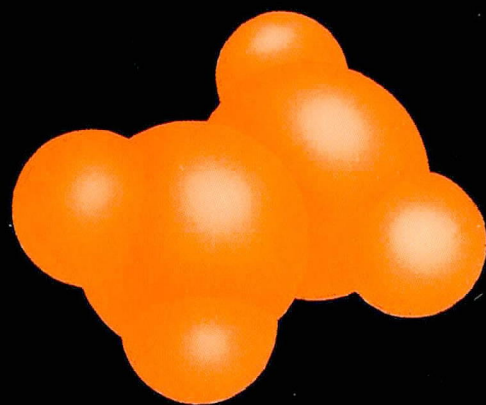




分子研レターズ

1995・3 No.32



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

目 次

巻頭言	丸山有成	1
-----	------	---

研究紹介

遷移金属錯体に機能を求めて	中村 晃	3
錯体クラスター化合物の合成	磯辺 清	6

研究室紹介

分子基礎理論第一研究部門（岩田グループ）	岩田末廣	8
分子基礎理論第二研究部門（谷村グループ）	谷村吉隆	10
電子計算機センター（青柳グループ）	青柳 睦	12

ニュース

受賞者紹介：井口洋夫／文化功労者	薬師久彌	14
アジア学術セミナー	伊藤光男	15
スーパーコンピュータと汎用高速計算機システム	青柳 睦	17
高校生インターナショナル・サイエンス・スクール	国際研究協力課	19
一般公開	庶務課	21

レターズ

分子科学若手の会の近況報告	小橋和久	24
---------------	------	----

分子研を去るにあたり

往者不可及	磯辺 清	26
大きな桜の木の下で	田所 誠	27

新任者紹介		29
-------	--	----

岡崎コンファレンス報告

第50回「電子欠損型遷移金属錯体の機能」	高橋 保	31
第51回「表面における光誘起過程のダイナミックス」	松本吉泰	42

総合研究大学院大学

修了者紹介：学生氏名及び論文名	48
10月入学者紹介	48
外国人若手研究者研究体験フェローシップ	48

研究会報告

高圧科学による分子物性の創成	50
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	52
有限多電子系の運動様式の統一的理解	54
直線偏光・円偏光放射光を用いた分子科学研究とその周辺	56
酸素結合蛋白質の精密構造機能研究の新展開をめざして	57
化学物理の諸問題とその発展	60

国際研究協力事業報告

日・英研究協力	中村宏樹	64
日本インド研究協力	北川禎三	64

分子研コロキウム（第620回～）	66
共同研究採択一覧（平成7年度前期採択）	67
施設利用（平成6年度前期報告）	72

国際交流

次年度予定の海外からの招へい者、訪問者	76
海外渡航	79
人事異動	83
編集後記	84

分子科学の新しい展開

丸 山 有 成

分子研が創設されてから約20年が経過し、この間に分子科学に関する研究が様々な角度から行われてきた。特に分子科学に関する理論的研究に関しても著しい発展があった。しかし、分子科学の理論的研究と一口にいてもその内容は多岐にわたっており、真に分子科学プロパーの理論とは何であるかは自明ではないと思われる。それはさておき、最近分子研の理論研究に新しい展開がもたらされる可能性がでてきた。それは理論第四部門の新設が、平成7年度に認められたことである。これは、分子研リポート'93に報告されているように、平成5年度の分子集団研究系についての点検評価の作業の過程で、国内外の評価委員から分子集団研究系をサポートあるいはそれと共同研究できる理論グループの必要性が強く指摘されたことに端を発する。この必要性については、我々も以前から強く感じていたところであったので、平成7年度の概算要求として分子性凝縮体の理論的研究を行う理論第四部門の新設を、理論研究系が主力となって要求した。所長、理論研究系主幹及び管理局関連部局の方々の御努力の結果、この要求は文部省、及び大蔵省に認められ、教授と助教授の二つの新しいポストが新設されることとなった。

さて、分子性凝縮体の理論の現状はどうであろうか。新物質としていくつかの有機導電体や超伝導体が発見され、それらについての理論的説明はなされてきた。しかし、それらはほとんどの場合従来の理論(金属や絶縁体)の借りものであって、近似的にしか(しかもしばしば悪い近似で)これらの分子性凝縮体には適用し得ないものであった。 C_{60} に代表される炭素原子クラスター固体の場合もそうである。これらの物質系は金属と絶縁体の正に境界領域にあり、両サイドからの漸近的なアプローチでは解決できない問題を含んでいるのである。極論すれば、分子性凝縮体の理論を専門としてそれに真正面から取り組んでいる研究者は国内のみならず世界的にみてもこれまで存在しなかったといえよう。しかし、これからはこの問題を真正面から見すえて理論的研究を進めることが、分子科学の新しい展開として是非とも必要と考えられる。そういうことのできる場として、国内では分子研は最適な環境を有していると考えられる。分子に関する十分な知識と研究及び伝統ある有機物固体物性の実験的研究グループがこの場をつくっている。

実際にこの2つのポストがどのように運用されるかは私の関知するところではないが、私の希望としては、このポストに若干異なった角度から、しかし真正面から分子性凝縮体の理論にアプローチする2人の研究者が必要と思っている。例えば、金属理論サイドと絶縁体理論サイドの人、あるいは純物性理論とバンド計算的なアプローチの人などが考えられよう。いずれにしても、新

任者にとっては分子研という環境の中でたった1人だけではなかなか成果は上がらないおそれもあるし、来る人にとってもたった1人で分子研に乗り込んでくるのは実際問題としてなかなか決心にくい点であろう。基本的には独立であっても、2人でよいチーム作って研究を進めることが望ましい姿であると考え。この理論グループををサポートしたり、あるいはそれにサポートされたりする実験系グループの責任も大変重いものである。

いずれにしても、分子研を核としてこれまで存在していなかったオリジナルな理論が生まれ育ち発振していけば、これは正に分子科学の重要な新しい展開といえよう。

研究紹介

遷移金属錯体に機能を求めて

分子研 中 村 晃

私が行ってきたこれまでの研究では遷移金属錯体の機能のうちとくに触媒作用の研究が中心になっている。錯体触媒は均一系触媒のなかでも最も重要であり、この20年世界中で活発に研究されてきた分野である。錯体には数多くの種類があるが、金属-炭素結合を持つ有機金属錯体を用いる場合が特に工業的にも重要であり、また基礎研究も行われてきた。有機金属化学の研究は、私の場合永年に亘って続けてきたが、最近これまで研究が進んでいなかった5族のNb, Ta錯体での基礎研究を行い、新しい触媒作用を見出すためいろいろな新化合物を合成した。¹特に最近では、モノシクロペンタジエニル錯体を中心に研究をおこなってきた。図1にその主な化合物を示した。これらの合成では1978年に安田 源氏（現在広島大教授）と発見した新しいジエン錯体の合成法が基礎になっている。

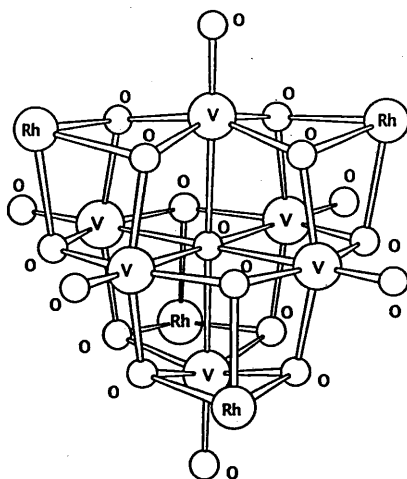
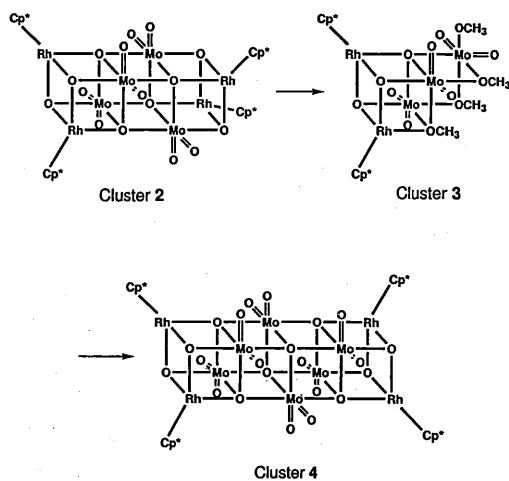
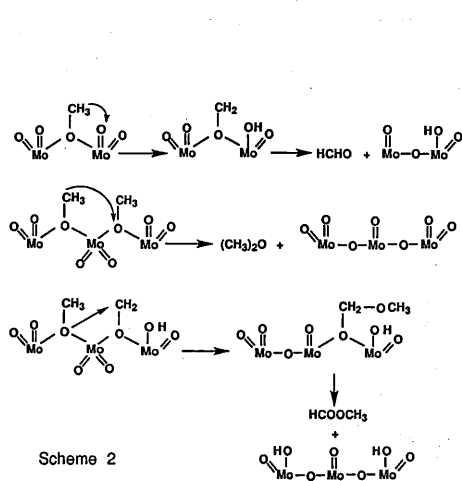


Fig. 1 Cluster 1

このような合成反応で理論的に重要なのは中心金属のまわりの価電子数である。すでに1960年ごろに当時合成されていた有機金属錯体の研究より18電子則が錯体の安定性を決定する原理として確立されていたが、その後16電子錯体が錯体触媒として重要な化学種であることがみだされた。16電子錯体の適当な反応性が触媒サイクルを円滑に回転させるのである。1980年にひろく知られるようになった新しいオレフィン重合触媒ではメタロセンアルキル錯体が

活性種となっていて14電子状態が重要であることが最近提案されている。この状態では欠電子性が高くなりアルキル基の水素が金属と弱い結合（アゴスチック相互作用という）を作って触媒作用を発現するものと考えられた。我々が合成した錯体のうち2bは同様な14電子状態を発生できるものであることが予想された。

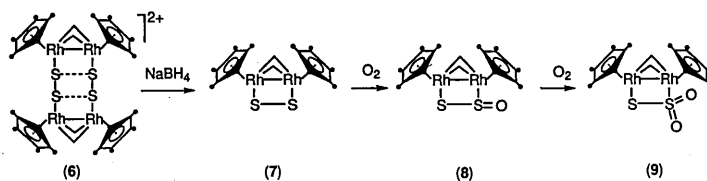
実際、これらのうちモノジエン錯体（2b） $X=Cl, CH_3$ とメチルアルミノキサンを組み合わせた触媒系はT a、N bでは初めてエチレンの重合活性が見い出され、しかも低温にてリビング重合することがわかった。² この特徴が発現する原因はこれらのジエン錯体では、とくに金属-炭素結合が熱的に安定であるためと考えられた。さらにこの特徴を利用して新しいベンザイン錯体（図2参照）やカルベン錯体が合成された。これらの錯体についても高い反応性を利用して種々の配位子との反応が調べられた。やはり16電子のルテニウムチオラト錯体（図2参照）についても触媒反応の基礎研究として各種の2電子供与分子との反応を調べている。³



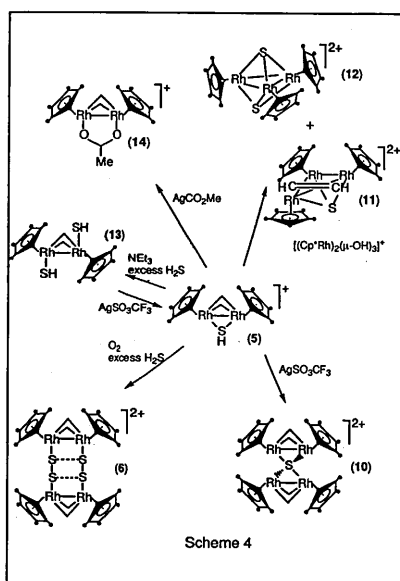
錯体の触媒機能の大きな課題である金属酵素の作用原理についてもペプチド金属錯体を系統的に合成してきた。なかでも鉄やモリブデンの硫黄配位子錯体について、電子移動作用がみられ、その電位の制御機構について新しい見方、つまり、錯体中心からひとまわり離れた所でのNH...S水素結合と芳香環による相互作用を見い出している。錯体の機能は、このような周囲の化学的環境によってみごとに発現するのである。

触媒作用の他、電子物性を目指して高分子化金属クラスターの合成も行ってきた。最近、pyphosと名付けた図3のような配位子を用いて直線状の混合金属クラスターの合成に成功した。³ この型の錯体は、いろいろな種類の金属を用いて合成出来るものと思われるので今後金属の種類を拡げてさらに長く伸びたものをめざす予定である。これらのうちではすでに、ドーピングに

よって半導性となることは確認されている。 また、これらは酸化反応などによって常磁性となることが予想されているのでこの点でも興味ある物質系である。



Scheme 3



参考文献

- 1) H. Yasuda, A. Nakamura, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **26**, 723 (1987)
- 2) K. Mashima, S. Fujikawa, A. Nakamura, *J. Am. Chem. Soc.*, **115**, 10990 (1993)
- 3) K. Mashima, H. Nakano, A. Nakamura, *J. Am. Chem. Soc.*, **115**, 11632 (1993)

錯体クラスター化合物の合成

分子研・阪市大 磯 辺 清

クラスターは分子科学のいろいろの分野で興味をひく物質あるいは化学種となっている。錯体化学では分子と凝集固体との橋かけをする物質群として大きな領域を形成しつつある。金属イオン3つ以上から構成される化合物（必ずしも金属-金属結合を有する必要はない）と定義され、単核や複核錯体では見られぬ構造や反応を示すものが次々と合成されてきている。

ここでは私のグループが分子研で行った酸化物および硫化物クラスターについての合成的研究の一端を紹介したい。

1) 立方体積層型酸化物クラスター

私のグループが酸化物クラスターの研究を開始した当初は、ポリ酸の化学は別にして、この分野は全くの揺籃期にあり、金属-酸素(M-O)結合をいかに構築するかという方法論も確立していなかった。しかし数年たった現在、酸化物クラスター、特に立方体型クラスターに関して三つの潮流が出来つつある。

ひとつは、生物界の光合成系、Photo-System 2における水の光酸化分解がMn原子を含む立方体酸化物クラスターによって行われているらしい事が提案され、その関連の研究が発展している。二番目はクラスター自身をもつ多電子レドックス系を形成する性質、特異な磁気および光物性を持つ物質として研究対象となっている。さらに3番目として固体酸化物表面の反応ダイナミックスを分子レベルで理解するために立方体型クラスターが用いられはじめている。この3番目の研究の流れは主として理論化学的なアプローチからはじまり、私くしのグループが新型の立方体積層型クラスター、 $[(\text{RhCp}^*)_4 \text{V}_6\text{O}_{19}]$ ($\text{Cp}^* = \mu^5\text{-GMe}_5$) (1) (図1)、 $[(\text{RhCp}^*)_4 \text{Mo}_4\text{O}_{16}]$ (2) (スキーム1) を発表したのと期を一にした。1、2はともに比較的ソフトなRh(III)の有機金属基とハードのV(V)あるいはMo(VI)の金属酸化物のイオンを含む複合的な構造と性質を持つ。

