bad luck that Kramers and Heisenberg had underestimated the intensity by such a large factor, because Raman lines were actually on some of the plates which Wood had taken while looking for the fluorescence of various materials. Had he looked for the lines instead of thinking it a hopeless project, Wood might have received a Nobel Prize, and some of us might be working in a field called "Wood Spectroscopy" rather than "Raman Spectroscopy". However that was not the course of history. It was C.V. Raman who discovered the new scattering (in 1928) and received the Nobel Prize. (Incidentally his experimental procedure seems impossibly simple today, and one marvels that he was successful. The sun was his source, complementary filters isolated the frequencies, and his eye served as detector !) Only a few months after Raman's announcement Landsberg and Mandelstam in Russia published their discovery of the new scattering,

followed shortly by Cabannes in France — three independent discoveries in the same calendar year.

Wood instantly recognized the importance of Raman's work. His first note on the subject appeared in Nature of September 8, 1928, about five months after Raman's original announcement on March 31 in the same journal. Wood's note was actually a 270-word cablegram, with many unnecessary words omitted to save money. It says in part, "Prof. Raman's brilliant and surprising discovery that transparent substances illuminated by very intense monochromatic light scatter radiations of modified wavelength, and that frequency difference between emitted radiation and one exciting medium is identical with frequency of infrared absorption bands, opens up wholly new field in study of molecular structure. I have verified his discovery in every particular, using improved apparatus which makes it possible to photograph strongest lines in few minutes. --- Now preparing for spectrum photograph forty foot focus prism spectrograph. --- It appears to me that this very beautiful discovery --- is one of most convincing proofs quantum theory of light which we have at present time. R.W. Wood." [3].

Wood immediately introduced the experimental methods that were generally used in Raman spectroscopy for the next 25 to 30 years. His reserach in fluorescence had provided the background, for the experimental problem was the same --- to illuminate with intense monochromatic radiation and observe feeble re-radiated light while effectively rejecting all parasitic exciting radiation. In particular he introduced a widely-used type of sample tube. The end opposite the spectrograph slit was bent in a smooth curve, drawn down and sealed off, and then painted black to make an efficient light trap. This became known as a "Wood tube" or "Wood horn". I once read in Chemical Abstracts a summary of a German paper on Raman spectroscopy. It said that the sample was contained in a wooden tube. This puzzled me so I looked up the original article. The German author had called a Wood tube a "Woodsche rohr", and the abstractor had re-translated this as "wooden tube" !

3. Randall's Mirrors [4]

Now it is time for some good luck, so I shall recount the story of Randall and his two large mirrors. Harrison M. Randall was a distinguished infrared spectroscopist at the University of Michigan. In the early 1930's he wished to build an infrared spectrometer with very large optics in order to obtain better resolution and reach lower frequencies. The limiting component of such an instrument is not the grating. They have coarse rulings in the low-frequency infrared, and the machine shop at Michigan was able to fabricate them in large sizes. The limiting component is the off-axis parabola needed to

collimate the light. An on-axis parabola is difficult enough to figure, and to make it off-axis compounds the problem greatly.

About this time Dr. John M. Schaeberle, a retired astronomer from Lick Observatory, moved back to his boyhood home of Ann Arbor. As a hobby, he undertook the construction of a high-aperture telescope. It was to have a large parabolic mirror, 50 cm in diameter and 75 cm in focal length (f/1.5). A 5 cm hole was to be drilled through the center of the mirror so that the image could be reflected back through this hole and viewed behind the parabola with a microscope. After many months of work the parabola was figured and polished to Schaeberle's satisfaction. He began to bore the central hole with a cylindrical saw. After he had gone a short distance into the glass, the mirror cracked and broke into two pieces! The break was a nearly straight line tangent to the central hole. Schaeberle abandoned his project, and must have been bitterly disappointed.

Randall learned of the accident through a conversation with Dr. Schaeberle, and was shown the two parts of the mirror. They had been stacked, uncovered, against the woodshed in Schaeberle's back yard. Randall immediately realized that here were two large, fast, off-axis parabolas. Schaeberle gave the two pieces to Randall, and both were eventually built into infrared spectrometers. Randall used the larger piece as the key component for a very large instrument. The mirror was able to illuminate a grating 56 cm wide x 25 cm high. This spectrometer was used for a great deal of very fine work starting about 1933. Thus Schaeberle's misfortune was converted into Randall's good fortune. Schaeberle expressed pleasure that the broken mirror would make a contribution to science after all.

4. Crawford's Calibration

In 1953 Bryce Crawford, Jr. and students at the University of Minnesota published a paper on the calibration of prism infared spectrometers [5]. For one frequency region methanol vapor was used as the calibrant. The paper says, "The methanol bands were obtained by placing a dish of methanol in the spectrometer. It is rather difficult to obtain a satisfactory spectrum, and we found that the best technique was to place the dish in the source housing and then replace the lid. After a short time a mild explosion occurred, and the concentration of alcohol vapor was then suitable for calibration".

This all sounds so casual, as though arranging a "mild explosion" was a routine procedure. It is an example of Crawford's well-known sense of humor. What really happened, I suspect, was that the window between the globar and the source compartment had

been removed. The methanol vapor came in contact with the hot globar rod and exploded. By sheer good luck the concentration of the remaining unreacted methanol was then suitable for the calibration.

5. Glockler and the Laboratory Fire [6]

My next story is one of an astounding coincidence. It involves George Glöckler, a well-known Raman spectroscopist, who at the time was Chairman of the Department of Chemistry at the University of Iowa. On one occasion he happened to be flying from Chicago to Denver, which at that time was a trip of perhaps four hours by propellor-driven plane. His seatmate was a young lady who asked about his work. He described it and said, "Our route takes us right over Iowa City, and perhaps I can point out the Chemistry building. There it is, right over there — Holy Smokes, it's on fire!" And so it was. Flames and smoke were pouring out of the upper floor windows. Poor Glockler was trapped in his plane and could not learn any more until they landed at Denver several hours later. He made a telephone call from there and found that the building had been badly damaged.

6. N-Rays [7]

My final story does not concern luck, but self-delusion. The excuse for including it is its intrinsic interest.

In March of 1903 Prof. René Blondlot, Head of the Department of Physics at the University of Nancy, announced the discovery of a new kind of radiation. He called it N-Rays, the N standing for Nancy. This was only eight years after the discovery of X-rays, and it was natural for people to wonder whether there might not be other forms of radiation waiting to be discovered.

The properties of N-rays were remarkable. When they fell on the eye, they increased its ability to see objects in a nearly dark room. Therefore a piece of paper or other white object, illuminated very feebly, was used for a detector. It was found that metals could transmit and refract N-rays, and also emit them. Twelve papers appeared in the Compte Rendus on the subject by the end of that year. Blondlot constructed a spectroscope, and with it he found that the N-rays had a line spectrum and was able to measure their wavelengths. This was an unusual instrument, for its prism and lenses were made of aluminum.

Research on the subject became very intense. It was claimed by Jean Becquerel, son of Henri Becquerel (who had discovered radioactivity) that N-rays could be transmitted

through a wire. If one end of the wire was held near the detector and the other end was passed over the skull of a living person some meters away, fluctuations in luminosity occurred at the detector. If the subject was anaesthetized, the N-ray intensity diminished as sleep deepened. Then it was found that metals could be anaesthetized with ether, chloroform, or alcohol, and they then ceased to either emit or transmit N-rays.

A great variety of people entered the field --- physicists, chemists, biologists, physiologists, and geologists. It was found that the rays were emitted by many systems, including growing plants, vibrating tuning forks, and even a human corpse ! In the first half of 1904 nearly 100 papers were published on N-rays — 20 by Blondlot himself. The French Academy announced that it was going to award him a prize of 20,000 Fr. and a gold medal for his discovery.

But there was a very odd feature about the N-rays --- only Frenchmen could seem to observe them. As Thomson said, "It was remarkable that the power of seeing N-rays seemed to be confined to Frenchmen. As far as I am aware no English, German, or American physicist succeeded in finding them, while in France they seemed to be universal."

Now Prof. R.W. Wood of Johns Hopkins University, whom we met earlier, enters the story. He was a renowned experimental physicist, a colorful personality, and an individual with unusual zest and verve. Wood was in Europe that summer and met Prof. Rubens of Berlin at a conference in London. The Kaiser had commanded Rubens to come to Potsdam and demonstrate the N-rays to him. Rubens had spent two weeks vainly attempting to duplicate Blondlot's experiments. One can imagine his embarrassment at having to confess his failure to the Kaiser. A distinguished German scientist had to admit that he could not duplicate what a Frenchman had done ! So Rubens asked Wood to go to Nancy and investigate the experiments going on there. Rubens felt that he could not go himself because Blondlot had politely answered his letters asking for more information. Wood, on the other hand, was neutral in the matter. He was from across the Atlantic, and he had had no prior contact with Blondlot. Since it was just the kind of assignment that Wood relished, off he went to Nancy.

Wood has described a number of preliminary experiments which Blondlot showed him [7, 8], but we shall go directly to the crucial one. They went into the darkened room where the spectroscope with the aluminum prism and lenses was located. Instead of having a plateholder or eyepiece to detect the spectrum, the instrument had a piece of cardboard with a narrow vertical strip of phosphorescent paint about 0.5 mm wide painted on it. This strip could be moved across the focal plane by a graduated wheel and screw. When the painted strip came to the position of one of the invisible lines of

the N-ray spectrum, it was claimed to become brighter and be made visible to the human eye. The setting of the graduated wheel was then read by an assistant so that the observer did not lose the dark adaptation of his eyes.

This experiment had convinced a number of skeptical visitors because Blondlot could repeat his measurements in their presence and always reproduce the same numbers. He claimed that a movement of the strip by 0.1 mm was sufficient to change the luminosity. Wood pointed out that this seemed impossible because the slit of the instrument was 2 mm wide, and since the magnification was unity, the line images would also be 2 mm. Blondlot replied that this was just another of the inexplicable properties of N-rays.

Blondlot then went through the N-ray spectrum, stopping at each of the lines so the assistant could record the setting of the graduated wheel. Wood asked Blondlot to repeat the measurements so he could see for himself how reproducible they were. In the dark he reached over and lifted the aluminum prism off its table. Blondlot went through the spectrum a second time, and the same settings were recorded as before ! Wood carefully replaced the prism before the lights were turned on. This ended the demonstrations. Wood sent a letter to Nature the next morning telling of his findings [8]. No names were mentioned; it is an account of "a visit to one of the laboratories in which the apparently peculiar conditions necessary for the manifestation of this most elusive form of radiation appear to exist." The letter was translated and re-published in a French weekly popular scientific journal, and comments were invited. One of the most scathing was by Le Bel (famed for his concept of the tetrahedral carbon atom), who said, "What a spectacle for French science when one of its distinguished savants measures the position of the spectrum lines while the prism reposes in the pocket of his American colleague."