1は稜を共有した四重立方体型構造を持ち、反応活性なVally Siteを形成している。残念ながら光による水の分解は行わないが、バルクの水の酸素原子を取り込んで、自分自身の架橋酸素原子を選択的に放出する。またアセトニトリルの CH_3 基と強い水素結合をつくり、C-H結合活性化の可能性を示す。一方、クラスター2は面を共有した三重立方体構造をしている。このクラスターは、架橋Mo-O結合サイトでメタノール分子と反応し、不完全立方体型クラスター $[(\text{RhCp}^*)_2 \text{Mo}_3\text{O}_{19} (\text{MeO})_4]$ (3)を与える。そして3はジクロロメタン中ホルムアルデヒドを与えつつ、四

重立方体型構造の $[(\text{RhCp})_4 \text{Mo}_6\text{O}_{22}]$ (4)へ変化する (スキーム 1)。クラスター 3 に含まれる架橋 MeO 基の C-H , C-O の結合の切断が起こり、ホルムアルデヒド、ジメチルエーテル、メチルホルメートを与える。その生成反応機構をスキーム 2 に要約している。この生成機構の提示は MoO_3 固体上での CH_3OH の触媒的変換反応の解明に大いに役立つものと注目を集めている。Vally Site構造を有する 1 や不完全立方体型構造を有する 3 が反応活性でしかもユニークな反応性示すことは、固体表面での活性サイトの反応ダイナミックスを解明する上で重要な手掛かりになると考えられる。

2) 硫化物クラスター

紙面の都合上、 $\text{RhCp}^*(\mu\text{-SH})\text{RhCp}^*$ 基の特異な反応性から誘導される硫化物クラスターについてのみ述べたい。 $\text{M}(\mu\text{-SH})\text{M}$ は生物 (e. g., ニトロゲナーゼ)、鉱物 (含イオウ鉱物の生成) あるいは工業 (e. g., 脱硫) の触媒反応プロセスにおいて重要な役割を果たしているといわれているが錯体化学的な解明は、合成上の制約などのためほとんど行われていない。

近年私の研究グループで $\text{M}(\mu\text{-SH})\text{M}$ 基を持つ $[\text{Rh}_2\text{Cp}_2^*(\mu\text{-CH}_2)(\mu\text{-SH})]\text{X}$ (5, $\text{X}=\text{Cl}, \text{BF}_4, \text{BPh}_4$) を合成することが出来た。この複核錯体は空气中、固体および溶液状態とも安定であるが、過剰の H_2S 存在下、空気により三電子酸化をうけ、四核クラスター $[\{(\text{Rh}_2\text{Cp}_2^*(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-S}_4)\}]^{2+}$ (6) を生成する。6 は珍しい平面四角形の S_4 基を持っている。理論計算によりこの S_4 基は電荷的に中性で、しかもこれまで分光学的にも理論化学的にも興味をもたれていた中性の S_4 分子が二つの金属結合によって安定化されたものであることが明らかになった。6 を還元すると7のジスルフィド錯体を与える。7は順次酸素酸化され、8、9へと変化する (スキーム 3)。一方かなり強い酸化剤である“ Ag^+ in CH_2Cl_2 ”を用いて5の酸化を試みたが、酸化は起こらず部分的な脱硫化が起こり、四核クラスター $[\{(\text{Rh}_2\text{Cp}_2^*(\mu\text{-CH}_2)_2(\mu\text{-S})\}(\text{Otf})_2$ (10) が生成する。錯体5の $\mu\text{-SH}$ 基のプロトン塩基性の強い OH 基を有する $[\text{Rh}_2\text{Cp}_2^*(\mu\text{-OH})_3]^+$ で引き抜くと、三核クラスター $[\text{Rh}_3\text{Cp}_3^*(\mu\text{-C}_2\text{H}_2)(\mu_3\text{-S})]^{2+}$ (11)、 $[\text{Rh}_3\text{Cp}_3^*(\mu^3\text{-S})]^{2+}$ (12) が得られる。これら二つの三核クラスターはそれぞれ $\mu_3\text{-S}$ 基がモノキャップおよびバイキャップした構造をとっている。11中の $\mu\text{-C}_2\text{H}_2$ 配位子は二つの $\mu\text{-CH}_2$ 基より生成したもので、これまで例をみない C-C 結合形成反応が起こっていることになる。

以上 $\text{Rh}(\mu\text{-SH})\text{Rh}$ 基をもつ錯体5は反応条件を変えることによって、プロトンあるいは電子移動をともなつて、 $\mu_3\text{-S}$, $\mu_4\text{-S}$, $\mu_4\text{-S}_4$ クラスターへと変化する (スキーム 4)。これらは末端の M-SH 基にみられない特異な反応で生物、鉱物、工業における諸過程での複雑な物質変換やプロトンおよび電子移動に対する $\text{M}(\mu\text{-SH})\text{M}$ 基の役割解明の手助けになるものと考えられる。

研究室紹介

分子基礎理論第一研究部門 (岩田グループ)

分子研 岩 田 末 廣(iwata)^{注1}

分子研に移って丁度一年立ちました。分子研とのつき合いは大変長く、若き「学徒」として旧学芸大学の図書館に来たことがある位です。客員助教授も1979年から2年間務めさせて頂きました。分子研計算機センターの計算機が稼働してからは外部利用者として大変世話になりました。私が慶応大学の理工学部に移り学生と研究を始めてからは、クリスマスを分子研の計算機センターで迎えるのが年中行事として続いたものでした。この数年はネットワークを利用するようになり、また研究室にもワークステーションが揃ってきたので、計算機利用で岡崎に来る頻度は少なくなりましたが、別の仕事で4年間ほとんど毎月岡崎に来ていました。従って、だいぶ飲み屋の開拓も進みました。ところがひょんなことから、諸熊さんの後をついで、この部門で研究を進めることになってしまいました。さらには、センター長としてこれまでさんざんお世話になってきた計算機センターの管理にまで携わるはめになってしまいました。

私の高校や大学の同級生はそろそろこれまで務めていた大学や会社を辞めて新しい仕事に取り組み始めています。私もある意味では同じような気持ちで「初めての公務員」生活に取り組んでおります（が、前号に茅先生が書かれたように“暴挙”という声も耳に入りますし、なかなか簡単にはふっきれません）。

分子研に移って、研究室づくりを新しく始めているのですが、幸い助手として池上努(ikegami)さんが慶応大学から8月に異動してくれました。また、それに先立ち、5月には京都から天能精一郎(tenno)さんが理論第三の助手として着任し、私たちと一緒に研究グループを作ることになりました。慶応からは他に、渡辺秀和(hidekazu)さん（彼は学部生のころから秀和でとっています）が総研大の学生として私の研究室に移って来ました。大学院生はもう一人、諸熊先生時代からの藤井俊明(fujii)さんがいます。現在はこれだけでグループを作っていますが、沢山の4年生や修士の学生に囲まれて（をからかって）いたのと比べると少し寂しい感じです。

私の研究グループでは、実験が行われている（行うことの出来る）分子系や原子・分子クラスター系を対象に、非経験的な分子軌道法を主要な道具として、理論計算を行っています。定量的にも実験結果と対応できるような結果に基づいて実験結果を解析・予測しようとしています。最近では慶應の茅研の中性および陰イオン2成分クラスターの光電子スペクトルの解析を共同で進

めています。実験では間接的な情報しか得られないクラスターの幾何構造を分子軌道法によって決定し、分光学的データを計算しています。茅さんとのつき合いはとても（お互いの女房より）長いのですが研究面でこんなに身近になったのは実はこの2、3年のことなのです。長倉研以来のつき合いである分子研機器センター助教授の富宅(fuke)さんともこの2、3年特に緊密に研究を進めています。富宅さん達は、金属原子やそのイオンと水のクラスターの錯体やクラスター内反応、光化学反応において化学的想像力（常識）を越える現象が見いだしています。彼らは、Na, Mg, Al, Ca, Cs, Cuやそのイオンと水クラスターの反応を調べていますが、私たちはそれらの実験結果の解析を進めると同時に、もっと想像力をたくましく働かせたクラスター内反応にも挑戦しようと考えています。他に見附さんたちがNOの2次元光電子スペクトルで観測した電子的超励起状態の帰属にも挑戦しようとしています。非経験的な分子軌道法ではないのですが、DIM（分子内2原子分子）法を用いて、 $\text{Ar}n^+$ のクラスター内異性化反応や光吸収・光解離反応の研究にも力を注いでいます。n>20も扱えるプログラムを開発していますので、非断熱遷移を含む孤立系のエネルギー散逸過程を多方面から研究することができると考えています。

実際の研究の必要性に応じて、道具の開発にも心がけています。天能さんは巨大分子クラスターの研究のために4中心2電子積分を高速に近似計算するアルゴリズムを開発しています。池上さんは多自由度・多準位系の非断熱遷移を含む半古典軌跡計算のプログラムを開発しています。私は私に使いやすい分子軌道法プログラムを楽しみながら作っています。今は炭素や酸素の2s電子が励起・イオン化する高い励起状態を解離極限まで計算できるようにCIプログラムを書き直しています。秀和さんにもそろそろプログラムの開発に取り組んでもらおうと考えています。

所外の研究グループとの共同作業も積極的に取り組んでいきたいと思っています。すでに述べたように古巣の慶応の茅研と2成分クラスター（SimCn, SimNa, AlmSnなど）の研究を続けていますが、他にも神戸大学の加藤肇さんとCS₂の研究、東北大の三上・江幡研とはフェノールと水やアンモニアの錯体の研究、早稲田の藤井さんとはベンゼン置換体のメチル内部回転の研究を進めています。多くの場合、大学院の学生が岡崎に来て共同研究を行っています。この時無口な秀和さんが良き手助けになってくれます。千葉工大の松澤さんとはTTFの2量体を強引にab initio法で調べ、 $(\text{TTF}^+)_2$ が陰イオンの存在なしで結合することを見いだしています。

短い任期の間に何ができるのかという切迫感を感じずる時がありますが、その時の励みの言葉は、私の研究室で修士を了え総研大に進学している某嬢が私の着任直後に言った「助手でも6年で仕事ができるんだから、いわんや教授は、、、」という言葉です。

注1 iwataの後に@imn.ac.jpを付けると電子メールの宛先になります。以下に同様です。ご利用下さい。

理論研究系分子基礎理論第二 (谷村グループ)

分子研 谷 村 吉 隆

平成6年4月に分子研の一員となり、早くも一年が過ぎようとしています。空間の目立った研究室にも、8月にはIMSフェローの富田憲一さん、10月には助手の奥村剛さんが加わり、ワークステーションも届いて、机には論文や書類の山も出来たと(?)、ようやく研究室らしくなってきました。

分子科学は大変魅力的な分野ですが、その難しさは素粒子物理などに勝るとも劣りません。実際、素粒子物理が素粒子一つ一つの多様性とその相互作用(場)の体系を研究する分野とすれば、分子科学は分子一つ一つの多様性と、気相、液相などその間の相互作用からなる体系を研究する分野であり、一千万以上の分子からなる分子科学は、多様性という観点から見れば、素粒子物理より遥かに複雑なものを扱っているわけです。この多様性ゆえ、例えば、高分子物理が素粒子論や統計力学のくりこみ群論を用いて大発展を遂げた様に、分子科学は科学の多くの分野と影響しあいながら発展する分野だと思っています。

この様な事を念頭に、私たちのグループでは統計力学や場の量子論などの最新の物理的手法を武器に、多様な分子科学の問題を、ユニークな角度から切り込んで行く事をモットーに研究していきたいと思っています。現在進めている研究は(1)溶液中の分子の光学過程の研究、(2)凝縮相中分子の化学反応理論の研究、(3)有機物超伝導体などの低次元性物質の物性解析、(4)物性物理の手法を用いた強電子相関系分子の量子化学計算などです。現在、メンバーは3人ですが、それぞれのバックグラウンドは統計力学(谷村)、物性(富田)、素粒子論(奥村)と大変異なっており、理論系の他のグループとも交流しながら、それぞれの持ち味を生かした個性的な研究を行っていこうと思っています。例えば(1)の溶液中の分子の光学過程の研究には、私たちのグループでは、汎関数経路積分法という散逸系の統計力学の手法を用いて研究していますが、この手法は分子の光学過程の研究を行う上で大変強力であり、他の手法の限界を越えた新成果を得る事が出来ます。汎関数経路積分法は、フォーマルすぎるせいか、光学過程の研究の手法として注目されなかったのですが、やってみて分かった事は、分子の光学過程こそ、このフォーマリズムに最適な問題であったという事です。光学過程の問題はバリエーションに富んでおり、その研究に非平衡統計力学を応用しようとする事により、統計力学側に新しい問題を提起する事

も出来ます。また、分子科学と統計力学の橋渡しをする事により、統計力学の結果を実験で検証するという道も開かれます。同様な例は、分子科学と素粒子物理にもあると感じており、例えば（２）の化学反応の研究には、最近素粒子論で発展してきた新しい場の量子論的手法を用いる事を試みています。（３）の有機物超伝導体の研究については、現在、切り込み方を模索している段階ですが、モデルを仮定して出発するトップダウンのやり方はとらず、理論系の量子化学計算の研究者と協力して、分子の詳細な電子状態から出発して、ボトムアップで研究する方向を考えています。（４）の物性物理の手法を用いた強電子相関系分子の量子化学計算も、量子化学の研究者と協力して初めて可能になるもので、化学と物理の間にある分子研は、この様な研究を行うのに最適な環境だと思っています。

米国では、物理と化学の間の敷居が低く、物理学者と化学者が入り混じって活発な研究が行われており、大きな成果があがっています。それに比べて、日本では化学と物理が相分離しており（特に理論において）、それが日本の分子科学の発展を大きく妨げている感じがします。例えば、物理学者の間では、分子科学に対する認識が非常に低く、分子科学が大変魅力的な分野である事も、また、様々な分野の研究者が活躍出来る場である事も、あまり理解されていません。アメリカ物理学会には、Chemical Physics の大きな分科会があり、Journal of Chemical Physics が出版されているのと較べると、日本の現状はお寒い限りです。また、化学者の間では、物理学者のよく使う“抽象的なモデル”に対し抵抗がある様で、物理学者が化学の分野に入ってくるににくい雰囲気があります。異なるバックグラウンドを持つ化学と物理でスタンスが異なるのは当然ですが、分子という同じ対象を研究する分子科学において、両者は補間しあってこそ大きく発展可能になるのではないのでしょうか。日本の化学、物理の実力を考えると、両者のインターフェースを旨く作る事が出来れば、分子科学において欧米を圧倒出来る様な成果が生まれるはずです。多様性が特徴の分子科学は元来アジア向きの学問であると思っているので、日本での発展はアジア諸国にも影響すると思っています。

分子研に赴任して一年になりますが、分子研に来て非常に感銘を受けた事は、“分子科学を発展させる”ために、スタッフ一同、真剣であるという事です。そのためには、よい研究をする事はもちろんですが、化学と物理の橋渡しのため、研究会をオーガナイズしたり、他の分野の研究者と積極的に共同研究したりして、私たちも分子科学の発展のため尽力したいと思っています。

電子計算機センター (青柳グループ)

分子研 青 柳 睦

平成5年6月につくばからこちらに赴任し1年7カ月が過ぎました。着任と同時にスーパーコンの更新作業を前任の北浦先生から引き継ぎ、前センター長の中村教授、管理局の関係部署の方々とともに、当時は色々な意味で政治問題化していた「スーパーコン調達」と格闘し、毎日が緊張の連続でした。同年7月にスーパーコンの機種が決まると、次は平成6年1月の稼働へ向けて新スーパーコンシステムを公開運用するための作業を始めました。メーカーが日立から日電に替わっただけでなく、新電算棟の建築工事がスーパーコンの準備作業と並行して行われており、限られた期間（8から12月の5カ月）の間に新しく準備することが多すぎて毎日が目が回る思いでした。平成6年1月、新スーパーコンが無事に起動すると、次は平成7年1月の起動へ向けての汎用コン調達の準備を始めました。汎用コンの場合は、スーパーコンのように政治的な規制はあまりなく、調達手続きそのものに過度の神経を使わずに済んだことは幸いでした。しかし前年のスーパーコン更新では、調達に関する規制のために、センターの演算能力を飛躍的に増強できたとは言にくい結果となったので、今回の汎用コンではそれをある程度とりもどすために、限られた予算内でなるべく高い演算性能を要求するための方策など、仕様策定委員の方々と知恵を絞りました。その後8月に機種が決定し、1月の起動へ向けて運用のための調整作業が始まりました。汎用コンの導入によりセンターの全ての計算機のOSがUNIXとなるため、ネットワークで接続されている個々の計算機にそれぞれ得意な処理を分散処理させることが可能となります。しかし、センターのように千人近い利用者を持つ機関で分散システムを効率よく、また利用者からは一つのシステムとして容易に利用できるように運用するためには、各種の処理を分散した結果、それを総合的に管理するための「仕掛け」が必要です（管理する対象はジョブ管理、課金管理、ファイル管理、利用者ID管理、ライブラリ管理など多岐にわたります）。元来UNIXは、数十人程度の利用環境を対象に開発され発展してきたため、メーカーが提供するOSだけではセンター運用に必要な仕掛けがあまり整備されておらず、それらをメーカーのSEさんたちと共にほとんど初めから設計・開発しなければなりませんでした。また汎用コンシステムを構成する計算機のメーカーがIBMと日電の2社になったことも、統合的な管理をさらに難しくしたと思います。約4カ月間の準備期間を経、メーカーと管理局関係者そしてセンター職員の努力によって、本年1

月には、新スーパーコンと連携したネットワーク分散システムとして、新汎用コンの運用を開始することができました。

この1年と7カ月は、今までで一番短く感じられた時間でした。この間上記のように計算機センターのシステム更新が2回あり、始めの1年はほとんど研究時間を作れない毎日が続きました。汎用コンの仕様が決定し入札、そして技術審査が始まった昨年の夏ごろ（丁度、理論化学シンポジウムの講演準備をしていたころ）、次のようなことを真剣に考えました。それは、「センター教官の公募要項にあるように、センター業務と分子科学の研究を両立させてゆくためには、今後、センター業務といかにつき合っていったらよいのか」を私なりに追求してみたのです。その結果、(1) 5年に1度か2度の計算機更新の年はセンター業務に専念する（せざるおえない）こと、(2) 計算機更新後システムを安定稼働に持ち込むまでの1年は、運用調整・障害対策など色々な打ち合わせ会議や、メーカーとの交渉、利用者への対応などにより1日の中で研究に使える時間が細かく分断されてしまうため、研究上必要な計算プログラムの開発と整備そして論文などの資料集めを、細切れの時間を有効に活用して少しずつ行っていくこと、(3) 計算機更新の約1年後、システムが安定稼働できるようになったら、センターの日常的な業務を教官・技官の間で効率よく「分散処理」し、グループのメンバーができるだけ長く集中できる研究時間をつくる努力をして、論文などに成果をまとめること。現在は、(2)と(3)の中間なので、着任直後と比較すれば幸いにも何とか研究時間をもてる状態に移行してきています。

次に我々のグループのメンバーと研究分野を紹介します。助手の南部君は、私と共通のバックグラウンドで、電子状態計算によって少数多原子分子のポテンシャル面を高精度で求め、そこでの反応ダイナミックスの研究やスペクトルの解釈などに興味があります。現在は私と、LiCN系とHCO系の分子内異性化反応を量子波束の方法とDVR法を駆使して解析しています。昨年の2月からセンターの助手として来てくれた高見君は、量子カオスが専門で、大学院時代はパラメタを含むカオス系における量子準位の曲率分布統計に関する仕事を行ってきました。現在はカオス系の非断熱遷移を半古典的に解釈する問題や、具体的な分子の高振動励起状態の解析に興味があり、私との共同研究のテーマを摸索中です。技官の南野君は、センターでただ一人、実験研究の経験をもっており、センターでは大型の分子を精度よく取り扱うための分子軌道計算手法の開発とその応用に興味があり、私と並列分子軌道プログラムの制作に取り組んでいます。各メンバーは、今までの1年間にそれぞれの研究テーマに必要なプログラムの開発や基礎的・準備的な計算を行っており、これからの1～2年でよい成果を上げられるよう努力し、何とか業務との両立を図りたいと思っています。

井口洋夫機構長、文化功労者に



分子科学研究所の前所長、岡崎国立共同研究機構の井口洋夫機構長が文化功労者の荣誉に輝きました。文化功労者はその名の通り、「文化の向上発達に関し特に功績顕著な人を顕彰することを目的とした」法律に基づいて選ばれます。選出の理由は「物性化学、特に有機半導体の研究」を通して学術文化の向上に貢献されたことです。このような荣誉に輝かれました井口洋夫先生にたいし、先生の切り開かれた分野で研究している者の一人として、心よりお祝いを申し上げます。

井口先生は、昭和23年に東京大学理学部を卒業、同大学院を経て昭和25年に同大学理学部助手、昭和34年同大理学部助教授、昭和35年には同大物性研究所助教授、昭和42年に同大物性研教授に就任されました。昭和40年代半ばより、赤松秀雄教授、長倉三郎教授と共に分子科学研究所の設立に奔走され、昭和49年分子科学研究所創設準備室長、昭和50年分子科学研究所教授に就任されました。昭和62年に分子科学研究所を停止退官されたのち、同研究所所長、平成5年に岡崎国立共同研究機構長に就任され現在に至っています。

井口先生の研究業績であまりにも有名なお仕事は「有機半導体の発見とその概念の確立」で、それまで典型的な絶縁体と思われていた有機物固体の電気物性の研究です。その後チトクロームC₃における異常な伝導性の発見、分子ファスナー効果の提唱など常に独創的な発想に基づいた研究を展開され、現在文部省新プログラム「人工制御機能分子システムの研究」の代表者としてご活躍中です。一方ペリレン・よう素に代表される当時としては驚異的に高い伝導性をもつ電荷移動錯体の研究(1954年)は、1970年代以降飛躍的な発展を遂げた分子導体の瑞緒となっていますが、有機超伝導体として有名なBEDT-TTFも井口グループによって最初に発表されたことは皆様ご承知の通りです。また物性研時代に開始された有機固体の光電子光法によるイオン化エネルギーのデータは膨大な量にのぼり、物質設計の指針となっています。これらの優れた業績にたいして、日本学士院御賜賞(昭和40年)、日本化学会賞(昭和53年)、藤原賞(平成元年)を受賞されています。

井口先生はこのほか分子科学研究所の創設と拡充をはじめとする学術行政、日本化学会をはじめとする幅広い学会活動、教育、国際学術交流など科学の広い分野で多大の貢献をされています。また現在でも研究グループを率いて活躍され、われわれに刺激を与えつづけています。今後とも先生のますますのご発展とご健康を心よりお祈りし、お祝いの言葉とします。

(薬師久弥 記)

アジア学術セミナー

アジア学術セミナー（以下「セミナー」という。）は、日本学術振興会（J S P S）の事業の一環として、アジア地域の若手研究者の育成と研究交流を図る目的で数年前より実施されているものであり、特定のテーマを設定してその分野で活躍中の一流の研究者による講演と関連する研究所、研究機関の見学、訪問から成っている。

1993年8月、ニューデリーで開催されたインドー日本科学会議において、長倉三郎教授（総合研究大学院大学長）とC. N. R. Rao教授（インド科学研究所長）との間で、本セミナーを“分子科学及び分子材料”のテーマの下で1994年11月22日～12月2日にわたりインドのバンガロールにおいて開催することが合意され、日本学術振興会（J S P S）とインド科学技術省（D S T）が主催し、日本の分子科学研究所とインドのネールセンターがセミナー開催の世話機関となった。日本側はセミナー前半の講演を、インド側は後半の研究所見学をそれぞれ分担して立案し、実施することとした。セミナーの実施方法、講演内容、講師、見学場所の選択等について、組織委員会は約1年にわたって準備を行ってきた。一方、各国の著名な研究者にセミナーに参加する優秀な若手研究者の推薦を依頼した。その結果、アジアの約10ヶ国から約40名の若手研究者の参加が得られた。また、講師はノーベル化学賞受賞者を含む22名で7ヶ国にわたった。

セミナーの準備は万端ととのえたつもりであったが、実際にインドに着くまでは心配がなかったと言えば嘘になる。しかし、セミナー会場であるハンガロールのインド科学研究所に着き、不安は一掃した。南インドのカルナータカ州の州都であるバンガロールは標高700mの高原に位置する緑あふれるガーデン・シティーであり、避暑地としても有名である。市の北西部にあるインド科学研究所は広大なキャンパスを占め、うっそうと茂る大樹の森の中に由緒ある重厚な建物が点在する別天地であった。11月は乾期にあたり、澄んだ青空が拡がり、軟かい日射しが樹々葉に照りかがやいている風景は、ここに来るまで想像だにできなかったものである。また、よく整備された快適な宿舎はインドまでの長旅の疲れをいやしてくれるに充分であった。

セミナーの会場は、今世紀初頭に建てられたFaculty Hallという英国風の重厚で気品あふれる石造りの大きな建物の中にあり、これもまた英国の国会議事堂内を思わせるような200人位が収容できる立派な講義堂であった。

セミナーは、C. N. R. Rao教授の歓迎の辞、長倉三郎総合研究大学院大学長、菊池健日本学術振興会理事及び私の挨拶のあと、各講師による講演が後に掲げるプログラムに従って進行した。講演は午前に2つ、午後に2～3つという比較的ゆったりとしたもので、討論の時間も十分に設

けた。コーヒープレイクや立食形式の昼食は、講義室に隣接する貴族の舞踏会場を思わせるような壮大な部屋があてられ、そこで討論の続きがなされたり、また講師と若手研究者との活発な交流が行われた。夕方の5時から7時までの2時間は若手研究者がそれぞれの研究を発表するプレゼンテーションにあてられ、活発な討論が展開され大いに盛り上がった。このようにすべての参加者が朝9時から夕方7時頃まで行動をともにした1週間であった。こう書くと大変ハードな1週間と聞こえるかもしれないが、ゆったりとして和気藹々の楽しい1週間であった。なお、11月25日以降の講義は同じキャンパス内にあるネールセンターの講義室に会場を移して行われたが、ここも熱帯の色鮮かないろんな花でかこまれたすばらしい場所であった。

今回のセミナーは、一流の研究者による第一線の研究をじっくり聞くことを主眼としたため、これら研究者の研究に対する哲学というか、考え方、アプローチ、通常の学会等ではとても聞けない貴重な話が聞けた。このように、ノーベル賞受賞者を含む22名の著名な分子科学研究者からそれぞれまとまった講演を一週間にわたってしかも限られた少人数で受ける事ができたのは贅沢の極みと言うべきであろう。若手研究者はもとより講師をつとめたシニアの研究者にとっても極めて有意義なものであったと思う。また若手研究者によるプレゼンテーションも素晴らしいもので、意欲あふれる優秀な研究者がアジアで確実に育ちつつあることを実感した。若手研究者たちはセミナー開催中、同じ宿舎で寝食をともにし、互いに深い友情と強い連帯感が生まれたように思う。この友情と連帯感は、アジア地域における分子科学の今後の発展に重要な役割を果たすに違いない

(分子研所長 伊藤光男 記)

スーパーコンピュータと汎用高速計算機システム

電子計算機センター

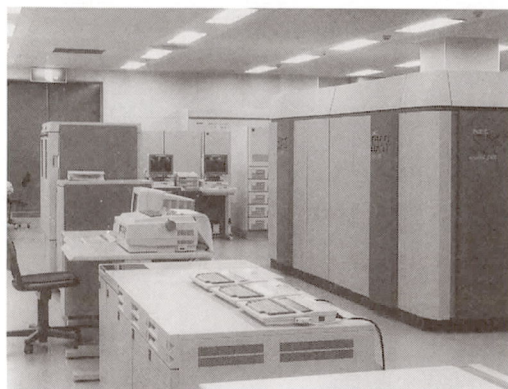
ここ数年、コンピュータの進歩は目まぐるしいものがある。特に、パソコンからワークステーションと呼ばれる領域に属する機種の進歩は我々の想像を遥かに越えている。ここでの進歩とは単に単一機種の演算性能が向上しただけではなく、ネットワークを利用することにより複数台の機種を使った分散処理や高速スイッチを使った並列処理による性能向上等が含まれる。さらに、価格の低下も進歩を促す重要な要因となっている。この様な状況下、昨年から今年の春にかけて分子研電子計算機センターには、大まかに二つの新システムが導入された。一つのシステムがスーパーコンピュータシステムであり、もう一つが汎用高速計算機システムである。二つのシステムともこれから重要視される分散処理及び並列処理を意識したシステムとなっている。