Wood's letter ended the whole affair, of course. Only two additional papers on N-rays appeared in the Comptes Rendus — perhaps it was too late to recall them. The French Academy gave its prize and gold medal to Blondlot at its annual meeting in December, but it was given for his life's work taken as a whole [9]. Blondlot was removed as Head of the Institute of Physics, and resided near Paris for the rest of his life. Although he lived another 27 years — until 1931 — he never conceded to being in error. N-rays were not a fraud; Blondlot sincerely believed in them. It seems to be a case of self-delusion.

If you go to Nancy today you can find two mementoes of this episode. First, Blondlot gave his prize money to the city of Nancy for the construction of a park. Second, the building where he worked still stands. As one faces the ancient city gate, Porte de Craffe, from the city side, it is about 100 meters to the left. Until mid-1975 it was

occupied by the Institute of Physics, but the Institute then moved to a new campus on the outskirts of the city and the building has been converted to a girl's school. It has wide halls and stairs, great high ceilings, enormous door keys, and creaky wooden floors — just the kind of place one would imagine for N-ray experiments !

Conclusion

This ends my account; I hope that it has given the reader some amusement. It is also my hope that your work will be favored by good luck and spared any bad luck.

I wish to express my appreciation to the Institute of Molecular Science for inviting me to participate in the Fourth Okazaki Conference on Resonance Raman Scattering. I am greatly indebted to Professor M. Ito of Tohoku University for warm hospitality and a stimulating stay in his laboratory. It was made possible by a grant from the Japan Society for the Promotion of Science for which I am most grateful.

References

1. The author heard this story in a talk given by Prof. G.R. Harrison of M.I.T. It is given in part in J. Opt. Soc. Am. **39**, 134 (1949), especially p.414.
2. Private conversations with Prof. D.H. Rank and Prof. R.C. Lord.
3. R.W. Wood, Nature **122**, 349 (Sept. 8, 1928).
4. H.M.Randall, Rev. Sci. Instrs. **3**, 196 (1932); J. Opt. Soc. Am. **44**, 97 (1954) (best).
5. Downie, Magoon, Purcell, and Crawford, J. Opt. Soc. Am. **43**, 941 (1953). Esp. p.945.
6. G. Glockler, personal conversation.
7. William Seabrook, "Dr. Wood, Wizard of Science".
8. R.W. Wood, Nature **70**, 530 (Sept. 29, 1904).
9. The citation for the Prix Leconte of 1904 may be found in Compte Rendus **139**, 1120-22 (19 December 1904).

本稿は第4回岡崎コンフェレンスの夜のセッションの講演内容を好評に応えてMiller 教授にまとめていただいたものである。

51年度の共同研究を顧みて

分子研　井　口　洋　夫

国立大学共同利用機関に属する分子科学研究所として，その特性を生かした“共同研究”はどうあるべきかは，過去・現在・将来を通じての重要な問題である。その具体化については充分議論し，実行に移しつつある。

しかし，未だ研究所全体計画の30～40%を了えた現時点では，これを完全に決めてしまうことは困難である。むしろ試行錯誤を重ねつつ，分子研に於ける共同研究への最も適した道をみつけるべきであろう。

「共同研究」をその予算的裏付けを持って行っている研究所は少なくない。しかし，今迄に発足した国立大学共同利用機関と分子研では，その研究方法や規模が異なり，当然，共同利用のあり方も異ってくる。例えば，高エネルギー物理学研究所に於ける大規模な加速器を主体としての研究推進の場合の共同利用は，その加速器の効果的利用と云う問題にかかってくるであろう。極地研も大きな事業を持っているので，その共同利用も，恐らく吾々分子研に比べてかなり異なったものであろう。

その意味からも，分子科学研究所に於いては共同研究を通して，新しい型の共同研究機関の役割を果すべきと考えている。その基本は“共同利用”ではなく“共同研究”ではあるまいか？　勿論，分子科学研究所では，共同利用に供し得る装置の設置も行って居り，51年度にも25件の施設利用があった。

しかし，分子科学研究所を一つの舞台として，所内外の研究者が共同で研究を行う——その場合には，研究者の頭脳の共同利用も含まれると考えている——ことが主体となるのではあるまいか？従って，場合によってはその研究・討論の場が分子研以外になることもあり得る。

所で，51年度の“共同研究”（分子研ではその中に狭義の共同研究，協力研究，研究会，施設利用が含まれる）では，創設当初の研究機関としての不確定要素を多く含むため，研究会の回数が多過ぎたり，共同研究の成果が必ずしも満足でなかったりしていることを率直に認めざるを得ない。しかし，この試行錯誤の貴重な経験を生かして，これから長くつづく“分子研の共同研究”を最も分子研に適合したものにするべく，昭和52年度に踏込んで行きつつある。

51年度の共同研究の実績をあげると：

共　同　研　究	3件
協　力　研　究	20件

研　究　会　　14件

施　設　利　用　　25件

であった。なお，その具体的な内容については，その一部を本レターズ及び77年版分子科学研究所要覧に記載することにしている。

研究会報告

レーザー誘起化学反応

東大教養　土　屋　荘　次

昨年12月16，17日の両日，表記の研究会が分子研で開催された。この研究会は，分子研小谷野助教授より化学反応素過程に関連する将来性のある問題について研究会を組織したいという提案があり，分子研でのこの分野の研究計画などを考慮して表記のテーマに落ち着いたものである。丁度，ピコ秒パルスの研究会も企画中であったので，日程を前後するように組み，両方に出席される方の便宜をはかった。

研究会の目標としては，「レーザー光照射によって起こる化学反応が，普通の熱，光化学反応とどう違っているか」を理解することを考慮した。それは，もしその点についてある程度の了解が得られゝば，レーザー誘起化学反応を通じて，われわれは分子の反応性について今までと違った視点を持つことができる。この研究会では，問題を三つに分け，少数の演者とゆったりした討論時間を割当てることにした積りであったが，それでもやはり窮屈な日程であった。三つの問題は，

(1)　分子のダイナミクスとしての化学反応は，どの位わかっているか？

(2)　レーザー光照射で分子は，どんな状態になり得るか？

(3)　レーザー光励起にともなう化学反応は，どんな点で興味深いか？

であった。後から反省すると，上記の問に答えがでるようであれば研究会の必要性もないわけで，やゝ欲ばり過ぎの問題提起であったと考えている。以下，簡単に各講演の内容を紹介しておく。

上記の三つの疑問点の第一については，化学反応の統計理論的なアプローチと衝突ダイナミクスの立場のそれとがとり上げられた。すなわち，

梶本興亜(阪大基工)「分子の活性化と化学反応」

中村宏樹(東大工)「反応素過程の動力学的研究の現状」

の二つである。梶本は，RRKM理論の前提となっている「強衝突の仮定」と「速い分子内エネルギー移動」について非レーザー実験でどの位まで理解できたかをまとめた。すなわち，化学活性化，赤外線発光，分子線反応などの実験結果より統計理論が適用できない場合があって，エネルギー過剰中間体における分子内エネルギー移動の速さを推定することも可能であることを説明した。中村は，動力学的理論の手法について，古典軌道法，半古典的理論，量子論のそれぞれの比較をA＋BC→AB＋Cの反応について行なった。反応のしきい値附近において，量子論的な計算と古典論のそれ

とは可成りの相違を示すことがあること，反応の途中に断熱ポテンシャルが二つ関与するいわゆる電子的に非断熱な反応のとり扱い，$H^+ + D_2 \rightarrow HD^+ + D$の反応について実験と計算の比較，など理論計算の手法の進歩が主として解説された。

第二の課題に関連して，

霜田光一(東大理)「レーザー光による分子の多光子励起」

安積　徹(東北大理)「励起振電状態」

の二つの講演が準備された。

原子や簡単な分子の多光子吸収の実験がレーザー光によって可能になったが，普通その際の吸収光子数は5以下である。これに対して，やゝ複雑な多原子分子では30～50の光子数の吸収が起こりこれにともなって化学反応が誘起される。とくに，SF_6のν_3バンドを10.6μm CO_2 レーザーで励起する実験について次の様な結果が紹介された。すなわち，衝突過程が関係しないこと，入力パワーにしきい値があること，解離の波長依存性は一光子吸収のそれより幅が広いこと，2波長のレーザー光の同時照射では入力パワーのしきい値が大巾に低下し，解離の波長依存性は片方の弱い方のレーザーにしか見られないこと，などである。この結果は，振動の状態密度が$10^2/cm^{-1}$程度の準位への数光子励起と連続準位を多光子励起する二つの過程のあることを示唆している。

有機分子の単一振電状態への励起が単色性のよいレーザー光を用いると可能であるかどうか，つまり，分子内振動エネルギー移動で，エネルギー再分配が起こるかどうかの問題提起があった。ナフタレンのS_1の蛍光寿命の高分解能の測定は，振電準位間の相互作用(communicatingでない)がない場合に相当するように見える。しかし，準位の巾と状態密度の逆数が近くなると振動モード間の移動が考えられる。こゝで，分子内モード間移動，または，エネルギーの再分配の物理的意味について，量子力学的定常状態が光励起によって実現されたとき，孤立分子の振動モード間のエネルギー移動があってよいのかという素朴な疑問が提出され，面白い議論が展開された。

第3の課題は，レーザー照射による化学反応の特質であり，次の3つの講演があった。

松為宏幸(京大工)「分子振動の選択励起による非熱的反応」

馬場宏明(北大応電研)「単一エネルギー準位への励起にともなう電子過程」

宏間　宏(電通大)「レーザーによる同位体分離とその問題点」

レーザー励起によって，state-to-state (反応始状態も反応終状態も確定した)反応素過程の研究が大巾に前進したことは事実であるが，未だ道は遠い。レーザーによる非熱的反応の研究のためには，反応系，生成物検出について画期的な進歩が望まれる。

レーザー技術の進歩は，$0.1cm^{-1}$以下の幅でナノ秒の励起，それに続く反応を可能にした。その結果，振電準位のみならず回転振動準位の相違が分子内無輻射遷移や光化学反応にどう影響するか

ということまで問題となる。最近のH_2CO，NO_2の研究成果が，これに関連して紹介された。

レーザー同位体分離は，技術的経済的な重要な問題であるが，基礎研究がこれ程実用化への大切なステップとなる技術も数少ないであろう。高分解能分光，励起原子分子の反応，多光子解離などが基礎研究の課題として提出された。

最後に，田中郁三(東工大理)が，問題を総括し，分子内エネルギー移動の研究方法としてナノ秒とピコ秒とで見える世界が違うこと，レーザーのコヒーレントな性質を化学反応でどう応用すべきかなどを述べた。

以上，一日半の短い日程であったが，化学反応論，分子の電子状態論，量子エレクトロニクスの諸分野の人々が席を共にして，共通の話題にとり組んだ意義は，参加者一同にとって大きなものであったと思っている。

以　上

(1977年5月16日)