スーパーコンピュータシステムは日本電気株式会社 (NEC) 製スーパーコンピュータ SX-3/34R であり、演算処理能力は最大で 19.2 GFLOPS である。このスーパーコンピュータの得意な処理は従来からのベクトル演算を高速に行うことであるが、本システムではこのベクトル演算を行うベクトル演算機を 3 台所有し、それらを同時に利用したベクトル演算の並列処理を行うことが可能となった。そのため、処理能力は飛躍的に向上している。なお、本システムには動画像出力機能が備わっており、処理された膨大な計算結果を基に動画を作成することが可能である。特に、VHS、8ミリ及び VTR への録画 (コマ撮り) 機能を有し、ハイビジョンディスプレイに高精細な画像を表示させることも可能である。

一方、汎用高速計算機システムはさらに二つのシステムからなる。一つは NEC 製高速演算サーバーシステム HSP であり、演算処理能力は最大で 200 MIPS である。もう一つは IBM 製演算クラスタシステム SP2 であり、48 個のノードで構成される。また、全ノードに対する 1 CPU 当たりの平均演算性能は 92.35 MFLOPS である。ここで、ノードとはメモリを共有する CPU の集まりのことを示し、この演算クラスタシステムでは 1 ノード当たり 1 CPU を所有する。NEC 製高速演算サーバーシステム HSP の特徴は、高速な I/O を行うことのできる拡張記憶装置やアレイディスク装置を所有することである。一方、IBM 製演算クラスタシステム SP2 の特徴は、ノード間の通信を IBM 社より開発された高速スイッチにより高速に行うことが可能であり、この高速スイッチを利用することにより、これから特に重要視される並列処理を行うことが可能である。

分子研計算機センターでは従来からベクトル処理を重視し、同時にベクトル演算が中心となるようなプログラム開発を行って来た。これから 1 年先のことも混沌とはしているが、並列処理が重要となって来ていることは明らかである。ベクトル・パラレル処理を睨んだプログラム開発が求められる。本システムが導入されることにより、新しいアルゴリズムによるプログラム開発とそれによる理論分野の新しい発展が期待される。

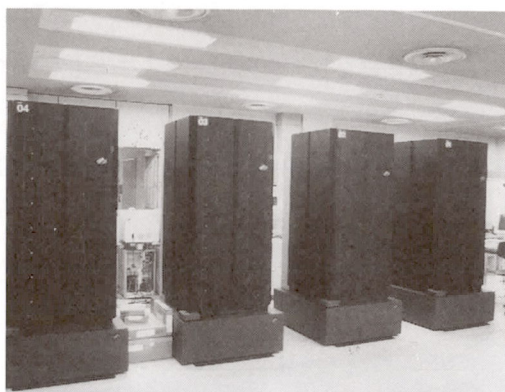
(青柳 睦 記)



スーパーコンピュータ SX-3



汎用高速計算システム HSP



汎用高速計算システム SP2

高校生インターナショナルサイエンススクールの実施

平成6年8月1日から6日まで、高校生インターナショナル・サイエンス・スクール「分子と生命に関する科学プログラム」が、外国人高校生9人、日本人高校生20人を対象に岡崎国立共同研究機構で実施され、分子科学研究所では薬師教授の「分子科学の紹介」、斎藤教授の「星間分子の分光と化学」、加藤助教授の「分子構造の決め方(分子分光学)」及び正畠教授の「シンクロトロン放射光でみる分子の世界」の講義や実習を行った。

この科学プログラムは、アジア太平洋地域諸国及び我が国の高校生を対象に、物理学及び生物学等の最先端の研究の現状を理解させ、また各国高校生の交流を通じて相互理解や親善を促進することを目的に、平成6年度に初めて開催された。主催は、財団法人日本国際教育協会で、高エネルギー物理学研究所と岡崎国立共同研究機構の共催として行われ、スクール全体としては7月30日から8月1日まで、外国人高校生19人、日本人高校生40人の計59人が参加して実施された。

本機構で実施された分子と生命に関する科学プログラムの日程表を参考として掲載します。

なお、本科学プログラムは、平成6年度に引き続き平成7年度も実施されることになっており、実施期間は平成7年7月23日から一週間の予定です。

(国際研究協力課)

日 程 表

受 講 日	時 間 割	講 義 内 容
平成6年 8月1日(月)	9:00~9:30	受 付
	9:30~10:30	開講式及びオリエンテーション
	10:50~12:20	特 別 講 演 講師：江橋節郎
	12:20~13:40	休 憩 (昼食；レストラン「サングリア」)
	13:40~15:10	講義及び実習；顕微鏡による細胞観察 ～光学顕微鏡から超高圧電子顕微鏡まで～ 講師；濱 清、湯浅茂樹、池の中一裕 場所；生理学研究所
	15:30~17:00	
	17:30~	交 流 会
平成6年 8月2日(火)	9:00~10:30	講義及び実習；体を傷つけない筋肉のエネルギー状態の観察 講師；亘 弘、吉田敬義、池の中一裕 補助者；山口宣秀 場所；生理学研究所
	10:50~12:20	
	12:20~13:40	休 憩 (昼食；レストラン「サングリア」)
	13:40~15:10	講義及び実習；マウスの遺伝子を置き換える。
	15:30~17:00	講師；八木 健、池の中一裕 場所；生理学研究所
	17:00~20:00	質問・討論・予習・復習 (鹿川哲史、田村雅一)

受 講 日	時 間 割	講 義 内 容
平成 6 年 8 月 3 日 (水)	9 : 00～10 : 30	講義；植物・微生物の光感覚
	10 : 50～12 : 20	講師；渡辺正勝、高橋哲郎、大瀧 保 場所；基礎生物学研究所
	12 : 20～13 : 40	休 憩 (昼食；レストラン「サングリア」)
	13 : 40～15 : 10	実 習；微生物の光行動反応
	15 : 30～17 : 00	講師；渡辺正勝、高橋哲郎 補助者；久保田 守、松永 茂 場所；基礎生物学研究所
	17 : 00～20 : 00	質問・討論・予習・復習 (松永 茂)
平成 6 年 8 月 4 日 (木)	9 : 00～10 : 30	実習；生活環の光制御
	10 : 50～12 : 20	講師；渡辺正勝、佐藤忠文、中村省吾 補助者；久保田 守、山宮公子 場所；基礎生物学研究所
	12 : 20～13 : 40	休 憩 (昼食；レストラン「サングリア」)
	13 : 40～	トヨタ自動車 見学
平成 6 年 8 月 5 日 (金)	9 : 00～10 : 30	講義；分子科学の紹介 講師；薬師久彌 場所；分子科学研究所
	10 : 50～12 : 20	講義；星間分子の分光と化学 講師；斎藤修二 補助者；尾関博之 場所；分子科学研究所
	12 : 20～13 : 40	休 憩 (昼食；レストラン「サングリア」)
	13 : 40～15 : 10	講義及び実習；分子構造の決め方 (分子分光學) 講師；加藤立久
	15 : 30～17 : 00	補助者；戸村正章、野村幸代 場所；分子科学研究所
	17 : 00～20 : 00	質問・討論・予習・復習 (長谷川真史、尾関博之)
平成 6 年 8 月 6 日 (土)	9 : 00～10 : 30	講義及び実習；シンクロトン放射光でみる分子の世界 講師；正畠宏祐 補助者；河野光彦
	10 : 50～12 : 20	場所；分子科学研究所
	12 : 20～13 : 40	休 憩 (昼食；レストラン「サングリア」)
	13 : 40～14 : 30	閉 講 式
	14 : 30～	ホームステイ先へ 移動

一般公開行われる

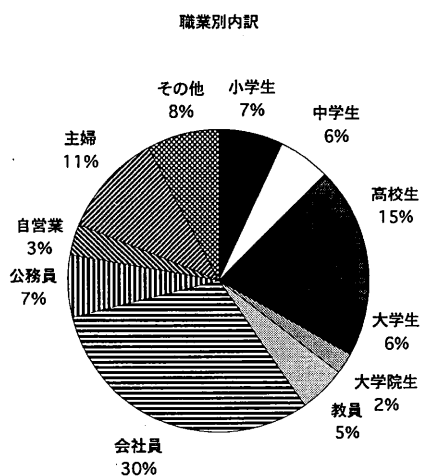
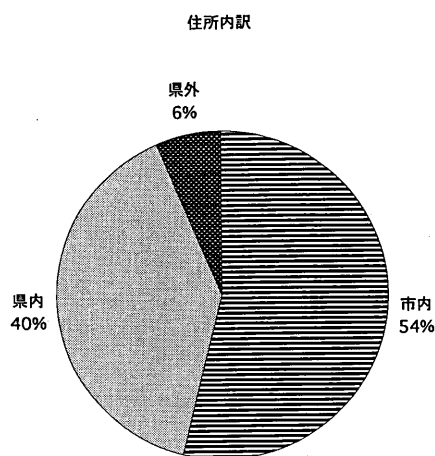
分子科学研究所では昨年11月12日(土)に一般公開と講演会を行いました。岡崎国立共同研究機構では毎年順番に研究所の一般公開を行っていますが、今年は分子研が前回(平成3年10月)の後、3年ぶり7回目の公開です。

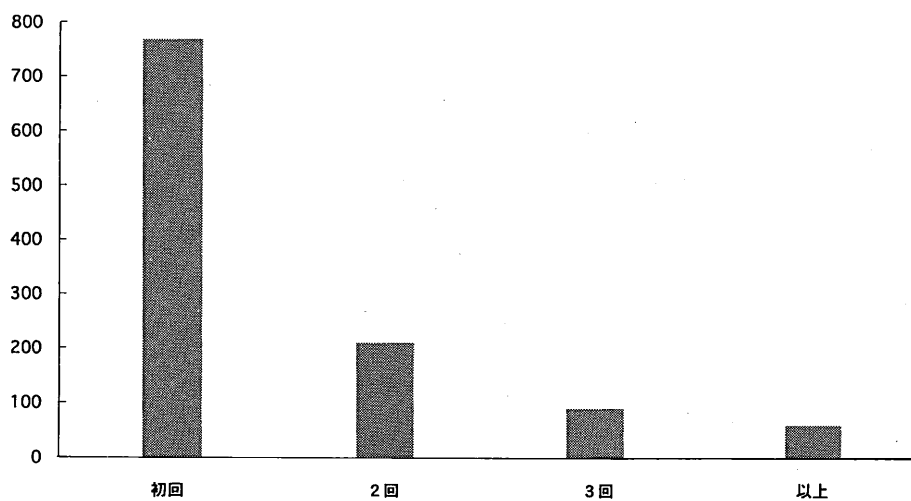
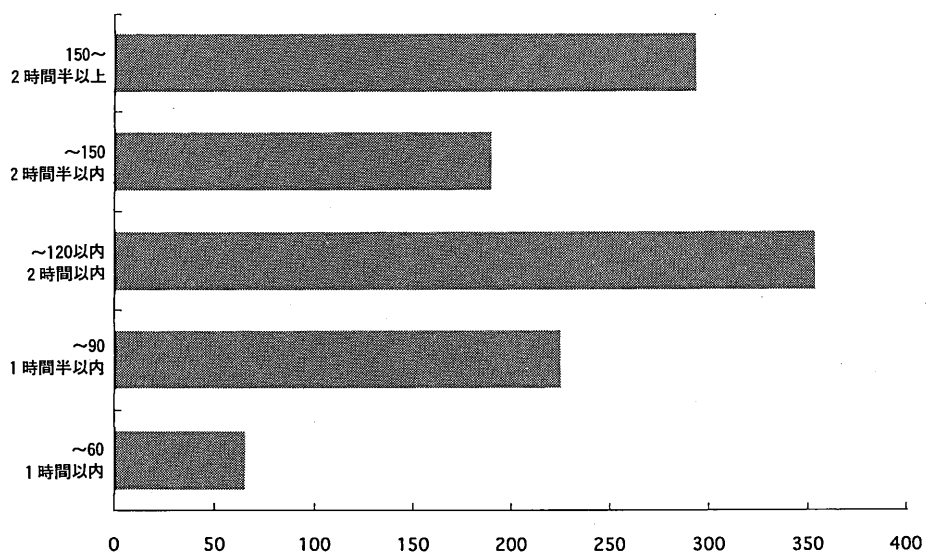
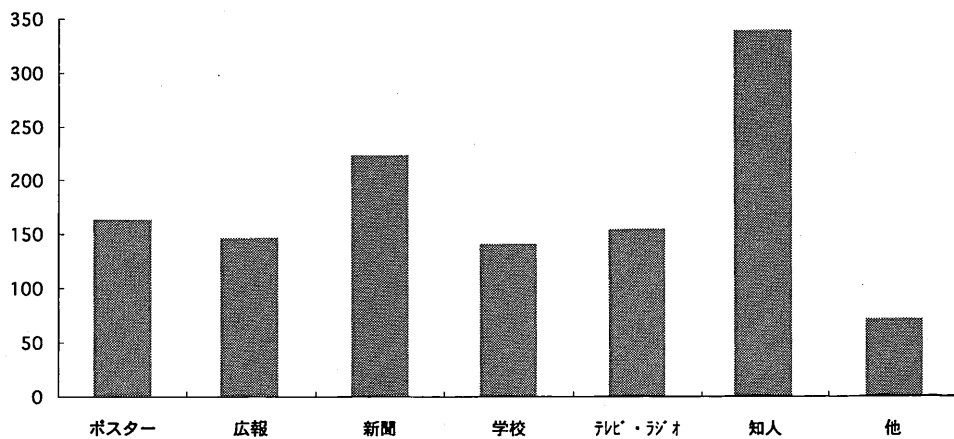
今回は、第2土曜日で学校休日に当たり、朝から多くの中・高校生、家族連れが訪れ、1日で約2,700人の見学者があり、一日中賑わいました。また、企業の方も多く、個人で見学に訪れた方以外に勤務先から団体で来所されたところもありました。

当日は23箇所の見学会場と講演会が3回行われ、順路が長すぎる、講演会場が狭いなどの声もありましたが、ほとんどの方には見学の満足感を持っていただくことができました。見学者のうち2,450人にアンケートを渡し、1,262人から回答を得ました。その集計を次に掲載します。

今回も一般公開が事故もなく大盛況に行えたのは、分子科学研究所職員及び管理局職員のご協力のたまものです。ここでお礼申し上げます同時に、アンケートの中にも感謝のことは数多くありましたことを申し添えます。

(庶務課)





「分子科学への招待」

公開日：平成6年11月12日(土)