ピコ秒パルス

分子研　吉　原　經太郎

レーザーのモード同期の技術が発展し，ピコ秒あるいはサブピコ秒の強力な光パルスが得られるようになってからすでに相当な時間が経過している。この間ピコ秒パルスを制御するための知識も徐々に蓄積され，またより多くの科学者がピコ秒パルスを利用して，超高速現象の解明にとり組むようになって来た。他方波数分解の技術からリアルタイムにピコ秒を用いないで，超高速現象を観測する新しい方法も提案されている。そこでこの時期にピコ秒パルスの発生，制御，測定等についての研究の現状を俯瞰すると共に，分子科学における超高速過程への応用，その将来性等についての討論を行うこととした。企画は東大・工，分子研・清水富士夫助教授と共同で行った。

丁度「レーザー誘起化学反応」の研究会も企画されていたので，この研究会に引きつづいて行うこととし，12月17日，18日の2日間開催した。出席者はレーザーのハードウエアの専門家をはじめ広い範囲に亘り，約40名で，盛会であった。以下プログラムにそって具体的な内容を記す。

第1日目 (12月18日(金))

総論 (はじめに)　　東大・理　霜田光一

モード同期の歴史，原理について紹介があった。ピコ秒パルスの幅を決める要因として不確性関係の他にモードの数の平方根に起因するものがあり，これがパルス幅を長くしている。現在色素レ

ーザーでパルス幅が最高0.2psのものまで得られている。

ピコ秒パルスの化学への応用　　東工大・理　田中郁三

ピコ秒パルスを分子の励起状態の緩和の研究に用いたいくつかの例についての解説があった。アズレン，レチナール，アントラセン，等の実例について紹介があり，さらに気相での励起状態の，randamizationの問題，前期解離やシス－トランス異性化等の化学反応等へのピコ秒パルスの応用の可能性について論ぜられた。

固体レーザーによるピコ秒パルスの発生　　阪大・工　加藤義章

YAGやいくつかの種類のガラス材質のちがいによるピコ秒レーザーの特性が極めて具体的に論ぜられた。またモードロッキングのかけ方によるパルスの幅，安定性等についても詳しく述べられた。

ピコ秒レーザーの安定化　　日本電気　岸田俊二・山根毅士・武中浩郎

レーザー共振器の特性，従来の一般的モード同期法の問題点が指摘された。また新しい強制変調付加方式の特徴と問題点が示された。

共鳴レーリー型光混合と超高速緩和過程　　東大・物性研　矢島達夫

はじめに緩和時間の概念，緩和時間とスペクトルの広がり等についての解説があった。ついで光混合の一般論および新しい共鳴レーリー型光混合を用いた色素分子の超高速緩和過程の実測について具体的に論じられた。

第２日（12月18日(土)）

レーザーによるエクサイプレックスの研究　　阪大・基礎工　又賀　昇

反応中間体としてのエクサイプレックスの重要性について解説があった。特にエクサイプレックス生成の動的過程について，いくつかの実測例を中心に詳しく述べられた。

コヒーレントな光パルスの定常孤立伝搬　　京大・理　池田研介

コヒーレントなピコ秒パルスと物質の相互作用の一般論について解説があった。

ピコ秒パルス発生の現状　　電総研　黒田寛人

ピコ秒パルス発生について，パルス発生法，レーザー材料の特性等から多角的に検討された。各種のピコ秒レーザー分光法，波長変換法，光増幅法等について詳しく比較検討が行われた。

OPOによるピコ秒可変波長パルス光の発生　　東大・物性研　楠田孝司

optical parametric oscillationの方法によるピコ秒可変波長パルス光の発生の原理および実際について詳しく述べられた。はじめに可視部で可変波長を得るための非線形結晶の特性を詳しく比較し，温度制御の条件，エタロン挿入の効果，実際に得られた光の特徴について検討が行われた。

ピコ秒パルスによる励起状態のコヒーレンスおよびストリークカメラの試作

京大・理　松岡正浩

物質の基底状態，コヒーレントおよびインコヒーレントな励起状態とコヒーレント光の相互作用，これによっておこる各種の緩和について解説，ならびに実測の結果についての説明があった。またストリークカメラ試作の経験について述べられた。

TPF等によるピコ秒現象の測定方法　　東大・工　斉官清四郎

光によって誘起される複屈折と二色性について，その測定法（一光子的，二光子的，ラマン的）の原理と実測結果について解説が行われた。

金属錯体の立体化学

名大理　山　寺　秀　雄

昨年12月20日—22日の３日間，上記の研究会が分子科学研究所の昭和51年度共同研究の研究会として開催された。

金属錯体の化学(錯体化学)は今世紀のはじめ頃Wernerにより無機化学の新しい分野としてその基礎が築かれたが，今世紀中頃から分子科学の理論および方法の影響を受けて急速な進歩発展を遂げつつある。研究対象として金属イオンに有機化合物が配位した錯体を含む錯体化学は，無機化学と有機化学・生物化学との境界領域としても注目されているが，その発展のために無機化学・有機化学の伝統的研究方法に加えて新しい分子科学的アプローチに期待するところ大である。一方錯体化学の研究成果が，新しい問題の提起や研究対象の提供などを通じて，分子科学の発展に寄与することも期待されている。

研究会の主題として選ばれた「金属錯体の立体化学」は，金属錯体の反応と密接な関係にあることはいうまでもないが，金属錯体の分光学的性質・磁気的性質などの物性とも密接な関係をもち，錯体化学の中心的課題の一つとしてその発展が期待されている分野である。

研究会の第１日は，金属錯体の立体化学とＣＤスペクトルなど分光学的性質との関係を中心主題として講演と討論が行われた。第２日午前は金属錯体の立体化学と反応との関係が中心主題で，立体化学に関連したいくつかの特徴ある反応について講演・討論があり，午後には磁気的性質に関連する問題として，金属錯体の立体化学と磁性および核磁気共鳴との関係について講演・討論があった。第３日は総合討論にあてられ，第１，２日の討論を受けて，海崎純男氏(阪大理)による錯体の立体化学における問題点の提起と齊藤喜彦氏(東大物性研)による金属錯体ＣＤの理論と実験の現状

と題するレビューを中心としてさらに深い討論がなされた。つぎに井口洋夫氏(分子研)の講演を中心として，錯体化学と分子科学，実験と理論の研究者の間の有効な協力を実現するための意見の交換がなされた。

以下に各講演の題目と要旨を記す。

第１日

新村陽一(阪大理)「コバルト(Ⅲ)錯体の立体化学」(総合講演)

Co(Ⅲ)錯体のジアステレオマーの立体化学について，つぎの３点が指摘された。(ⅰ)２個の不斉炭素原子のCD隣接効果の加成性は，キレート環のキラル配座が共存すると見かけ上成立しないこともある。(ⅱ)不斉配位硫黄原子は，硫黄の関与する荷電移動吸収帯のみならず，d—d吸収帯でも強いＣＤ隣接効果を与える。(ⅲ)分別結晶によるジアステレオマーの分離に関しては，多成分系溶解度状態図が有用な知見を与える。

海崎純男(阪大理)「ニトリト錯体の立体化学」

光学活性cis-，trans-〔Cr(ONO)$_2$(diamine)$_2$〕$^+$のONO$^-$の配位子内遷移(25,000—28,000cm^{-1})領域のＣＤは振動構造が顕著で，著しい溶媒効果を示す。これはニトリトの立体配座と関連した現象と考えられる。

○小島正明・藤田美保*・藤田純之佑(名大理・名市大教養*)「Δ—およびΛ—トリス(RR—２，４—ペンタンジアミン)コバルト(Ⅲ)錯体のCDスペクトルと立体配座」

R,R—２，４—ペンタンジアミンのCo(Ⅲ)錯体のCOが濃度，対イオン，溶媒等によって変化するのは対イオンとの間でイオン対を形成し，六員環キレートの配座が変化するためである。

鈴木君子・○佐々木陽一・齋藤一夫(東北大理)「二三のMo(V)—アミノ酸錯体のCDスペクトル」

Mo酵素のモデルとして注目されるMo(V)のシステイン錯体およびその関連化合物について，各種溶媒中でＣＤスペクトルを測定し，これらの錯体の構造に関して興味ある知見を得た。

中山泰次・松本圭司・○大井俊一郎・黒谷寿雄(阪市大理)「Pt(Ⅱ)，Pd(Ⅱ)錯体の構造と円二色性」

若干の上記錯体のＣＤと構造との関係を検討した。X線法で得た絶対配置に基づいてＣＤの特徴を調べ，場合によっては^{13}C NMRデータから得た溶存状態での配座異性体の分布を考慮してＣＤの内容を吟味した。

岩本振武(東大教養)「振動スペクトルによる結晶空間群および分子対称の検討」

錯体分子または錯体結晶構造に対称心が保存されるか否かについて，赤外スペクトルとラマンスペクトルの精密測定が有効な情報を与え得る実例を錯体・包接体で示した。

武内章・○山田祥一郎(阪大教養)「シッフ塩基の銅(Ⅱ)錯体における異性現象—異性体の単離，

構造および性質」

シッフ塩基の４配位銅錯体の構造異性体を数組単離することに成功した。その構造をX線により決定し，異性体間の変換やＵＶおよびＩＲスペクトルなどを構造と関連して検討した。

第２日午前

荻野博(東北大理)「キレート環生成反応と立体化学」(総合講演)

キレート環の生成反応を次の諸点から論じた。１）標記の反応を速度論的な立場から考察した。２）最近報告された大キレート環化合物の合成や性質を紹介し，中員キレート環が生成しにくい理由を論じた。３）二座配位子を単座配位したある種の錯体では，環状構造を持つ内部共役塩基が生成する。このような広義のキレート環の安定性について考察した。

○簸野昌弘・村上祐(東北大非水研)「ピロリジニル基を有する光学活性テトラミンを含むNi(Ⅱ)およびCo(Ⅲ)錯体の立体特異的配位と立体選択性」

置換活性のNi(Ⅱ)錯体においても立体特異的配位をする光学活性テトラミンを合成した。このテトラミン中にある(S)—プロリン単位の立体規制効果について論ずると共に類似のテトラミンのCo(Ⅲ)錯体の立体構造と比較した。

神田精一(徳島大工)「気・水界面でのtrans→cis異性化」

—(Cu-N-C-C-S)—n からなる網面を持つ故に，半導体的性質を備えた配位高分子の立体特異的合成を試みた。この反応を界面化学的手段で実現し薄膜試料を得た。

佐々木行美(東大理)「ヘテロポリ酸と有機誘導体及びその異性体について」

最近進展した有機基を含むヒ素をヘテロアトムとするポリモリブデン酸の結晶構造解析について述べ，また広くポリ酸の異性体について考察し，幾何異性，光学異性及び水和異性を実証した。

木田茂夫(九大理)「錯体の立体構造と磁性」(総合講演)