展 示

- | | |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> ① 大型計算機のパワーとネットワークコンピューティング ② 核スピンの見える分子集合体の世界 ③ 原子を光の中に閉じ込める ④ 宇宙の分子を探る—星間分子の実験室分光— ⑤ タンパク質分子をレーザー光で調べる ⑥ 有機固体の中の電子：遍歴か局在か？ ⑦ 表面の分子の世界を探る ⑧ 情報ネットワークとマルチメディア ⑨ 有機超伝導 ⑩ 小さな分子を金属イオンがつかまえる
—酢酸イオンと炭酸ガスの還元反応— ⑪ NMR装置と研究 ⑫ 原子、分子の散乱を画像で見る | <ul style="list-style-type: none"> ⑬ 振動、秩序、カオス ⑭ ヘリウムと低温 ⑮ 研究装置の設計・製作 ⑯ レーザー光線の性質 ⑰ 分子を分析する ⑱ フラーレンの科学
—サッカーボール分子, C₆₀— ⑲ 加速器の光で分子を見る ⑳ 内殻電子を励起して何がわかるか ㉑ 分子やクラスターの励起状態を
極端紫外光で調べる ㉒ 電子分光で分子やイオンの励起状態を探る ㉓ 極端紫外光による表面化学反応 |
|--|---|

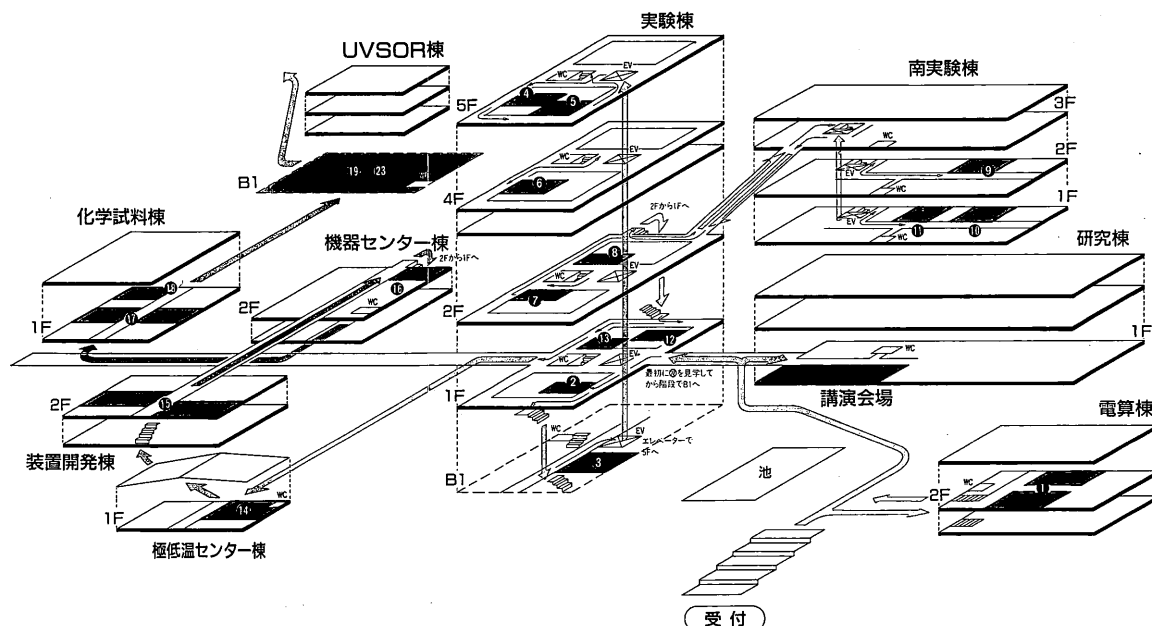
講 演 会

第1回 10:30 鈴木俊法「分子の分解や散乱を見る」

第2回 12:30 田中晃二「炭酸ガスの化学的利用」

第3回 14:30 斎藤修二「分子で宇宙をみる」

見学順路中は禁煙です。休憩は職員会館をご利用ください。



レターズ

分子科学若手の会の近況報告

1994年度分子科学若手の会事務局代表

東京工業大学理学部化学科 小國研究室 小 橋 和 久

あけましておめでとうございます。寒い日が続きますが、皆様いかがお過ごしですか？（かつて本会の会員であった皆様、および本会に何等かの関わりをお持ちになった皆様、お元気ですか？）さて、早速ですが、分子科学若手の会の近況報告をしてみたいと思います。まず、それに先立ち、分子科学若手の会についてご存知ない方のために本会を手短かに紹介させていただきます。本会の目的は、

(1) 分子科学に関心を持つ若手研究者の研究活動を推進し、親睦の機会を設け、分子科学の発展に寄与する

(2) 研究活動の中で直面する諸問題を相互協力して解決する

であり、夏の学校や親睦会の開催等の活動を行っております。特に本会が最も重要視しているのが「夏の学校」であります。この「夏の学校」とは本会により運営されており、第一線で活躍中の研究者を複数名講師としてお招きし、毎年夏に勉強会を開催しております。すなわち、活発な討論や懇親会を通して、全国の様々な大学や研究機関の方々が互いに親睦を深める場が「夏の学校」なのであります。

第1回の夏の学校が開催されたのは1961年（於山梨県清里）のことであり、今年度で第34回目（於大阪府吹田…1994年8月22日より3泊4日）を迎えることとなりました。発足時ほんの数人だった会員数も現在では58研究室236名にまで増加し、その規模も北は北海道から南は福岡に至るといった全国規模のものになっております。また、分科会の数も当初の4つから6つに増加しました。各分科会の内容は理論系、実験系の何れかに片寄ることがないように各年で十分に吟味されており、各会員の専門が例えどのようなものであったとしても毎年最低でもどこか1つの分科会を選ぶことができるようになっております。例として今年の分科会の担当講師と題目を挙げてみると、1. 梶本興亜先生「化学反応の立体動力学」、2. 足立聡先生「原子・分子における量子系のカオス」、3. 見附孝一郎先生「軌道放射光分子科学—光イオン化と光解離」、4. 川勝年洋先生、小貫明先生「高分子物理・相転移ダイナミクス」、5. 築山光一先生「真空紫外領域のレーザー分光」、6. 大澤雅俊先生「固体表面と振動分光」

もうお気付きの方がいらっしゃると思いますが、現在の会員の大多数は本会の発足当時、まだこの世に生を受けておりません。また、会員の多く（したがって本会運営の中心）が大学院生であることから、ほんの数年で顔ぶれがすっかり入れ替わるといった特異性があり、良い意味でも悪い意味でも伝統が育ちにくい環境にあることも見逃せません。こうした理由から、本会および夏の学校の性格および主旨は発足当時とはかなり変化したものであると思われます。しかし、だからといって発足より34年という月日によって上述した本会の「目的」まで変わってしまったのでしょうか？否、本会は月日を経るにつれて、その時々で必要に応じて変革を重ねてきただけなのです。発起人たちはかつての受講者が今度は講師になって「夏の学校」に参加するといったことを予想できたでしょうか？こうした意外性が生じてくるのは各世代の会員一人一人の持つ本会への情熱の表れなのであり、この情熱は世代を越えて継承されるものなのです。10年後、本会にはどのような意外性が出現しているのでしょうか？

1995. 1. 5

東京工業大学理学部化学科小國研
94年度分子科学若手の会事務局

分子研を去るにあたり

往 者 不 可 及

大阪市立大学理学部 磯 辺 清

7年10ヶ月、長倉、井口、伊藤先生の三代の所長の暖かい支援のもとで、存分に研究をさせていただいたという思いがします。得られた成果は、ささやかなものであるかも知れませんが、今一度分子研でやり直しをしたとしても、私からはこれ以上のものは、おそらく出てこないだろうという点で納得のいくものです。しかしこの7年10ヶ月が順調な期間ばかりであったかということではなく、むしろ逆の様な気がします。

1987年1月1日に42才で関連領域研究系の助教授として赴任しました（分子研において、当時採用時の年齢として一番年をとっていた助教授ではなかったかと思います）。そして、分子研に関して「超エリート研究者が昼夜たがわず研究に打ち込んでいて、非常にハードな研究所である」という噂を聞いていましたので、私の様な凡庸な人間が果たしてこの研究所でやっていけるのだろうか？不安と責任の重さで、助教授に採用されたという喜びはありませんでした。極度の緊張状態で研究のスタートを切ったのが昨日の様に思い出されます。

ただ幸いだったのは、はじめに設定した酸化物クラスターおよび硫化物クラスターの合成化学的研究に関する二つのテーマを途中でなげだすことなく押し進めることが出来たことでした。ほとんど研究が前に進まず暗澹たる思いで宿舍に引き揚げる日が続いたことがあります。若手のスタッフや外国からの研究者の献身で乗り切ることが出来ました。また苦しい時には他所のポジションに応募したいという気持ちにもなりました。そのような時に先生方や同僚にはげましの言葉をかけていただいたことで、私の「弱きの逃げの気持」が「強気の攻めの気持」へと転換したことが何度かありました。研究の基礎を固めた若手の研究者が次々と新展地を求めて転進していきました。緊張感がゆるむ暇もなく1991年の後半からまったく新しいメンバーで研究を再スタートさせました。いろいろな分野から若手が集まってくれて非常にユニークなグループが出来あがりました。この2年半の間フル回転で研究に取り組むことが出来、私にとって分子研での最も充実した期間になりました。グループの人の将来の方向もほぼ決まりかけているとはいえ、この様な盛り上った状態でのグループの解消にはつらい思いがあります。「もう少し若くして分子研に来ていれば」という悔やみの念がわいてきます。

いずれにしても7年10ヶ月、張りつめた気持で研究に取り組んでくれたこの気持をどの様にあ

らわして良いのか分かりません。ただいえることは分子科学研究所がたゆまぬ自己変革の努力をしていることが、私の心持ちに強く反映してきたものと思っています。終わりにあたり国内外の多くの研究者とおつきあいすることが出来、かついろいろの御厚情をたまわりましたことをこの紙面をお借りして心よりお礼申し上げます。

大きな桜の木の下で

大阪市立大学理学部化学科 田 所 誠

「分子研、それは東岡崎だよ」と初めて九州汲んだりから着いたときに、恥ずかしながらJR岡崎駅に降りてしまいタクシー運転手のおっさんに笑われたことがありました。あれからちょうど二年半程分子研にいられたわけです。分子研の守衛室前の桜がちょうど満開な4月に赴任しました。以来、この桜の花を3回ほど見られたことになります。この桜の花が散る度に、その壮大な花吹雪を見る度に心の中が一新されたものです。

九州大学理学部で錯体化学で学位をとった後、全く違う科学をやりたくて程なく分子研に着任しました。そして、分子研において大阪大学理学部に移られた有機物性化学の中筋一弘教授の下でプロトン電子連動物質の開発に取り組むことになりました。分子研は物質科学を目指すものにとってスペシャリストの集団であり、私みたいな新参ものが役に立つかどうか不安だったのは言うまでもありません。分子研において数グループが共同して世界にも類をみないプロトンを利用しようとした科学プロジェクトが展開されていたのです。中筋先生は有機合成の専門家であり先生とのディスカッションは合成化学いや、合成科学について根本的に修正されたような気がしました。いままで、無機合成、有機合成に従事していた合成屋としての強味でしょうか、不安は一掃されたようです。そして、初めは「どんな現象なのか」「何を作ればよいのか」「どうすれば作れるか」の自問自答の繰り返しに加え文献検索、実験と明け暮れた毎日だったような気がします。

気がつくと2回目の桜の季節が来ていました。この頃になるとやっと研究に関するめぼしがついてきていろいろな面で余裕が出てきたと思います。しかし、研究はこれからというところでした。みなさんがよく言うように「合成するにはマンパワーが必要だ。」の言葉の意味が実感されたのはちょうどこの頃だったと思います。また、サングリアのランチは値段が上がったのに味は下がってますます人が来なくなるのではないかと、せっかく花火大会の委員長をやらせてもらったのに記憶がなくなるまで飲みまくって迷惑を掛けなかったらどうかとか、どうして分子研の独身者は分子内反応が多いのだろうか、新しい所長は非常に怖そうであるけれども実はお好み

焼きも焼くことができるのだなどと余計な余裕も出てきたようです。

程なく3回目の桜の花を見ることになりました。研究はまだまだ物性発現の面において物足りないものがありましたが、すでに末広りの体制になっておりあまり心配する必要がなかったように思われます。そして、短期助手としての任期の限界を感じたのもこの頃でした。このときの桜の花は何かいつもと違った散り方をしていたようです。桜の木全体がゆっくりとそして大きく確実に変わっていたのです。分子研を早く動くように訴え掛けていたのかもしれませんが。今、自分はこの二年間を分子研でフルに活用できたと言い聞かせています。そして、従来にない新しい科学を二年間かけて育ててきたのだと……。

現在、大阪市立大学理学部化学科に赴任してからはや3ヶ月たとうとしています。こちらの大学では給料も上がり、まだ若輩者ですが幸い自分一人でテーマを展開し、分子研のときの課題も続けることができるようになりました。ここは分子研ほどお金や人的な広がりを持つことができませんが分子研時代に培った人、技術、知識は大切にしていきたいと思っています。

最後になりましたがお世話になりました谷沢さんを始めとする秘書の方々、関連領域研究系の皆様、化学試料室の皆様、錯体実験施設の皆様、装置開発室、機器センター、低温センター、UVSORの皆様、凝縮系の皆さん、そして都築さんに感謝いたします。

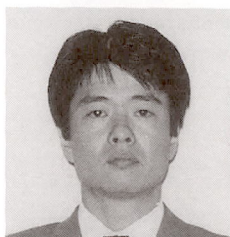
新任者紹介



わた なべ よし ひと
渡 辺 芳 人

相關領域研究系相關分子科学第一研究部門 教授

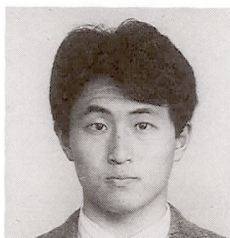
「これまで何回引越をしましたか」と問われると「両手でも足りない……」と答える生活に、終止符が打てそうな今日この頃です。東北大、筑波大、ミシガン大、プリンストン大、慶大、化技研、京大を経て現在に至っています。金属蛋白質の作用機構を主題として、合成モデルから蛋白質の改変まで手を染めています。趣味はスキー、ダーツ、テニス（下手だけど）等々。



きの した とよ ひこ
木 下 豊 彦

極端紫外光実験施設 助教授

昭和63年東北大学理学研究科博士課程修了。その後東京大学物性研究所つくば分室勤務。これまでは、放射光を利用した固体、表面の光電子分光研究を行うとともに、高エネ研放射光施設に設置した、物性研のビームライン建設にたずさわってきました。平成6年10月よりUVSORに着任しました。今後はUVSORビームラインの性能向上とともに、微少領域の光電子分光なども手がけたいと思います。趣味はスキー、サッカーです。



おく むら こう
奥 村 剛

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 助手

平成6年10月に、慶応大学理工学研究科後期博士課程を中退し、岡崎に赴任。場の理論での研究経験を活して、今後は化学物理の研究に励みたい。スキー教師の端くれ。よろしくお願い致します。



もち だ とも ゆき
持 田 智 行

分子集団研究系分子集団研究部門 助手

平成6年東京大学大学院総合文化研究科博士課程中退。同年11月より現職。在学中のテーマ：水素結合系分子結晶における動的物性。新物質の開発に興味を持っています。よろしくお願いいたします。



た はら た へい
田 原 太 平

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 助教授

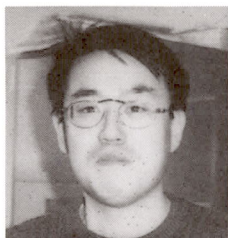
平成元年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了。東大助手、神奈川科学技术アカデミー研究員を経て平成7年1月より現職。オリジナリティの高い研究をしたいと思っています。どうぞよろしく。



なか い とし ひと
中 井 利 仁

分子集団系分子集団動力学研究部門 非常勤の講師

京都大学院理学研究科博士課程修了。その後カナダはプリティッシュコロンビア大学のポスドク及びリサーチアソシエイトとして4年余りを過ごし、平成6年12月に現職に着任致しました。これまでNMR分光における新しい手法や解析法の開発を行なって来ましたが、今後応用研究にも力を入れて行きたい所存です。どうぞよろしくお願い致します。



Jangseok Ma (壮錫 馬)

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 外国人特別研究員

B.S. in Chemistry at Seoul National University (1986) working on the surface enhancement Raman scattering (SERS) under Prof. Kwan Kim. and Myungsoo Kim. **Ph. D.** in physical Chemistry at Brown University (1993) working on the photoisomerization reactions of *tetra*-phenyl ethylene and its derivatives under Prof. Matthew B. Zimmt. **Postdoctoral research** on the solvation dynamics at The University of Texas at Austin (1994) with Prof. Mark A. Berg.

Research Program at IMS: Molecular level understanding of electronic or vibrational solvation dynamics using higher order nonlinear spectroscopic methods, such as, CARS, Raman Echo and Fifth Order Scattering techniques



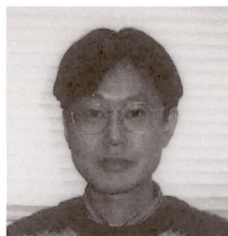
Yuxiang Mo (莫 宇翔)

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 外国人研究員

B. Sc. (1984), Wuhan University, China. **M. Sc.** (1988) and **Ph. D.** (1992) at Dalian Institute of Chemical Physics, The Chinese Academy of Sciences. Since 1992, an assistant professor at Wuhan Institute of Physics, The Chinese Academy of Sciences.

My present work in Prof. T. Suzuki's group is to extract Vector correlations of photodissociation from ion images.

I am interested in molecular collision dynamics and high-excited state dynamics.



とみ た のり かず
富 田 憲 一

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 非常勤の講師

平成6年京都大学理学研究科博士課程修了。同年8月1日からIMSフェローとしてお世話になっています。電子関連理論で物理、化学の両分野にまたがった仕事をしたいと思っています。よろしくお願い致します。



つつ い のり こ
筒 井 範 子

理論研究系 事務補佐員

ぐうたらな生活に終止符を打って、毎日規則正しい生活をするようになって、3ヶ月が過ぎました。以前の職場とは雰囲気が違う為、戸惑うことも多く、数々の失敗や迷惑をおかけしていますが、持ち前の明るさで誤魔化しています(皆さん、すいません・・・)。良ろしくお願い致します。



なか むら あや こ
中 村 綾 子

錯体化学実験施設 事務補佐員

以前はなんと税務署に勤めていました。そして平成7年3月よりこちらでお世話になることになりました。

テニス、スキーなどやりますのでやられる方はいつでも声をかけて下さい。あとカラオケも好きです。

岡崎コンファレンス報告

第50回岡崎コンファレンス

電子欠損型遷移金属錯体の機能

(Functions of Electron Deficient Transition Metal Complexes)

開 催 日 平成6年8月1日－8月3日

提 案 代 表 者 名古屋大学 教授 巽 和行

分子科学研究所 助教授 高橋 保

所 内 世 話 人 分子科学研究所 助教授 高橋 保

招待特別講演者

E. Negishi (Purdue Univ., U.S.A.)

D.M.P. Mingos (Imperial College, UK)

W.J. Evans (Univ. of California, Irvine, U.S.A.)

T.J. Marks (Northwestern Univ., U.S.A.)

S. Gambarotta (Univ. of Ottawa, Canada)

J.H. Teuben (Univ. Groningen, the Netherlands)

G. Erker (Wilhelms Univ., Germany)

R.F. Jordan (Iowa Univ., U.S.A.)

T.D. Tilley (Univ. of California, Berkeley, U.S.A.)

招待外国人講演者

P. Comba (Univ. Heidelberg, Germany)

U. Rosenthal (Max-Planck-Gesellschaft, Germany)

W. Linert (Tech. Univ. Wien, Austria)

T. Rappert (Waseda Univ.)

T.P. Fehlner (Notre Dame Univ., U.S.A.)

K. Kumar (Bristol-Myers Squibb Pharm.Inst., U.S.A.)

J.T. Chen (National Taiwan Univ., Taiwan)

S. Perlepes (Univ of Patras, Greece)

X.-Z. You (Nanjing Univ., China)

特別参加外国人研究発表者

S. Knyazhanski (Moscow State Univ., Russia)

S. Troyanov (Moscow State Univ., Russia)

Z. Hou (Riken)

T. Daniel (IMS)

R. Hahn (IMS)

その他外国人参加者 7名

企業13社から20名のオブザーバーが参加

1. 本コンファレンスの趣旨

電子欠損型遷移金属錯体とは前周期遷移金属錯体、希土類錯体、およびカチオン性錯体を含む一連の錯体群であり、本岡崎コンファレンスでは、これら電子欠損型遷移金属錯体の合成、反応、機能を総合的に討論をおこなった。

10年程前まではこの分野の錯体化学はそれほど大きな発展をしておらず、発表された論文数も後周期遷移金属錯体と比較すると、世界的に見てもそれほど多くはなかった。ところが最近この分野の研究が、盛んになってきており、国際的な学術雑誌J. Am. Chem. Soc. を見ると、例えばジルコニウム錯体に関する論文数はすでにルテニウムやパラジウムなどと肩を並べるところまで伸びてきている。これに対して日本国内ではまだこの分野の研究者数が少なく、日本化学会春季年会でのジルコニウム錯体に関する発表も1-2研究室による10件程度の発表があるに過ぎない。しかしながら、この電子欠損型遷移金属錯体に対する世界的な関心は高まっており、とくにポリオレフィン合成する新しいKaminsky触媒と呼ばれる錯体触媒が実用化されるという最近のニュースは、この分野の研究を益々活性化するのに十分なインパクトをもっている。これまでポリオレフィン化学は高分子化学の分野であったが、このKaminsky触媒の出現は、ポリオレフィンの化学を高分子化学者中心の分野から錯体化学者中心の分野に変えてしまっている。この一年間アメリカ化学会ではカチオン性錯体についての特別シンポジウム（サンフランシスコ）、前周期遷移金属化学の特別シンポジウム（デンバー）を開催している。このような流れは日本にも強く押し寄せて来ている。

内外の諸事情の変化によって最近の岡崎コンファレンスも変革が求められているようである。それは1つにはこれまで国外からの参加者が少なく（多くの場合数名）、十分な国際的な情報交換および交流がなされていない状況が目立ってきたこと。これは予算が限られていることが主な

原因であるが、国内の研究者同志の集会在現在では非常に多く、国内での情報交換が十分に行われていることも海外との情報交換を求める声を大きくしている。このことを踏まえ、本岡崎コンファレンスでは約40名の講演者の半数以上が、外国人研究者であるというコンファレンスを企画した。これにより今後の岡崎コンファレンスのありかたを議論するときに本コンファレンスが参考になればよいと考えている。。

2. プログラム

=August 1=

13:00 Opening Remarks: A. Nakamura (IMS)

13:05 Address by Organizer: K. Tatsumi (Nagoya Univ.)

13:10 (*Chairman K. Tatsumi*)

PL-1 Plenary Lecture

E. Negishi (Purdue Univ., U.S.A.)

"Patterns of Catalytic Reactions of Organometallics containing Zr and Ti"

14:00 (*Chairman Y. Wakatsuki*)

PL-2 Plenary Lecture

D.M.P. Mingos (Imperial College, UK)

"Bonding Problems Associated with the Early Transition Metal in Mononuclear and Cluster Compounds"

14:40 Photograph and Coffee Break

15:10 (*Chairman H. Suzuki*)

PL-3 Plenary Lecture

W.J. Evans (Univ. of California, Irvine, U.S.A.)

"The Utility of Decamethylsamarocene in Developing Main Group Chemistry"

16:00-17:00 (*Chairman S. Gammarotta*)

16:00

O-1 A. Miyashita (Saitama Univ.)

"Preparation and Reactivities of Cationic Group-4 Metal Complexes"

16:15

O-2 H. Suzuki (Tokyo Inst. Tech.)

"Di- and Trinuclear Coordinatively Unsaturated Complexes of Ruthenium"

16:30

O-3 P. Comba (Univ. Heidelberg)

"Modelling of Electronic Effects in Coordination Compounds"

16:45

O-4K. Mikami (Tokyo Inst. Tech.)

"Supramolecular Recognition in Asymmetric Catalysis"

17:00 Panel Discussion (electron-deficient metal complexes, K. Tatsumi)

18:30 Reception

20:30 Poster Session

P-1 E. Negishi (Purdue Univ, U.S.A.)

"Patterns of Catalytic Reactions of Organometallics containing Zr and Ti"

P-2 D.M.P. Mingos (Imperial College, UK)

"Bonding Problems Associated with the Early Transition Metal in Mononuclear and Cluster Compounds"

P-3 W.J. Evans (Univ. of California, Irvine, U.S.A.)

"The Utility of Decamethylsamarocene in Developing Main Group Chemistry"

P-4 A. Miyashita (Saitama Univ)

"Preparation and Reactivities of Cationic Group-4 Metal Complexes"

P-5 H. Suzuki (Tokyo Inst. Tech.)

"Di- and Trinuclear Coordinatively Unsaturated Complexes of Ruthenium"

P-6 P. Comba (Univ. Heidelberg, Germany)

"Modelling of Electronic Effects in Coordination Compounds"

P-7 K. Mikami (Tokyo Inst. Tech.)

"Supramolecular Recognition in Asymmetric Catalysis"

P-8 S. Knyazhanski (Moscow State Univ., Russia)

"Another Approach to the Creation of Metallocene Based Catalysts for Olefin Polymerization"

P-9 S. Troyanov (Moscow State Univ., Russia)

"Structure of Dimeric Cyclopentadienyl Low Valence Titanium Complexes"

P-10 Z. Hou (Riken) and Y. Wakatsuki (Riken)

"Why Does Hexamethylphosphoramide (HMPA) Change the Reactivity of Samarium Diiodide? Isolation and X-ray Structures of

$\text{SmI}_2(\text{HMPA})_4$ and $[\text{Yb}(\text{HMPA})_4(\text{THF})_2]\text{I}_2$ "

P-11 K. Aoyagi (IMS)

"Chemoselective Reaction of Zirconacyclopentene Complexes"

P-12 Y. Nishihara (IMS)

"Syntheses and Structures of Metallaboranes from Paramagnetic Dimers and $\text{BH}_3\text{-THF}$ "

P-13 T. Daniel (IMS)

"Insertion of a Vinylidene Unit into a Ru-O Bond"

P-14 R. Hahn (IMS)

"Modeling the Molybdenum Cofactor in Sulfite Oxidase"

P-15 H. Kawaguchi (Nagoya Univ)

"C-S Bond Cleavage of Niobium and Tantalum Thiolates"

P-16 K. Tatsumi (Nagoya Univ)

"Synthesis of Nearly Homoleptic Vanadium Acetylide Complexes"

P-17 T. Takahashi (IMS)

"Copper Catalyzed Double Allylation Reaction of Zirconacyclopentadienes and Its Application to Eight-five Fused Cyclic Compounds"

21:30 Break

=August 2=

9:00 (*Chairman A. Miyashita*)

PL-4 Plenary Lecture

T. J. Marks (Northwestern Univ., U.S.A.)

"Metal-Ligand Bonding Energetics and the Invention of New f-Element-Centered Catalytic Reactions".

9:40 (*Chairman M. Akita*)

PL-5 Plenary Lecture

S. Gambarotta (Univ. of Ottawa, Canada)

"Dinitrogen Activation. Can We Use It?"

10:30 Coffee Break

11:00 (*Chairman Y. Hanzawa*)

PL-6 Plenary Lecture

J.H. Teuben (Univ. Groningen, the Netherlands)

"Group 3 Metal Activation of C-H and C-X Bonds"

11:40 Lunch

13:00–13:45 (*Chairman T.D. Tilley*)

13:00

O-5 M. Tanaka (National Inst. Materials and Chem. Res.)

"Lanthanide Metal Complex-Catalyzed Hydrosilylation and
Tischenko Reaction of Aldehydes"

13:15

O-6 T. Hirao (Osaka Univ)

"Vanadium-Promoted Redox Reactions"

13:30

O-7 U. Rosenthal (Max-Planck-Gesellschaft, Germany)

"Unusual Reactions of 1,4-Disubstituted 1,3-Butadiynes with Transition Metal Complexes"

13:45–14:30 (*Chairman G. Erker*)

13:45

O-8 Y. Tsuji (Gifu Univ)

"Transition-Metal Catalyzed Silylation with Organodisilanes"

14:00

O-9 W. Linert (Tech. Univ. Wien, Austria)

"Isomerism of Solvatochromic-Complexes"

14:15

O-10 Y. Wakatsuki (Riken)

"Hetero-bimetallic Complexes Based on Cp-Mo or -W"

14:30 Coffee Break

15:00–16:00 (*Chairman T.J. Marks*)

15:00

O-11 M. Akita (Tokyo Inst. Tech.)

"Structure and Reactivity of Dinuclear Complexes with a C₂H_x Bridge (x=0,1)"

15:15

O-12 T. Rappert (Waseda Univ.)

"Cationic Imine- and Amine-coordinated Hydridoruthenium Complexes Relevant to
Reductive Amination"

15:30

O-13 T.P. Fehlner (Notre Dame Univ., U.S.A.)

"A Synthetic Strategy for Electron Deficient Metallaboranes"

15:45

O-14 Y. Ishii (Tokyo Univ.)

"Pd-Co Catalyzed Carbonylation of Iodoarene with Triethylsilane"

16:00 - 16:45 (*Chairman U. Rosenthal*)

16:00

O-14 K. Kumar (Bristol-Myers Squibb Pharm.Inst., U.S.A.)