第一遷移金属錯体の磁性について，Van Vleckの式に基づいて簡単な概説をした。低スピンCo(Ⅱ)錯体の有効磁気モーメント(1.9—2.7BM)は，平面型錯体では大きく，正八面体型に近ずくにつれ小さくなるという事実は，理論的に容易に説明される。平面型Co(Ⅱ)錯体の基底状態は，ＥＳＲの結果から２群に分類される。ポルフィリン等で代表されるものでは，d_{z^2}に不対電子が局在し，シッフ塩基４座配位子の錯体で代表されるものでは，d_{yz}に不対電子が局在する。このような相違は配位子の共役系の大きさと密接に関係する。

井上元道(名大理)「常磁性錯体の固体のプロトン磁気共鳴」

スピン相互作用の機構を解明する目的で，固体プロトン磁気共鳴を用いCu$(NO_3)_2$(pyrazine)とCu$(HCO_2)_2$について配位子上の不対電子密度を決定した。

安井隆次(高知大文理)「アミノ酸を含むCo(Ⅲ)錯体の^{13}C NMRについて」

Co (Ⅲ)ーアミノ酸錯体について，アミノ酸の単座，キレート配位による配位様式変化と^{13}Cシフト変化との相関性，^{13}C NMRの幾何構造決定への応用例を紹介した。

○吉川雄三・山寺秀雄・中島良昭*・宇津野峻司**・立畠章** (名大理・和歌山大教育*・静岡大理**)「エチレンジアミンを含むCo (Ⅲ)錯体の^{13}C NMRスペクトル」

cisー〔CoXX (en)$_2$〕$^{n+}$ (XX=CO_3, (H_2O)$_2$) のエチレンジアミンの^{13}C NMR シグナルの帰属をcis (X)，cis (NH_3)ーおよびcis (X)，trans (NH_3)ー〔CO (XX) (NH_3)$_2$ (en)〕$^{n+}$における化学シフト値に基づいて行った。

伊藤翼(北大理)「 核Overhauser効果を利用した環状多座配位子錯体のキレート環コンフォーメーションの決定」

核Overhauser効果の測定によりキレート環のconformationを決定できる例を，14員環状窒素4座配位のNi (Ⅱ)錯体について示した。

相関分子科学と基礎有機化学

東北大理　櫻　井　英　樹

昭和52年1月31日と2月1日の両日にわたって上記研究会が新装なった分子科学研究所会議室で開かれた。本研究会は，基礎有機化学と分子科学の研究者が，それぞれの領域の現状と問題点を認識し，あわせて相関分子科学という新しい概念によって成立すべき学問領域への展望を持とうと企画された。

基礎有機化学は，構造論，反応論および合成論において著しい進歩発展をとげ，関連する諸科学に多大の影響を与えて来た。その役割は現在も変らないものの，多様化する関連諸科学への展開，基礎的方法論の開発，および基礎有機化学の情報データの流通整理など基礎有機化学がかゝえている問題は多い。一方，基礎有機化学者から見れば，その基礎科学としての分子科学の進展やその研究の動向をよく理解することは自身の発展のために必須であるが，分子科学者の側からすれば，その研究の具象化ないしはその発展の方向として，あるいはその研究材料源としての基礎有機化学に多大の関心を抱かざるを得ないと考えられる。そこで各領域の問題点を検討し，分子科学と基礎有機化学の相互理解を深め，具体的な協同関係に発展せしめることは大いに意義あることと考えられる。

研究会は各領域の研究者からその現状とかかえている問題点などについて話題提供がなされ，これについて質疑応答をする形で進められた。まず代表者である櫻井英樹(東北大・理)よりこの研究

会が企画されるようになったいきさつ，目的などについて，ほゞ上で述べたような説明がなされた後本題に入った。

大木道則(東大・理)は有機化学の構造論の立場から話題を提供した。構造有機化学は比較的複雑な化合物を対象とするとともに，研究対象を具象化し，必要に応じて化合物をデザインし作り出すことができる点に特長があり，また，分子の構造を静的のみならず，動的にもとらえるところにも特長がある。例として反応過程を知るモデルとして，カルボニル基と窒素孤立電子対との相互作用による構造変化などの研究を示した。また，カルボニウムイオンに関する速度論と分子軌道論による予測との不一致，酸性度や塩基性度における気相と液相での序列の相異など，分子間相互作用でまだ完全に解決されていない問題があること，さらには化学反応を理解するための立体効果の定量化などの問題点を指摘した。

野依良治(名大・理)は有機化学の合成論の立場から述べたが，方法論とともに，合成と新規反応開発の関係とその位置づけについて話題を提供した。高い選択性を有し，かつ一般性をもつ新規反応の開発の必要性，さらに合成に際しては，反応に対する深い洞察力はもちろんのこと，豊かな構想が必須であることなどを指摘した。実例として，α，α′ージブロモケトンとカルボニル鉄から誘導される2ーオキシアリル陽イオンを用いて他の方法では得難い種類の7員環，5員環化合物が選択的にかつ好収率で得られることを紹介した。さらにこの反応を展開して，2，3の天然有機化合物が容易に合成できることを示した。

櫻井英樹(東北大・理)は有機金属化学の立場から述べた。有機金属化学が有機化学または広い意味での分子科学で果した大きな役割の一つとして，非局在化結合や電子不足結合など新しい結合の概念を導入した点を強調した。この役割は現在でも依然として重要であるが，具体的には有機ケイ素化合物を例にとり，ケイ素ーケイ素結合が炭素ー炭素π結合と，種々の点で類似の反応性を示すことを例示し，これがσ結合の反応性を検討するよいモデルであることを示した。さらにそれを発展させたビニルジシランとカルボニル鉄との反応によって，未知の新しい結合形式を有する錯体，η^3ーシラプロペニル鉄錯体が生成することをその最近の研究成果の中から示し，有機金属化学がこのように依然として，有機化学さらに分子科学に対し新しい素材を提供していることを述べた。

広田栄治(分子研)は主としてマイクロ波スペクトルによる有機分子の構造の研究成果を，その最近の研究例から示した。こゝでは橋頭位にハロゲン原子を有する〔2.2.2〕ビシクロ化合物，また骨格内に窒素，ケイ素，イオウを有するビシクロ化合物の分子構造および分子運動，重水素置換エタンやメタン類の双極子モーメント，さらにはエチレングリコールの熱分解で生成する短寿命のビニルアルコールの検出および構造などについての成果が紹介された。分子科学の立場から興味のある分子，とくに同位体やヘテロ原子で一部を置換した分子などの合成法の確立，この点においての有

機化学者との協同研究などについて論及した。

吉原經太郎(分子研)はレーザーを用いての光化学反応過程，励起分子の動的挙動の精密測定の結果を紹介した。こゝでは，1ーフェニルー2ー(2ーナフチル)エチレンの光異性化反応過程，アジドの光分解反応における励起種の多重度，失活過程に関する研究成果，さらには，芳香核求核置換反応におけるσー錯体の寿命の測定に関する研究結果が紹介された。

井口洋夫(分子研)は最後に，分子科学研究所の組織，研究体制，建物などの現況と将来の構想について説明した。とくに岡崎地区に加わることになる生物科学総合機構との相互関連，なかんずく管理部の体制の問題等，流動的な現状についての説明がなされた。

第2日目は主として基礎有機化学のグループによって研究体制，研究動向など前日の諸討論をもふまえた討議がなされた。

諸般の事情で研究会の開催が多忙な学期末となったこともあって，参加者が基礎有機化学関係からは，文部省科学研究費補助金総合研究(B)「基礎有機化学の方法論と情報流通に関する可能性の総合研究」研究班(代表者・櫻井英樹)実行委員に，また分子科学関係からは分子研の研究者に限られてしまったのは，その内容から見ても残念であった。しかし，今回がその最初の試みであり，また時間的制約があったにもかゝわらず，両分野の研究者が共通の場で議論できたことは，所期の目的に照らして充分成果があったように思われる。将来にわたってもこのような機会が設けられるならば，両分野の研究者の相互理解が深められ，各領域の進歩発展のみならずそれを総合した形での新しい化学の萌芽が期待される。

有機分子性結晶における電荷の移動機構
(Transport Processes in Organic Molecular Crystals)

お茶の水大理　丸山有成　・　分子研　井口洋夫

Dr. W. Siebrand (カナダNRC)が分子研の外国人招へい研究員として滞在されたのを機に，2月3，4日の両日標題の短期研究会を完成したばかりの分子研新実験棟の仮の図書室において行なった。同博士は以前から有機分子あるいはその集合体におけるエネルギー緩和の問題を理論的測面から研究しておられ，特に数年前に有機結晶(アントラセン)中の励起子あるいは電荷の移動過程について優れた研究を発表しておられるので，この問題を中心としてその後の理論的実験的発展を含めて討論する事を目的とした。

討論は各種の有機結晶における電荷移動度の測定及びその解釈，更に新しい電荷移動錯体の電子

状態，励起子と振動との相互作用などにも及んだが，Siebrand氏及び国内のこの方面の研究者20数名の出席を得て活発な議論がなされた。以下プログラムに従って紹介する。

(1) Introductory Talk (井口洋夫，分子研)

Siebrand博士の紹介及び有機結晶の電導現象研究の現状について概説的な解説が行なわれた。

(2) Review on Experimental Results (丸山有成，お茶の水大理)

これまでに報告されているいくつかの有機結晶中の電荷移動度の測定値（ドリフト及びホール移動度）をまとめて示し，次にその温度依存性の測定例を紹介した。特にアントラセン結晶の場合の理論的解釈として，Small-polaron理論を用いたSiebrand博士らの計算結果を紹介し，更に液体状態，非晶状態での移動度の測定についても簡単に述べた。討論としては，ドリフト移動度とホール移動度との相違及びその解釈について議論がなされた。

(3) Charge Carrier Mobilities in Durene and Anthraquinone Crystals (W. Siebrand, NRC)

Siebrand博士自身は現在は電荷移動の問題を直接手がけていないということで，NRCにおいて，D. F. Williamsによって最近行なわれた実験が紹介された。それはanthraquinone及びdurene結晶中でのドリフト移動度の測定で，前者では移動度の異方性と計算によるバンド巾の異方性とが対応しないという点，又後者では移動度が異常に大きく($20cm^2/v.sec$；200K)，かつその温度伝存性はT^{-n} ($n=2\sim3$)であるが一番値の小さいC軸方向でのnがもっとも大きいという異常性がみられるという点が紹介された。dureneの場合の如き結果はこれまで知られていないが，その原因についてはまだよくわからないということであった。当日もいくつかの議論があったが有力な結論は得られなかった。

(4) コメント：Exciton-Carrier Interaction (小谷正博，学習院大理)

9，10—dichloroanthracene結晶の遅延蛍光及び光伝導スペクトルの磁場依存性を測定した結果について紹介された。この結晶は二つの構造をとるが，その一方(d-form)では分子が二次元的(ac′面)に並んでいると考えられ，そのモデルで磁場レスポンスの角度依存性をうまく説明できる。その結果三重項ー三重項及び三重項ー二重項相互作用定数が求められ，後者の方が大きい事からこの結晶でのphoto-detrappingは三重項励起子とトラップされている正孔との相互作用によるものと結論された。

(5) コメント：Charge-Carrier Mobility in Pyrene-TCNE Complex (貝野洋，札幌医大)

電荷移動錯体での移動度測定例は少ないが，この系ではかなり大きな結晶が得られるので詳しい測定がなされた。光照射される表面層での再結合効果を考慮した結果，ドナーとアクセプターが分子面を向けあって交互に配列した方向(C軸)でもっとも移動度が大きく室温で～$0.33cm^2/v.sec.$と報告された。この方向で何故大きな移動度が得られるかが直感的にわかりにくく，いくつかの議論

がなされた。

(6) コメント：Some Properties of Phthalocyanine Crystals（犬石嘉雄，阪大工）

Phthalocyanine結晶の三重項励起子に関連した物性及び移動度測定結果などが紹介された。

(7) Electronic State of Conducting TCNQ Salts（田仲二朗，名大理）

TTF·TCNQをはじめとする高電導型一次元TCNQ錯体結晶の偏光吸収スペクトルの測定から，その電子配置あるいは電気伝導度をモデル的に説明する試みが紹介された。

(8) Exciton-Phonon Coupling in Molecular Crystals（住　斉，電総研）

Excitonバンドの巾，格子フォノンバンドの巾及びポテンシァルゆらぎの大きさの相互の大小関係によってExcitonスペクトルがどのように変化するかを理論的に示し，又そのモデル(Coherentあるいは Diffusive) の適用のCriterionを与えた。

(9) コメント：Temperature Dependence of Kohn Anomaly（井口磐，早大理工）

TTF·TCNQ結晶で観測されるKohn Anornalyの温度依存性を簡単な第２量子化法及びグリーン関数法で導出できる事を示した。

(10) コメント：Electron Attenuation Length in Molecular Crystals.（日野照純，城西大理）

CuI 薄膜の表面に有機物を蒸着した糸で，CuI から光照射により電子を有機物中に注入しそれが更に真空中に放出される際の光電流を測定する。有機物の膜厚を変化させた時の光電流変化から電子移動距離の平均減衰距離Ｌを求めた。物質によってＬが大きく異なっておりその原因はまだ解釈が与えられていない。

(11) コメント：Photo-Hall Effect.（小林浩一，物性研）

Photo-Hall効果の原理及びイオン結晶での測定例が紹介され，検出限界などが議論され有機結晶への応用が検討された。

(12) コメント：Cyclotron Resonance.（佐野瑞香，電通大）

Burlandによるアントラセンに対する実験を，よりよい条件で追試する事を試みたが信号がどうしても得られなかったと報告された。その原因を両者の条件を比較しつつ検討した。

以上いずれも未解決の問題が提出され明解な解答を得るには到らぬものが多かったが，最近やや低調(内外ともに)と思われるこの方面の研究を発展させる上で有益であったと思われる。更に励起子の運動に関する議論をもう少しやりたかったのであるが時間不足のため実現できなかったのは残念であった。最後に終始有益な議論を展開して下さったSiebrand博士及び研究会の準備進行などに骨折って下さった分子研物性化学部門の皆様に感謝致します。

光合成の初発反応

東大理　森　田　茂　廣

昭和52年２月７日および８日の両日，分子科学研究所において，表記“光合成の初発反応に関する研究会”を開催することができた。

光合成の研究は生物学および生物化学・生物物理学において最も重要な研究の１つであることは言うまでもない。このうち特に初発反応は光合成に特異的なものであり，他の生物現象において類似したものはないと言える。しかもこの方面の研究は近時著しく進歩している。従って光合成の初発反応について研究会を開催できたこときわめて意義がある。更にこれ等の研究は多方面からの研究の結果であり，又更に各方面からの研究を必要としている。そこで各方向からの知見と知識をもちより，討論を重ねることが望ましい。この点からもこの研究会が，相互の理解を高め，光合成の研究にいささかの貢献があったものと考える。

研究会の主題を４方面に大別することができる。即ち，

(1) 地球上での生物による太陽エネルギーの利用および太陽エネルギー利用の一面としての湿式太陽電池。

(2) 生体での光合成の初期光化学反応とその反応の起る生体内の細胞内器官の状態および反応との関連。

(3) 葉緑体からの各種の発光現象，即ち光合成色素の蛍光，遅延発光，熱発光の諸現象の解析による光化学反応の研究。

(4) 色素一般の存在状態と吸収スペクトルの関係，理論的研究，光合成色素の電子論

となる。しかしこれは大別で互に関連している。研究会も知見の交換のみならず，討論にも重点がおかれた。

第１の主題については，柴田和雄により，地球上における光合成の役割について，最近の数値の基礎から，考察された。これにより太陽エネルギーの生物界における重要さとさらに効率よく太陽エネルギーを利用する生物について，利用の面からも紹介された。生物によらない太陽エネルギーの利用，および生物の光化学反応の模型の面も考慮に入れ，湿式の太陽電池について坪村宏より，その最近の成果と問題点の紹介があった。

第２部は生物における光合成の機構の研究であって，西村光雄は葉緑体における光化学反応と，その反応のおこる場との関係について，光エネルギーは化学的エネルギーおよび場の変化特に電気的エネルギーに変換される機構について，紹介した。光合成細菌については，その光化学反応と電

電子伝達系とのかかわりあいについて，特に光合成器官の構築との関係についての機構が，堀尾武一によって紹介された。池上勇は，高等植物の光化学反応中心について，特に系Ⅰの反応中心であるP_{700}に富む，標品の反応，その性質について紹介し，光化学系Ⅰにおける，光化学反応について考察した。

第3部は光合成反応において，単に光の吸収のみでなく，発光を伴う諸現象があり，これ等は光合成の光化学反応の機作の研究に重要な知見を与える。このうち低温で光を照射して暗所で温度を上げると発光が見られる熱ルミネッセンスについて，その葉緑体の活性特にO_2発生能との関係を，井上頼直が報告した。葉緑体に光を照射し，照射を止めても相当の長時間にわたって発光がみられる。この発光スペクトルは蛍光の発光スペクトルと一致する。この現象は遅延蛍光又は遅延発光とよばれている。これは光合成の初期反応の結果の電子伝達が暗所で途中のプールから電子伝達の逆行により励起一重項のクロロフィルが生ずることによって起ると考えられている。いわば光合成の初発反応の逆とも考えられる。この遅延発光と光化学反応との関係について，伊藤繁が紹介した。吉田瑞樹は抽出精製したクロロフィルａの蛍光について報告した。クロロフィルａを各種の凝集体を集らせ，その生成の条件をかえて各種の凝集体を作りその蛍光を測定している。

第4部では光の吸収について，理論的な研究が紹介された。田仲二朗は色素のＪバンドと結晶の構造との関係について，実測された結果の解析を紹介した。右衛門佐重雄は生体内ではクロロフィルはいくつかの型として，存在することを紹介した。又クロロフィル，特にバクテリオクロロフィルの吸収スペクトルについて，電子論的な考察，分子軌道法による計算を紹介した。

終りに森田茂廣は光合成細菌の菌体中でのバクテリオクロロフィルａの存在状態に対する考察を，ショートコメントとしてつけ加えた。

これ等の報告は話題の提供としての意味が強く，これを中心とした討論があった。時間の制限のため，討論は十分であったとはいえないが，ほぼ満足すべきものであったと考える。

主題については，光合成の反応の中でも初発反応に限ってみたが，それでもまだ範囲が広く主題が分散してしまった。今後同様の研究会が開催できるなら，主題をさらにしぼって，報告者の数をへらして，参加者の多くは討論に加わってもらうことにする。又はこの研究会のような机の配置(講演会風）でなく，円卓にすることなどもさらに効果をあげる一法であると考えた。

いずれにしてもこの研究会が開催でき，各方面の方々と知見の交換，討論ができ，それぞれの問題点，目的を理解できたことは意義があったと考える。

励起電子状態の動的過程

分子研　吉　原　經太郎

分子科学の電子励起状態の研究における最近10数年間における最も大きな進歩の一つは無輻射過程——つまり光のあたらない部分の解明であろう。無輻射過程の直接的な測定は困難であるため，常に発光過程にある種の影響を与える過程としかとらえられず実験的に詳細な研究が行いにくかった。いくつかの光学的方法と相補的な手段が開発されたとは云っても，その事情は今でも余り変らない。そこでこの分野の発展にはじめて大きく寄与したのは理論的考察である。幸いこの分野のリーダーの一人であるカナダ国立研究所のW．Siebrand博士が分子研に外国人招へい研究者として滞在されることになったので，これを機会にSiebrand博士の話をじっくりと聞き，又討論を行う会を行うことができた。以下に見るように無輻射遷移の関与する他の問題もとり扱われた。この分野には国内でも極めて活発な研究が行われており，この会合でも，しぼられた課題に対し，専門家同志の熱心な討論が行われ，実り多い会合となった。

以下プログラムに従って討論の主な内容を記すことにする。Siebrand博士にはディスカッションを含めて1.5時間の話を２回に亘って行って頂いた。他の話題提供者も1.5時間の時間をとったので通常の学会等に比べて，ゆっくりと演者の話を聞くことができた。

第１日（２月21日）

Mechanism of Intersystem Crossing　カナダ国立研，分子研　W．Siebrand

分子，電磁場およびその相互作用の一般論から系間交差の理論がいかに組み立てられるかを詳しく述べた。近似の程度，相互作用をとり入れる範囲，これによって得られる理論の表現形式，注意すべき点などが詳しく比較検討された。多環芳香族，複素環化合物の無輻遷移の実験結果と理論の対比も行われた。

Radiative Decay，Vibronic Coupling，and Heavy-Atom Effect in the Triplet States of Azanaphthaleves.　　東北大・理　山内清吾・安積　徹

アザナフタリン類における三つに分けた三重項状態のスピン副準位の緩和，振動状態と電子状態の間の相互作用等が，最近得られた時間分解スペクトル，マイクロ波二重共鳴の実験結果と合せて論じられた。

Some Experimental Aspects of Energy Transfer and Related Phenomena in Molecular Systems.　　九大・理　権藤恭彦

分子間，分子性結晶間のエネルギー移動の機構について，理論的および実験的な問題点が示された。ついで最近行われた偏光実験によるエネルギー移動の結果とその解釈が示された。

第２日（２月23日）

Decay of Closely Coupled Electronic States.　　カナダ国立研，分子研　W. Siebrand

複雑な有機化合物ではエネルギー準位の密度が高く，緩和過程は近くに存在する準位の相互作用によって大きく性格づけられる。相互作用の違いによる緩和速度，強光強度への影響等が論ぜられた。

Decay Properties of Aromatic Molecules Containing Carbonyl Groups and Heavy Atom.