"New Macrocyclic Polyamino Carboxylate Complexes of Gd(III) as Hepatobiliary Magnetic Resonance Imaging (MRI) Contrast Agents"

16:15

O-15 K. Takai (Okayama, Univ)

"Insertion of Unsaturated Bonds into Tantalum-Alkyne Complexes"

16:30

O-16 J.T. Chen (National Taiwan Univ., Taiwan)

"New Chemistry of Organoplatinum Toward Nucleophiles"

16:45 Panel discussion (reactions and catalytic implication, T. Takahashi)

18:15 Dinner

20:30 Poster Session

P-18 T. J. Marks (Northwestern Univ., U.S.A.)

"Metal-Ligand Bonding Energetics and the Invention of New f-Element-Centered Catalytic Reactions".

P-19 S. Gambarotta (Univ. of Ottawa, Canada)

"Dinitrogen Activation versus M-M bond formation in the Chemistry of V(II) Amidinates"

P-20 J.H. Teuben (Univ. Groningen, the Netherlands)

"Group 3 Metal Activation of C-H and C-X Bonds"

P-21 M. Tanaka (National Inst. Materials and Chem. Res.)

"Lanthanide Metal Complex-Catalyzed Hydrosilylation and Tischenko Reaction of Aldehydes"

P-22 T. Hirao (Osaka Univ)

"Vanadium-Promoted Redox Reactions"

P-23 U. Rosenthal (Max-Planck-Gesellschaft, Germany)

"Unusual Reactions of 1,4-Disubstituted 1,3-Butadiynes with Transition Metal Complexes"

P-24 Y. Tsuji (Gifu Univ)

"Transition-Metal Catalyzed Silylation with Organodisilanes"

P-25 W. Linert (Tech. Univ. Wien, Austria)

"Isomerism of Polynuclear Copper-Complexes"

P-26 Y. Wakatsuki (Riken)

"Hetero-bimetallic Complexes Based on Cp-Mo or -W"

P-27 M. Akita (Tokyo Inst. Tech.)

"Structure and Reactivity of Dinuclear Complexes with a C₂H_x Bridge (x=0,1)"

P-28 T. Rappert (Waseda Univ.)

"Cationic Imine- and Amine-coordinated Hydridoruthenium Complexes Relevant to Reductive Amination"

P-29 T.P. Fehlner (Notre Dame Univ., U.S.A.)

"A Synthetic Strategy for Electron Deficient Metallaboranes"

P-30 Y. Ishii (Tokyo Univ.)

"Pd-Co Catalyzed Carbonylation of Iodoarene with Triethylsilane"

P-31 K. Kumar (Bristol-Myers Squibb Pharm. Inst., U.S.A.)

"New Macrocyclic Polyamino Carboxylate Complexes of Gd(III) as Hepatobiliary Magnetic Resonance Imaging (MRI) Contrast Agents"

P-32 K. Takai (Okayama, Univ.)

"Insertion of Unsaturated Bonds into Tantalum-Alkyne Complexes"

P-33 J.T. Chen (National Taiwan Univ., Taiwan)

"New Chemistry of Organoplatinum Toward Nucleophiles"

21:30 Break

=August 3=

9:00 (*Chairman E. Negishi*)

PL-7 Plenary Lecture

G. Erker (Wilhelms Univ., Germany)

"Developing Metallocene Systems for Catalytic Carbon-Carbon-Coupling"

9:50 (*Chairman T. Takahashi*)

PL-8 Plenary Lecture

R. F. Jordan (Iowa Univ., U.S.A.)

"Design and Application of Selective Organometallic Reagents and Catalysts"

10:40 Coffee Break

11:00 (*Chairman H. Tobita*)

PL-9 Plenary Lecture

T. D. Tilley (Univ. of California, Berkeley)

"Dehydrocoupling Reaction Mediated by Lanthanide and Early Transition Metal Complexes"

11:50 Lunch

13:30–14:15 (*Chairman R.F. Jordan*)

13:30

O-17 Y. Hanzawa (Tokyo Pharm. Univ.)

"Zirconium-Mediated Ring Contraction Reaction"

13:45

O-18 S. Perlepes (Univ. of Patras, Greece)

"Preparation, Structural and Physical Studies of Dinuclear Lanthanide(III) Complexes Containing the $[\text{Ln}_2(\eta^1:\eta^1:\mu_2\text{-RCO}_2)_2(\eta^2:\eta^1:\mu_2\text{-RCO}_2)_2]^{2+}$ Core"

14:00

O-19 H. Tobita (Tohoku Univ)

"Synthesis and Properties of Cationic Germylene and Germylyne Complexes of Iron"

14:15–14:45 (*Chairman W.J. Evans*)

14:15

O-20 X.-Z. You (Nanjing Univ., China)

"Synthesis and Structure of Some Polyoxomolybdate"

14:30

O-21 Y. Nishiyama (Kansai Univ)

"Zirconocene and Hafnocene Complexes as Efficient Catalysts for Transcyanation and Transhydrogenation to Carbonyl Compounds"

14:45 Poster Session

P-34 G. Erker (Wilhelms Univ., Germany)

"Developing Metallocene Systems for Catalytic Carbon-Carbon-Coupling"

P-35 R. F. Jordan (Iowa Univ., U.S.A.)

"Design and Application of Selective Organometallic Reagents and Catalysts"

P-36 T. D. Tilley (Univ. of California, Berkeley, U.S.A.)

"Dehydrocoupling Reaction Mediated by Lanthanide and Early Transition Metal Complexes"

P-37 Y. Hanzawa (Tokyo Pharm. Univ.)

"Zirconium-Mediated Ring Contraction Reaction"

P-38 S. Perlepes (Univ of Patras, Greece)

"Preparation, Structural and Physical Studies of Dinuclear Lanthanide(III)

Complexes Containing the $[\text{Ln}_2(\eta^1: \eta^1: \mu_2\text{-RCO}_2)_2(\eta^2: \eta^1: \mu_2\text{-RCO}_2)_2]^{2+}$ Core"

P-39 H. Tobita (Tohoku Univ.)

"Synthesis and Properties of Cationic Germylene and Germylene Complexes of Iron"

P-40 X.-Z. You (Nanjing Univ., China)

"Synthesis and Structure of Some Polyoxomolybdate"

P-41 Y. Nishiyama (Kansai Univ.)

"Zirconocene and Hafnocene Complexes as Efficient Catalysts for Transcyanation and Transhydrogenation to Carbonyl Compounds"

16:00 Closing Remarks (T. Takahashi ; IMS)

3. 講演および討論要旨

伊藤所長の代理として中村教授（錯体化学実験施設施設長）が挨拶を行い、今回50回目の岡崎コンファレンスとなったこと、および多くの外国人研究者が参加してくださったことに対する感謝が述べられた。ひき続き、Negishi教授、Mingos教授、Evans教授の3教授の特別講演でコンファレンスが始まった。Negishi教授はZrとAlを用いたカーボメタレーションの化学を解説し、Mingos教授はMicrowaveを用いた化学の展開、Evans教授はSm錯体の合成とその構造について講演を行った。特別講演は2日目にはいるとMarks教授が、ランタノイド錯体を触媒とした水素化やヒドロアミネーション反応について述べ、Gambarotta教授はバナジウムの窒素錯体の合成、Teuben教授がCp*Y錯体を用いたC-HやC-X結合の活性化について講演を行った。3日目にはErker教授がジルコノセン錯体による触媒的な炭素炭素結合生成反応を、Jordan教授がジルコニウムカチオン錯体の新しい合成法とオレフィン重合への応用について述べた。Tilley教授はラン

タノイドや前周期遷移金属錯体を用いたシラン類のカップリングによるポリシランの合成について講演を行った。これら9件の特別講演を含め、30件の講演を3日間で行い、41件のポスター発表を夜8時半から行った。主として前周期遷移金属錯体、希土類錯体、およびカチオン性錯体を含む一連の錯体群による(i) Kaminsky 触媒 (ii) メタセシス反応 (iii) 触媒的不斉反応場の構築 (iv) 反応活性と構造相関 (v) 特異な電子状態をもつ錯体 (vi) 選択的炭素炭素結合生成反応を中心に多くの講演が行われ、それに対する活発な討論がなされた。これらの研究分野は社会に与える影響が大きく、特に多くの企業の研究者がオブザーバーとして参加していることがこのことを物語っている。

今回のコンファレンスの大きな特徴は外国人研究者の参加が多いことである。30件の講演の内、半数以上の17件が外国人研究者の講演であり、ポスター発表やその他の参加を含めると30名の外国人研究者がこのコンファレンスに参加していただいた。研究分野が近いこともあって参加者にながりの緊張感が見られ、真剣な討論が行われた。特別講演者をはじめ、講演者全員に、講演した内容と同じ内容でポスター発表をその日の夜に行ってもらい、参加者の個々の質問に答えていただくというシステムを取った。これは参加者にながりの好評であった。講演時の質問時間が限られていること、特別講演者などに細かい質問がしにくいのが普通であるが、このようにポスター発表形式を取ることによって、昼間の講演内容を改めてチェックできる上に、十分な質問時間が確保出来たことがよかったと思われる。

1日目と2日目にそれぞれ夕方1時間ずつパネルディスカッションを試みた。1日目はランタノイド錯体の特徴と問題点について、また2日目はジルコニウム錯体の化学について3名の特別講演者に論文などに出てこない研究上の出来事などについて述べていただいた。

今回は電子欠損型遷移金属錯体の機能という1つの狭い範囲の分野に多くの研究者を集中させたことで活発な討論が出来たことは言うまでもなく、非常に多くの一線の外国人研究者が参加してくれたため、質問などが一部に偏らなかったことが注目に値した。予算の関係から今後の岡崎コンファレンスでは参加者の半数を外国人研究者にすることは非常に難しいと考えられるが、今回の第50回岡崎コンファレンスは、分子研においてこの種のシンポジウムをどのように主催して行くべきかについて、ひとつの参考となる情報を与えた点において評価できると考えている。

第51回岡崎コンファレンス

表面における光誘起過程のダイナミックス

(Dynamics of Photo-induced processes at surfaces)

開催日 平成6年10月5日～7日

提案代表者 東京大学 教授 村田 好 正

提案者 分子科学研究所 助教授 松 本 吉 泰

招待外国人講演者

Dr. E. Hasselbrink Fritz-Harber-Institute der Max-Planck-Gesellschaft

Prof. H.-J. Freund Ruhr-Universität Bochum

Dr. J. William Gadzuk National Institute of Standards and Technology

Dr. Richard R. Cavanagh National Institute of Standards and Technology

Dr. Dwight R. Jennison Sandia National Laboratories

1. 本コンファレンスの趣旨

固体表面吸着種の光誘起過程が光触媒反応やマイクロデバイス等の応用分野において極めて重要な役割を果たしていることは良く知られているが、これを分子論的なレベルで解明し理解しようという試みが始められたの比較的新しい。表面吸着種の光誘起過程には吸着種状態間の遷移、表面からの脱離、吸着種内の化学結合の切断、更に励起種や光解離によって生成された活性種と表面構成原子、あるいは、共吸着種との反応など、多彩な過程が含まれる。これらの初期過程のメカニズムは孤立系での光誘起過程に比べてはるかに複雑で、吸着種の電子状態の直接励起のみならず、表面電子状態の励起とそれに伴う電子や空孔の移動等を考慮しなければならない。また、これらの過程の動的様相の詳細を知ることは表面過程における吸着種と表面との相互作用をこれまでの表面科学とは全く異なった視点から考察することになり、これを通したエネルギー散逸過程を理解するためにきわめて有用である。このような光誘起過程のメカニズムとダイナミクスについての国内外におけるこの数年の間の進展には目をみはるものがある。

本コンファレンスでは国内外の第一線に立つ研究者が集い、多彩な光誘起過程の中でも特に固体表面との相互作用が強い状況下での光脱離や光化学反応のダイナミクスに焦点をあてた議論の場を設け、問題点を明らかにすると共に分子科学におけるこの分野の今後の発展を考える場とすることを目的とした。

2. プログラム

The 51st Okazaki Conference on "Dynamics of Photo-Induced Processes at Surfaces"

October 5-7, 1994 at Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan
Room 301 Office Bldg.

Chair: Yoshitada Murata, The University of Tokyo, Institute for Solid State Physics

Co-Chair: Yoshiyasu Matsumoto, Institute for Molecular Science

October 5 (Wednesday)

9:00-9:10 Opening Remarks: Mitsuo Ito, Director-General,
Institute for Molecular Science

9:10-10:10 "Photo-Induced, Hot-Electron Resonance Processes at Surfaces: Theoretical Issues"
J. William Gadzuk
National Institute of Standards and Technology

10:10-10:30 **Coffee Break**

10:30-11:20 "Lifetime of the Intermediate Excited State in Laser-Induced Desorption of NO
from Pt Surfaces"
Yoshitada Murata
The University of Tokyo, Institute for Solid State Physics

11:20-12:10 "A Model Calculation for Photo-Stimulated Desorption of Molecules Adsorbed on
Metal Surfaces"
Hideaki Kasai
Osaka University

12:10-14:00 **Lunch**

14:00-14:50 "Electronic Excited State of NO Adsorbed on Cu(111): A Two-Photon Photoemis-
sion Study"
Toshiaki Munakata
RIKEN, Institute of Physical and Chemical Research

14:50-15:50 "Chemisorbed Molecule Ground- and Excited-State Potential-Energy Surfaces for

Laser- and Electron-Stimulated Processes"

Dwight R. Jennison

Sandia National Laboratories

16:30-17:30 "State and Spatially Resolved Studies of UV-Laser Induced Desorption of Molecules from Oxide Surfaces"

H.- J. Freund

Ruhr-Universität Bochum

17:30-18:10 "Photo-Induced Desorption from Chlorinated Silicon(111) Surfaces"

Fumio Komori

The University of Tokyo, Institute for Solid State Physics

October 6 (Thursday)

9:00-9:50 "Photo-Induced Surface Processes in Semiconductor: Atomic Layer Manipulation"

Yoshinobu Aoyagi

RIKEN, Institute of Physical and Chemical Research

9:50-10:30 **Coffee Break**

10:30-11:20 "Laser-Induced Bond Breaking on Defects at Semiconductor Surfaces"

Yasuo Nakai

Nagoya University

11:20-12:00 "Site Specific Fragmentation of Polymer Thin Films by Core Electron Excitation"

Kenichiro Tanaka

National Laboratory for High Energy Physics

12:00-14:00 **Lunch**

14:00-15:00 "Excitation Mechanism and Pathways in Surface Photochemistry"