京大・理　広田　襄

光学検出による磁気共鳴の方法でカルボニル基と重原子をもつ化合物の輻射遷移，無輻射遷移の機構，分子構造の推定がいかに可能であるかが詳しく述べられた。

Vibronic Interaction in the Triplet States of Pyrazine and Triphenylene

東大・物性研　木下　　実

マイクロ波に誘起された遅延りん光を測定することによってピラジンおよびトリフエニレンの３つのスピン副準位のスペクトルを詳しく測定し，振電相互作用について考察した。

Slow Interconversion between Excited States.　　理研　金丸信明

無輻射遷移に関与する励起状態間の相互作用について理論的な見地から詳しく述べられた。

なおこの研究会はSiebrand博士の国内でのホストをされた分子研・広田栄治教授が企画され，研究会をお世話されたものであることを付記して感謝したい。

極端紫外連続光源

分子研　井　口　洋　夫

昭和51年度もそろそろ終りに近い３月10日と11日の２日間，分子科学研究所(岡崎市明大寺町)に於て，約30名の研究者の参加を得て，「極端紫外連続光源」の研究会を開催した。

「極端紫外連続光源」の発生方法としてSOR (Synchrotron orbital radiation) を利用することは，その強度，連続性，清浄度等から，きわめて有力な手法である。この問題をhardとsoftの両面から

取組み，特にsoftの分野では，化学分野に於けるこれからの発展に焦点を合せることに話題の中心を置くこととした。

一方昭和52年度の岡崎コンフェレンス(第５回)として

“Higher Excited States of Molecules and Molecular Crystals”

の内容をどの方向に持込んだらよいかと云う問題への示唆を得ると云う役割をも含めて開催したものである。

具体的内容を，そのプログラムに沿って述べて行くこととする。

第一日目（３月10日）

総論——SOR光の特徴とSOR装置について　　(東大物性研究所)　菅　滋正

SOR光の持つ諸特性とそれが基づいている原理が詳しく述べられ，つづいてSOR用分光器の設計，操作を中心に実際的問題が論じられた。

物性研SOR施設の現状と将来計画　　(東大物性研究所)　神前　熙

SOR装置に関する新しい技術と世界の動向が紹介され，ついで物性研SOR施設の拡充計画が，helical wiggler，free electron laser を中心に述べられた。

SORを用いた分子分光学——核研における実験　　(東京教育大理)　中村　正年

演者らが核研のSOR装置を用いて実際に測定した，N_2，CO_2，NO_2などの分子の極端紫外吸収スペクトルについて報告がなされた。新しいRydberg seriesの発見等が報じられた。

SORを用いた分子分光学——現状と展望　　(理研)　岩田末広

主として理論的立場から原子，分子の高励起状態に関する諸問題が論じられ，N_2の高励起状態について演者ら自身の計算結果とSORによる吸収スペクトルの測定結果との比較検討がなされた。

第２日目（３月11日）

SORを用いた光電子分光　——気体——　　(理研)　小林　常利

真空紫外領域を主体とした気相の分子の光電子分光について，その定量的な発展，並びに演者らが行った結果について述べ，SORの導入が及ぼすこの分野の進歩に言及した。

SORを用いた光電子分光　——固体——　　(分子研)　関　一彦

固体の光電子放出の気体との相違について論じ，SORの特性を活かした新しい研究の可能性として空状態の構造の観測，偏光を用いた角度分布の測定による分子の吸着姿勢の決定，時間分解スペクトル等について述べられた。

SORを用いた光化学　　(東工大・理)　小尾　欣一

簡単な分子の光化学初期過程，とくに励起フラグメントからの発光の波長依存性など，ＳＯＲを用いてはじめて可能になった光化学の研究例が紹介され，今後の問題としてＳＯＲの偏光を利用した光解離フラグメントの角度分布測定の重要性などが強調された。

ＳＯＲと原子分子諸過程　　(阪大・理)　桑田敬治

分子を低速電子線で励起，解離，解離励起した場合と，同じことをＳＯＲを用いて行なった場合の諸問題がデータに基づいて比較検討された。

ヨーロッパのＳＯＲ装置見聞記　　(電綜研)　前田浩五郎

Orsay (仏)のACO，DCI，Humburg (独)のDORIS，DESY，Daresbury (英)のNINA，Frascati (伊)のADONE等のストーレッジリング，シンクロトロン両SOR施設がそこで行なわれている研究と共に詳しく紹介された。

内外の最近の動き　　(東大・理)　黒田晴雄

日本のフォトンファクトリー計画を中心に世界のＳＯＲ施設建設，拡充の動向が紹介された。

高励起原子分子の生成と反応

東大理・分子研　朽津耕三

“共同研究”による研究会の一つとして，上記が1977年３月25日，26日に行なわれ，約50名が参加した。

最近レーザー光照射や電子衝撃により生成する主量子数の高いRydberg状態にある原子（またはイオン）の性質と反応が注目されている。[1,2] これらの原子はイオン化すれすれの極めて高い電子エネルギーを持ちながら，しかも自然放射寿命が著しく長い。“切れそうで切れない”Rydberg電子と核との平均距離は，例えば主量子数が30のものでは約500Åにも及ぶ。最近では，簡単な分子の高い励起状態についても詳細な研究が行なわれるようになった。このような高い励起状態の持つ特徴的な性質を知り，それらと分子との相互作用にもとづくエネルギー移動あるいは電荷移動過程を調べることは，まさにこの研究所の当面の研究題目に沿ったものといえよう。

高励起状態が関与する現象には，中性または荷電粒子の衝突に関する実験と理論，分子分光学，放射線，プラズマ，放電，天文学，化学反応などの立場から多くの研究者が強い関心を持っている。とくに，特定の量子状態の選択的生成法と検出法，静電場または他粒子との衝突によるイオン化の断面積や放射遷移確率などに関する詳細な知識が要求されている。この研究会では，上記の各分野の研究者が一堂に会して，現状の概観と将来の展望，応用の見通しと問題点などにつき，それぞれの立場からの発表と意見交換が活発に行なわれた。時期が３月末の学会直前であったにも拘らず，通知を差上げた人々の大多数が参加して下さったのは嬉しいことであった。講演とそれに続くコメントの要旨を以下に記す。

３月25日(金)　午后

松沢通生(電通大)　　高励起原子の生成と動的挙動

全体のintroductionとして，高励起原子の基本的性質(とくにエネルギーと自然放射寿命)，生成法(電子励起，光励起，電荷移動およびそれらの組合わせ)と検出法（とくに静電場，電磁波または他粒子との衝突によるイオン化)，荷電粒子または中性粒子との衝突に関する断面積について，理論的あるいは実験的立場からの説明がなされた。とくに，水素以外の原子の高励起状態を記述するのに有効な量子欠損理論,[3] レーザー光による選択的励起の実験の現状，Rydberg電子を自由電子とみなして分子の回転脱励起を計算する松沢氏らの理論，Fermi (1934)以来の問題である希ガス中でのアルカリ原子のスペクトルにみられる圧力シフトの解釈，高励起原子を低速電子のモノクロメーターとして利用し分子との衝突における共鳴現象を調べようとする試みなど，興味深い話題が詳しく紹介された。

箕野嘉彦（東工大・理）　コメント

H_2，D_2の電子衝撃によるバルマーα線の形を解析すると，電子エネルギー40～50eV以上では大小二つの並進運動エネルギー分布の重ねあわせとなり，それから解離状態についての情報が得られた。数種の炭化水素や水を用いて同様な研究が行なわれた。

戸嶋信幸（東大・宇航研）　コメント

電子衝撃による高励起水素原子の遷移断面積をimpact parameter法およびGlauber近似を用いて計算した。主量子数nが変化する場合と変化しない場合とで，異なる取扱いを必要とする。

高柳和夫（東大・宇航研）　　星間空間における高励起原子

電波分光によりnの極めて高い水素原子からの発光(n＝258→257，325→323など)が観測され，電子温度や密度を知る手がかりとなっている。HeやC原子の高励起状態(n＝109→108)も観測されている。このような状態はおもに原子イオンと電子との再結合で作られる。発光あるいは衝突による脱励起の遷移確率はnに依存する。これらの過程に関する定量的な知識を蓄積することが大切である。

近藤　保（東大・理）　　高励起原子に関連する実験技術

種々の生成法と検出法について，技術的な側面からの特徴と問題点が説明された。とくにイオン化を起こすための静電場の電極の作り方，電場と飛行時間法を併用して主量子数分布と運動エネルギー分布を同時に求める方法，高励起原子を赤外あるいはさらに長波長領域での電磁波の検出器と

して用いる方法の可能性などが議論された。

窪田信三（立大・理）　　コメント

放射線による希ガスのイオン化と発光の過程で，別の気体を混ぜるとイオン電流または発光に特徴的な変化が現われる。この過程における励起原子の役割について説明された。さらにDESY-SOR を用いて行なわれた希ガスの凝縮相での光イオン化の実験における同様の効果につき紹介された。

3月26日(土)　午前

奥野和彦（都立大・理）　　コメント

アルゴン原子の電子衝撃によりAr$^+$イオンの高励起状態が生成し，それが他の気体分子または金属表面との衝突によりAr^{2+}となることを，励起関数や飛行時間の測定により確かめた。電離の断面積は運動エネルギーとともに大きくなるが，200 Å^2 程度と推定される。その機構も運動エネルギーにより変わるかもしれない。

加藤義章（阪大工）　　高励起原子の分光学

Toronto大学でStoicheff教授のもとで行なわれた研究が紹介された。CW色素レーザーの二光子吸収によるRb原子の$nd \leftarrow 5s$遷移を蛍光により観測した。この方法で^{85}Rbと^{87}Rb原子のエネルギー準位につき詳細な知見が得られた。またKrFなど希ガスーハロゲンのエキサイマーレーザーについての説明があった。これらは短波長領域のレーザーとしてきわめて有望である。その発振機構には高励起状態が関与していると思われ，また高励起状態を作るための光源としてこれらのレーザーが使えるであろう。

田中武彦（九大・理）　　コメント

高励起原子についてDoppler幅より高分解能での分光学的な研究についての概観が述べられた。二光子吸収，量子ビート，準位交差，マイクロ波分光などを用いて，高励起原子の種々の微細なエネルギー差が正確に測られている。このようにして原子の分光学はしだいにnの高い状態へと発展している。

広岡知彦（東大・理）　　分子の高励起状態

分子の高いRydberg状態には自動イオン化のほかに解離や前期解離の可能性もあり，内部自由度もあるので，原子の場合に比べて動的過程は複雑になり，自然寿命もあまり長くはなりえない。しかし光や電子で分子の高励起状態を作り，その挙動を調べる研究が種々の側面から進められている。そのひとつは，マススペクトルや光電流を用いて励起関数などを求める試みである。またその分子自身あるいは混ぜた標的分子(SF_6など)のイオン強度の圧力変化を解析して，光または電子衝撃によって生成した高励起分子と標的分子との衝突によるイオン化の断面積を調べる研究もある。さらに，高励起分子の解離によって生成する高励起原子およびイオンの運動エネルギーを飛行時間法で

測定して比較し，解離機構を調べる研究もなされている。大部分の例では，解離の起こり方がコアイオン(その分子からRydberg電子を除いたもの)だけで決まるとするモデルに合うが，H_2，N_2 などそのモデルでは説明できない場合も知られている。

3月26日(土)　午后

小谷野猪之助（分子研）　　コメント

N_2分子の高励起状態がマイクロ波放電の下流で生成していることを，4種の波長(121.6，184.9，253.7，632.8nm)の光による光イオン化質量スペクトルの測定により明らかにした（東工大田中研究室での実験)。

岩田末広（理研）　　コメント

N_2分子の二電子励起，内殻励起状態を理論的に計算し，He-Ⅱ光電子スペクトルにみられるshake-up satellite peaksと電子衝撃によるエネルギー損失スペクトルのloss peaksを解釈できた。

望月孝晏（阪大工）　　レーザー同位体分離との関連

同位体種(原子または分子)の選択的励起法と選別法に関する現状が概説された。とくにウラン原子のO_2分子による化学イオン化，多段階または多光子励起，励起されたUF_6とHCℓとの化学反応による選別などの例とそれらの得失が比較され，今後の技術的発展における高励起状態の重要性が指摘された。

藤田順治（名大プラズマ研）　　核融合との関連

核融合に関する技術の現状と問題点が素人むきに解説された。その目標にそって，たとえば高速中性ビームのプラズマへの打ちこみ，プラズマの診断，プラズマ中の微量不純物のおよぼす影響などに関連する種々の衝突過程の断面積に関する正確な知識が要望された。

佐藤国憲（名大プラズマ研）　　コメント

ヘリウムのプラズマ中で再結合によって生成するHe^+の励起状態の分布密度を測定すると，高い励起状態でn分布に反転がみられる。これはHe^{2+}と電子の再結合，He^+と電子の超弾性衝突，He^+の放射失活の複合機構で起こりうる。

おわりに，この研究会を終始お世話して下さった広田栄治教授に感謝する。

1）松沢通生，日本物理学会誌32，335(1977)。
2）広岡知彦，近藤　保，朽津耕三，分子科学サーキュラー17，19(1976)。
3）井口道生，日本物理学会誌32，273(1977)。

*筆者のメモにもとづくものなので，誤や著しく偏った要約を含んでいるかもしれないことをお許し頂きたい。

外国人研究員紹介

C. H. Wang 教 授

大阪大学理学部　千 原 秀 昭

結晶や液体における分子運動や相転移を光散乱の方法で精力的に研究し，国際的に知られた科学者。1976年12月から1977年３月まで約３ヶ月間分子科学研究所からの招きで来日し，岡崎コンフェレンスに出席したり，各地の分子科学研究者との交流を深め，その間大阪大学では２つの試料について実験もするという，非常に密なスケジュールをこなした。Wang教授は1939年台湾に生まれ，国立台湾大学で工業化学を専攻し，ユタ州立大学では熱力学で修士号をとり，マサチュセッツ工大のWaugh教授のもとで固体の多量パルス法（双極子相互作用の効果を消去する）NMRでPhDを得た。Bell Telephoneに２年ほど勤めた後ユタ大学に移り，助教授，準教授を経て正教授となった。その学問分野の経歴は多彩であって，いまはラマン散乱をやっているが，またＮＭＲにもどる意欲も持っている。対象物質はイオン結晶，金属，分子性結晶，強誘電体，高分子，液晶とこれも非常に間々が広く，NaCNの相転移の研究に見られるように，そのアプローチの仕方は非常にユニークである。

大の新日家で，日本へ来られるチャンスは絶対に逃さない由。今回の来日のときもＵＣＬＡやフンボルトの契約を犠牲にして分子研の招きに応じた。最近米国で流行していることだが，早朝に起きてマラソンを楽しみ，阪大のキャンパスを一巡するのを日課としていた。気さくな性格で，研究室の若い人達とよく話し，のみ屋で一緒に日本酒を楽しみ夜おそくまで騒いでいた。仙台では伊藤教授と岩風呂にはいり，度が過ぎてのぼせてしまったとか。ソルトレイク市の丘の上の見晴しのよい自宅で，ご両親と奥さん，４人の活発なお子さんに囲まれて暮し，マイクロバスを運転して冬はみんなでスキーに行くという。今後の活躍が一層期待される俊秀である。

J. M. Morris 博 士

分子研　吉 原 經太郎

メルボルン大学のMorris博士を迎えることとなった。博士は1946年生れであるから未だ若さにあふれた学者であるが，すでに多彩な経歴をもっている。1967年シドニー大学を卒業し，1972年に，

Ph. DをJ. Ferguson教授(オーストリア国立大)の下で得た。その後マッカリー大学助手を経て，カナダ国立研(オタワ)でD. F. Williams博士の下で1.5年，東大物性研で長倉教授の下で１年間の博士研究員を終えて，1975年から現職メルボルン大学講師となっている。

初期の仕事は多環有機化合物の二量体の理論的および実験的な研究，二量体の分子間力の計算などである。その後ケトンのけい光スペクトル，色素とDNAの相互作用の分光学的研究，site-selection spectroscopy等の研究を経てピコ秒分光学の研究を多数発表している。まずガラスレーザー，ストリークカメラ，オプチカルマルチチャンネルアナライザー，ミニコンピューターのシステムを完成し，さらにピコ秒領域の高精度のけい光偏光解消測定装置を開発した。これを用いて，色素分子の励起状態での回転緩和，溶媒との相互作用に関して先駆的な研究を行っている。また分子性結晶の励起子の融合，解離のダイナミックス等も主な業績の一つである。

実際今回接して感じたことは専門分野に関してよいアイディアに富んでいることと同時に実験技術ー特にレーザーおよびデータ処理に関する造詣が極めて深いことである。分子研滞在中にも，ピコ秒レーザーのデータ処理に関して，仕事をしていたがいているが，名古屋まで一人で行ってＩＣを買い，ＡＤコンバーターを作りさらにコンピューターインターフェース，これに関するアッセングラープログラム，フォートランプログラムまで，全部一人で完成してしまう力量には驚かされた。

英国流の教育を受けた為か，建設的であると同時に批判精神にも富んでおり，また発想が自由自在である。この点個人的に交際していて大へんに参考になることが多かった。夫人は日本人で，趣味はセーリングである。メルボルンには４人乗りのヨットがあり毎週乗るのが楽しみとのことである。ヨットはKAMOME号というが，在日中に書家に鷗という字を書いてもらって，船に飾りつけたいそうである。

R. F. Curl教 授

分子研　広 田 栄 治

去る５月２日，テキサス州Rice大学のR. F. Curl教授が，昭和52年度分子研外国人研究員として来所された。８月20日まで滞在の予定である。

Curl教授は1933年８月テキサス州の生れで，Rice大学でB. A. 取得の後，Berkeleyのカリホルニア大学Pitzer教授の指導の下に，熱力学的研究によりPh. D. を授与されている(1957年)。その後，Harvard大学リサーチフェローを経て，1958年母校Rice大学に戻り，1967年正教授に任ぜられて現

在に至っている。

Curl教授の業績は，マイクロ波分光，レーザー分光に関するものが大部分を占めている。マイクロ波分光による研究では，先ず，ClO_2，NO_2などの常磁性分子のスペクトル解析があげられる。微細構造，超微細構造を伴うこれら複雑なスペクトルは以前にも観測，測定されていたが，Curl教授によって始めて完全に解析された。さらにSiF_2，GeF_2，BF_2OH，SCSeなど特異な無機化合物の構造解析や分子内運動についても多くの興味ある結果をえている。最近では，マイクロ波分光による研究を続けるとともに，レーザー分光，とくにマイクロ波・光二重共鳴分光をとり入れ，新しい研究面を開拓した。主な結果は，CH_4の遠心力誘起双極子遷移の観測，NO_2電子遷移の超高分解能分光，さらにNH_2，BO_2，HCO等の不安定分子の検出等である。とくにNH_2に関する業績は，この分野における最近のヒットの一つである。分子研では，ひきつづきPH_2，BS，HNOなどに関する研究を行っている。

これらの業績のうちの主要なものが日本人研究者の協力によってあげられたことを指摘しておきたい。すなわちCH_4に関する仕事はCurl教授がカナダNRCの岡武史博士の研究室に滞在中行われたものである。さらに高木光司郎(富山大，新しい変調分光法の開発)，広瀬千秋(東工大，SCSe，ジビニルエーテルのマイクロ波分光)，田中武彦(九大，NO_2の二重共鳴分光)，竹尾陽敏（東工試，GeF_2，BF_2OHのマイクロ波分光）の諸氏もそれぞれ秀れた業績をあげられた。これらの方々によれば，Curl教授は非常に着想がよいとのことで，分子研でも顕著な結果がえられることを期待している。

機器センターについて

分子研　吉　原　經太郎

近年研究用機器の発展は実に目ざましいものがある。測定精度が向上し，使い易くなったゝめに，研究対象が極めて広くなりかつ研究上の情報が多くなることはしばしば見られる。核磁気共鳴装置の発展はその最もよい例の一つであろう。現在の有機化学の進歩は高精度の核磁気共鳴装置駆使することなしには考えられないほどである。また科学者は一つの装置からできるだけ多くの情報を導き出そうとするので，一つの機種に多数の機能が付与されることとなる。再び核磁気共鳴装置の例を挙げると最近では^{13}C，^{31}P，^{15}N，^{19}F等が測定できるし，パルス励起が可能で分子の動的な測定(スピン一格子緩和時間やスピンースピン緩和時間)，核オーバーハウザー効果の測定等のデカップリング法の応用等多岐に亙る測定が可能となっている。

測定精度の向上によって一つの新しい研究分野が開けた例としては光電子分光装置がある。光電子のエネルギー測定を精密な半球型電子分光器を用いて行うことによって，精度が飛躍的に向上した。これによって分子の内部状態についての新しい情報を提供するものとして，近年大きな分野として発展した。

機器センターでは，以上のような現状を考慮し，研究用機器のうち研究者の間で共通性がありかつ最高級のものを購入しこれを集中管理することとしている。機器の二重投資を防止すると共にこれら最高級の機種を所内外の研究者の利用に供することとしている。さらに小型あるいは中型の測定装置についても上と同様の目的により共通性の高いものを常置し，研究者に一定期間貸与することとしている。

また現在は装置開発室と共に電気部品(回路部品，半導体，配線材料)，機械工具等のストックルームの役割を行っている。これらの所属，管理等については今後装置開発室と検討することとなっている。さらに独自の立場から，分子科学研究に必要となる機器に関する情報を収集し，装置開発室と共に機器の開発，精度の向上を計る。

現在は下記のような各種の装置をもっているが，手不足(助手１名)であるので，実際の装置の運転，管理は各研究系，附属研究施設の教官，技官と協力して行っている。“協力”とは云っても，これら装置の世話を行っている研究者の負担は極めて大きいので，将来は機器センターでできる限りオペレーションまで含めた運営ができることを希望している。

機器センター棟(~1,000㎡)の建設が本年度予定されているので，現在木材啓作助手とその実施設計等を行っている。来年３月には建物が完成し，現在各研究系であづかってもらっている装置も

改めてその所を得るようになることを期待している。

分子研では昭和51年度より大型研究設備による研究計画をはじめている（分子研レターズ，No.2参照)。これらの大型研究設備による研究は開発的要素が大きく実際上はいくつかの研究部門が主体となって行っている。一方これら設備の分子科学研究における共通性，共用性を考慮して，設備・装置は機器センターに所属することとなっている。したがって収容可能な一部の機器は機器センター内に設置することとしている。

機器センターとして設置した主な機器を下に示す。

高分解能核磁気共鳴装置（日本電子JNM-FX100)

フーリエ変換赤外分光光度計（日本電子JIR-10)

粉末X線回析装置（理学電機Geiger Flex2027)

けい・りん光計（島津RF-502)

走査型熱解析計（DuPont990)

可視紫外分光光度計（Cary17)

二波長分光光度計（日立556)

光電子分析装置（Perkin Elmer PS-18)

真空紫外分光器（GCA McPherson 225)

分光器（シングル）（Spex 1704)

分光器（ダブル）（Spex 14018)

分子研コロキウム

所内コロキウム，第8回以降の題目，演者は次の通りです。

第8回　10月13日(1976年)　光化学電池（坂田忠良)

第9回　10月27日　マイクロ波分光による最近の研究から（広田栄治)

第10回　11月10日　固体分子錯体の電気物性——芳香族電荷移動錯体を中心として——（石井菊次郎)

第11回　11月17日　低温固相での捕捉電子とハロゲン化ベンゼンの反応（並木章)

第12回　12月1日　Loboratory Automationと光子統計（遠藤泰樹)

第13回　12月23日　分子科学はエネルギー問題の解決にどうして寄与することができるか？（井口道生，Argonne National Laboratory)

第14回　2月9日　Raman Scattering Studies of Dynamic Processes in Solids.（C. H. Wang)

第15回　2月16日　F. T. ESRにおける光学的方法（高木芳弘)

第16回　2月23日　Inelastic Light Scattering Studies of Molecular Liquids and Polymer Solutions（C. H. Wang)

第17回　3月2日　Electron Spectroscopyによる，固体表面反応の研究（川合知二)

第18回　3月9日　中国訪問記（井口洋夫)

第19回　3月16日　遷移金属錯体を用いる炭素ー炭素σ結合の活性化とその反応に関する研究（高谷秀正)

第20回　3月23日　液相分子間相互作用および分子運動（柿本政雄)

第21回　4月13日　固体表面における吸着及び触媒活性の理論（塚田捷)

第22回　4月20日　Streak Cameraによるピコ秒分光学（J. M. Morris)

第23回　5月11日　Flowing Afterglow装置によるイオンー分子反応の研究（田中健一郎)

第24回　5月18日　ナノ秒～ピコ秒レーザーフォトリシス（中島信昭)

第25回　6月1日　高エネルギースペクトルと内殻空孔による終状態相互作用——アルカリハライドと遷移金属化合物への応用（里子允敏)

第26回　6月8日　酵素ヒドロゲナーゼの触媒する反応と生体内電子伝達系（木村啓作)

第27回　6月22日　私の炭素観——形成と発展——（赤松秀雄)

第28回　6月29日　有機固体の真空紫外領域における光電物性——光電子放出を中心として——

(佐藤直樹)

第29回　7月6日　The Study of Reactive Species in Gas Phase by Laser Spectroscopy

(R. F. Curl)

編　集　後　記

分子研レターズ第3号をおとどけする。主として編集者の怠慢から発行が大幅に遅れてしまったことを先ずお詫びしたい。

第2号が発行された時点から一番大きく変化したことは何といっても実験棟の第一期計画としての6割完成と引越しであった。旧愛知教育大学の図書館を用いた臨時庁舎においてまがりなりにも整備した実験装置等を解体，梱包して新実験棟へ移ったのが1月末であった。以後数ヶ月を経て少しづつ研究が行えるようになって来ている。

共同利用機関としての研究所の活動については井口教授の記事に大略が記されている。岡崎コンフェレンスや各種研究会，共同研究，協力研究等を通じて精一杯御利用願えたと考えている。しかしながら研究所の人員も少なく，施設も未だ充分に備っていない状況で充分なお世話ができなかったことを憂えている。今後はさらに実質的な共同研究の道が模索されるであろう。

本年度は研究棟，機器センター棟，化学試料室棟，装置開発室棟の建設が予定されており，年度末には将来の分子研の姿により近くなるであろう。来年度はさらに建設が進み，また人的な意味での充実も充分行われるよう研究所，管理局，研究者一体となって努力している。多くの方々の一層の御協力をお願いしたい。

分子研レターズは広く分子科学者および周辺領域の科学者の意見や情報交換の場である。原稿の寄稿を期待している。投稿は研究所の吉原または斎藤宛にお送り頂ければ幸いである。

1977年8月

(吉原・斎藤記)

◎交　通　機　関

東京方面より

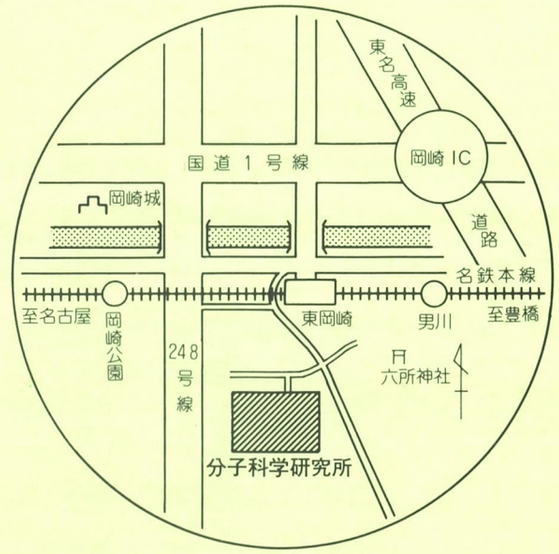
新 幹 線　豊橋駅下車

名鉄本線　豊橋－東岡崎(所要時間25分)

大阪方面より

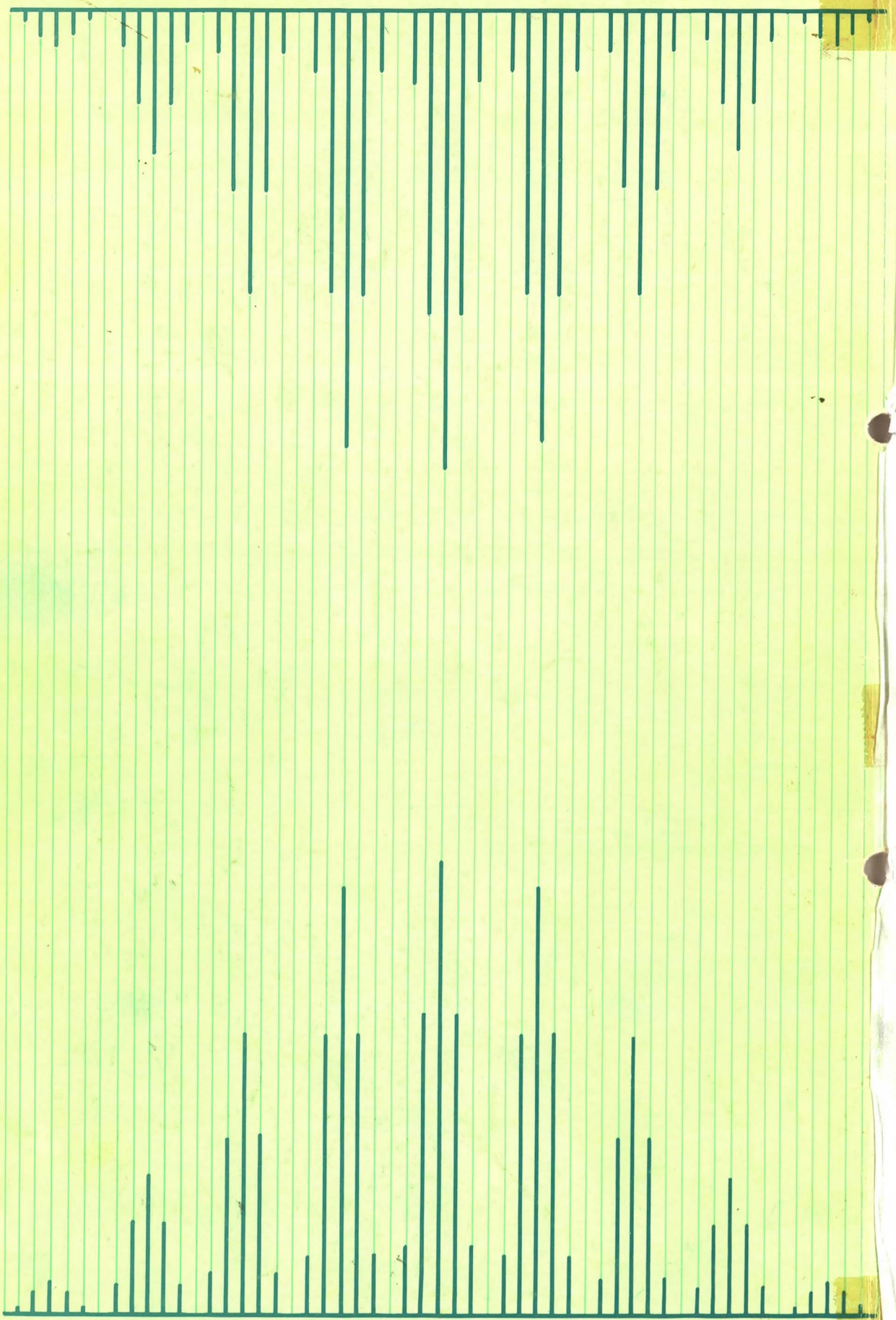
新 幹 線　名古屋駅下車

名鉄本線　名古屋－東岡崎(所要時間35分)



分子科学研究所

〒444 岡崎市明大寺町西郷中38
代表電話番号〈0564〉52－9770

《時間外電話番号》

電子構造研究系，化学試料室　52－9720
分子集団研究系，機器センター，装置開発室
52－9721
理論研究系，分子構造研究系，相関領域研究系
52－9722
管理局　庶務課，人事課　52－9770
主計課，経理課　52－9771
建築課，設備課　52－9773
技術課　52－9774