E. Hasselbrink

Fritz-Harber-Institute der Max-Planck-Gesellschaft

15:00-15:30 **Coffee Break**

15:30-16:20 "Photo-Induced Processes of NO and CO on Pt(111): Desorption and Dissociation"

Katsuyuki Fukutani

The University of Tokyo, Institute for Solid State Physics

16:20-17:20 "Adsorbed-State Specific Photodissociation Dynamics on Semiconductor Surfaces"

Yoshiyasu Matsumoto

Institute for Molecular Science

18:00— **Conference Dinner**

October 7 (Friday)

9:00-9:40 “Nonlinear Optics of Semiconductor Surfaces”

Chikashi Yamada

Optoelectronics Technology Research Laboratory

9:40-10:00 **Coffee Break**

10:00-10:50 “Vibrational Lifetime of H-bonded OH on Zeolite Surface”

Chiaki Hirose

Tokyo Institute of Technology

10:50-11:50 “Ultrafast Measurements of Energy Transfer at Surfaces: Pathways and Time scale”

Richard R. Cavanagh

National Institute of Standards and Technology

3. 講演および討論要旨

第1日

主に金属・半導体表面における光脱離を中心とした光誘起過程の研究について理論・実験の両面からの講演がなされ、これに関連した討論がなされた。まず最初にGadzukが光誘起過程のダイナミックスを理論的な面から論じた。特に、表面の光吸収に伴って生成される“ホット電子”によって引き起こされる光誘起過程に焦点が絞られた。これはこのコンファレンスにおける大きなトピックの一つであり、後続する関連した講演のよい導入部となった。村田はPt(111)およびPt(001)から紫外光照射によって脱離してくるNOの回転状態分布の測定結果から励起状態寿命を10fs前後と推定した。笠井は同様な光脱離過程に関する理論的な考察を具体的な例としてはNO/Cu(111)を挙げて行った。宗像は同じ系にナノ秒の可変波長レーザーを用いた2光子光電子分光を適用し、NOの電子励起状態が2種類あること、また、それらのフェルミ準位からの位置を推定した。Jennisonは大規模な非経験的分子軌道計算をもとにしてPd(111)に化学吸着したNOやNH₃の位置エネルギー面の計算を行い、吸着構造と実験結果の比較、ならびに、光及び電子刺激脱離のダイナミックスについての詳しい議論を行った。Freundはニッケルやクロムの酸化表面におけるNO、および、COの光刺激脱離において共鳴イオン化と二次元イメージングの技術を用いた。

用いることによって各内部状態毎に脱離分子の空間分布を測定した結果を報告した。最後に小森は塩素が吸着したSi(111)表面に光を照射したときに起きる表面構造の変化を走査型トンネル顕微鏡を用いて観察すると共に脱離種を質量分析法で同定し、光刺激脱離とそれによる表面構造変化との関係を論じた。

第2日

青柳は半導体表面における光誘起プロセッシングとして原子層を制御したエピタキシーについて述べた。具体的な例としてはGaCl₃を用いたGaAs表面での原子層制御を挙げ、そのメカニズムを議論した。中井は共鳴イオン化法を用い、半導体表面における欠陥サイトからの原子の光刺激脱離について述べた。田中はポリメチルメタアクリレートなどの高分子の薄膜における軟X線照射によって起こされるイオン脱離過程の実験結果を紹介し、内殻電子励起と化学結合の切断との関係を議論した。後半は、再び金属・半導体表面における吸着種の光解離を含む光誘起過程のダイナミクスについての集中的な討論を行った。HasselbrinkはPd(111)表面上の酸素分子の脱離・解離について述べ、電子損失分光の結果から光誘起過程に関与する電子状態を推定した。また、GaAs(100)上のアンモニアの脱離における異常に大きい同位体効果を紹介し、これに関する理論的考察を行った。福谷はPt(111)上でのNOおよびCOの光化学について反射赤外分光と共鳴イオン化法を用いた実験結果を紹介し、そのメカニズムと吸着状態の依存性について議論した。松本はSi(100)表面上に吸着したN₂Oの光解離過程において、その解離片であるN₂の並進エネルギー・空間分布が吸着状態や構造によって大きく異なることを紹介し、波長依存性の結果をもとにその励起メカニズムについて考察した。また、Pt(111)上に弱く吸着したメタンが193nmの光によって解離するという実験結果について議論した。

第3日

主に、短パルスレーザーを用いた非線形分光の表面科学への応用と振動励起状態のエネルギー緩和についての議論を行った。山田はGaAs表面における第二高調波発生(SHG)について詳しい議論を行い、SHG信号における表面とバルクからの寄与の分離について述べ、また、この分光法のMBE成長過程への応用について議論した。広瀬はゼオライト表面における水酸基の振動緩和を赤外レーザーパルスによるポンプ・プローブ法により調べた。特に、水酸基が稀ガスやCO、C₂H₂と相互作用する場合の振動励起状態の寿命が大きく変化することを示し、そのメカニズムを議論した。CavanaghはCO/Cu(100)において可視・赤外の短パルスレーザー(1ps)を用いたポンプ・プローブ法により、ホット電子による共鳴散乱によって誘起されるCOの振動励起状態の緩和過程を観測し、最近観測された短パルスレーザーによる極めて非線形な脱離過程との関連について議論した。

3日間のコンファレンスを通して、極めて活発な議論が行われたことは特筆に値する。これは、

この分野がこの数年間に大きく進歩したまだかなり若い分野であること、また、コンファレンスの主題を散漫なものとせず、かなり絞りこんだことが大いに功を奏したと考えられる。本コンファレンスの参加者は、吸着種の電子励起状態やそれにいたる過程、また、その後の原子核のダイナミックスなど解明すべき重要な問題点がこの分野にたくさん残されていることを痛感したことと思われる。国内外の研究者が更に密接な協力関係のもとでこの分野の発展に取り組んでいくための共通の場がこの活発な討論を通して芽生えたのが、本コンファレンスの大きな成果であり、この意味で極めて有意義な会議であった。

平成6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
六 車 千 鶴	Theoretical Studies on Solvent Effect in Chemical Reaction	理 学	H6. 9.20

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
吉 川 博 志	Dynamics of surface reactions of Si (III) with chlorine molecules	理 学	H6. 9.20
實 方 真 臣	Studies on Microscopic Solvation Dynamics for Clusters Containing Metal Atoms/Ions	理 学	H6. 9.20
房 少 立	Nonlinear Optical Properties of Phthalocyanine Thin Films Grown by the Molecular-Beam-Epitaxy Method	理 学	H6. 9.20

総合研究大学院大学平成6年度（10月入学）新入生紹介

専 攻	氏 名	所 属	研 究 テ ー マ
機能分子科学	趙 暁 杰 (研究生, ~8. 3.31)	分 子 動 力 学	共鳴ラマン分光によるDNAポルフィリンの相互作用の研究

研究体験フェローシップ

総合研究大学院大学の教育研究交流センターの事業の一環として、平成6年7月～8月の2カ月間“外国人若手研究者研究体験フェローシップ”が実施され、分子研ではイギリス人若手研究者2名を受け入れた。

このフェローシップは教育の国際化と学術交流を目的として、外国の博士号取得前後の若手研究者を総研大及び基盤機関である大学共同利用機関等で一定期間受け入れ、日本の教育研究機関での研究体験と、わが国の若手研究者との研究交流を行うもの。総研大主催、(財)日本国際教育協会主催、文部省協力で平成5年度からスタートした。

昨年度は分子研と高エネルギー物理学研究所で実施され、平成6年度は7月1日から8月末まで、分子科学研究所、基礎生物学研究所、宇宙科学研究所、国立天文台、国立遺伝学研究所、埼玉大学(経済)で実施された。受け入れた研究者は米、英、独各3名で女性3名を含む計9名。7月1日～8日まで日本語講座や芸術文化施設の見学の後、各共同利用機関で実際に研究や研究交流を体験した。

分子科学研究所で受け入れた若手研究者

氏名	所属	専攻分野	指導教官 チューター
John P. Le Quesne	(英) ノッティンガム大学	電子動力学	丸山有成 鈴木厚志
Sandra J. Coulthurst	(英) ヨーク大学	分子動力学	北川禎三 児玉 健

Le Quesneさんは変わった名前の方で(ラケイーンと発音するらしい)、イギリス海峡のフランスよりにあるJersey島(英国領)生れの好青年で、英国ノッティンガム大学のM.R. Willis博士の研究室の学生です。同研究室で以前から研究しているフタロシアニン薄膜のガスセンサーへの応用と関連して、分子研滞在中はいろいろな種類のフタロシアニンの薄膜をせっせと作製して、その構造をX線や電子顕微鏡を用いて評価すること、あるいは可視紫外の吸収スペクトルを測定することを行っていました。実験の手助けは総研大生の房少立君に、又生活面では同じく鈴木厚志君に負う所が多かったようです。週末には京都や高山などへ旅行して日本の生活を楽しんでたようです。

Coulthurstさんはヨーク大学のR.E. Hester教授のもとで「ビリルビンの共鳴ラマン分光の研究」を学位論文のテーマとして、平成7年6月に学位取得を目指す、女子院生。分子研ではピコ秒の時間分解共鳴ラマン散乱の測定が主たる目的。偶然にもちょうどこの時期に北アイルランドのベルファスト大学S. Bell博士がピコ秒時間分解ラマン散乱の実験のため来所していたので、彼に実験指導を受けた。岡崎での生活はチューターの児玉健君のおかげで相当楽しくすごした様子であった。チューターの方の親切や研究室の方々に助けられたことなど印象深い、との感想が寄せられました。

研究会報告〈プログラムを掲載〉

「高圧科学による分子性物性の創成」

提案者：城谷一民（室蘭工大）

1994年6月3日（金）

- 1：30－1：40 井口洋夫 分子科学研究所
あいさつ
- 1：40－1：50 城谷一民 室蘭工業大学工学部
研究会開催の趣旨
- 1：50－2：10 竹村謙一 総理府科学技術庁無機材料研究所
ダイヤモンドセルとレーザー加熱による超高圧合成実験
- 2：10－2：30 青木勝敏 通商産業省工業技術院物質工学工業技術研究所（物質研）
高圧下の分子重合反応
- 2：30－2：50 薬師久弥 分子科学研究所
高圧重合法によるフタロシアニンポリマー合成の試み
- 2：50－3：10 下村 理 高エネルギー物理学研究所放射光
放射光を用いた高圧下の構造研究の現状
- 3：30－3：50 藤井保彦 東京大学物性研究所
固体ハロゲンの圧力誘起金属化と分子解離
- 3：50－4：10 八木健彦 東京大学物性研究所超高圧
黒鉛の圧力誘起相転移
- 4：10－4：30 川村春樹 姫路工業大学理学部
高圧下における分子性物質の構造
- 4：30－4：50 小野寺健史 大阪大学基礎工学部物性物理
分子性結晶と超高圧－期待・失望・希望－
- 4：50－5：10 毛利信男 東京大学物性研究所
低温、超高圧発生技術の現状
- 5：10－5：30 榎 敏明 東京工業大学理学部化学
SQUID磁束計を用いた高圧磁化率測定
- 5：30－5：50 高橋利宏 学習院大学理学部
高圧下における分子性導体： $^1\text{H-NMR}$

1994年6月4日(土)

9:00-9:20 村田恵三 電子技術総合研究所

1kbar以下の高圧制御と有機物物性測定

9:20-9:40 Y. A. Berlin 分子科学研究所

High pressure effect on photoconductivity of solid phthalocyanine.

9:40-10:00 松崎 晋 熊本大学理学部化学科

高圧下における電荷移動錯体結晶の電導性

10:00-10:20 小島憲道 東京大学教養学部

超高圧下におけるペロブスカイト型混合原子価錯体

$\text{Cs}_2\text{Au}_2\text{X}_6$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) の原子価転移と相図

10:40-11:00 浜谷 望 お茶の水女子大学理学部

高圧力下での結晶構造精密化の可能性

11:00-11:20 清水宏晏 岐阜大学工学部電子情報工学科

超高圧ブリルアン散乱による単純分子結晶の軸方位、音速、屈折率、弾性定数のその場決定

11:20-11:40 松下信之 東京大学教養学部化学教室

一次元混合原子価白金錯体の高圧光吸収とラマン散乱

11:40-12:00 谷口吉弘 立命館大学理工学部化学科

高圧力下における分子構造変化

12:00-12:05 城谷一民 室蘭工業大学工学部

閉会の辞

『若手分子科学研究者のための物理化学研究会』

提案者：長野八久（阪大理）

1994年6月15日（水）

- 13：00～13：05 開会の辞 加藤立久（分子研）
- 13：05～13：30 講演 「化学反応の立体動力学」 梶本興亜（京大・理）
- 13：30～13：55 講演 「量子カオスと原子・分子」 足立聡（東工大・理）
- 13：55～14：20 講演 「軌道放射光分子科学」
－光イオン化と光解離－ 見附孝一郎（分子研）
- 14：20～14：50 討論
- 14：50～15：15 講演 「高分子物理学とその周辺」
－モデル化と数値計算法－ 川勝年洋（九大・理）
- 15：15～15：40 講演 「真空紫外領域のレーザー分光」 築山光一（理研）
- 15：40～16：05 講演 「固体表面と振動分光」 大澤雅俊（東北大・工）
- 16：05～16：35 討論
- 16：35～16：40 閉会の辞 長野八久（阪大・理）

研究会参加者名簿

長野 八久	大阪大学	理学部	助手（提案代表者）
加藤 立久	分子研		助教授（所内対応者）
梶本 興亜	京都大学	理学部	教授
足立 聡	東京工業大学	理学部	助手
見附孝一郎	分子研		助教授
川勝 年洋	九州大学	理学部	助手
築山 光一	理化学研究所		研究員
大澤 雅俊	東北大学	工学部	助教授
牧田 寛	大阪大学	工学部	大学院学生
小橋 和久	東京工業大学	理学部	大学院学生
西澤 潔	神戸大学	理学部	大学院学生
樋山みやび	分子研		大学院学生
道廣 勇司	分子研		大学院学生
児玉 健	分子研		大学院学生
岡本 晃一	京都大学	理学部	大学院学生

太田	薫	京都大学	理学部	大学院学生
竹崎	誠	京都大学	理学部	大学院学生
岡部	一朗	京都大学	工学部	大学院学生
井上	良二	京都大学	工学部	大学院学生
田中	伸明	東京工業大学	理学部	大学院学生
下島	淳彦	早稲田大学	理工学部	大学院学生
山本	雅人	早稲田大学	理工学部	大学院学生

他に、分子研の学生が5名ほどいましたが名簿に記入が有りませんでした。

「有限多電子系の運動様式の統一的理解」

提案者：市村 淳（宇宙研）、中村正人（日大理工）、森田紀夫（分子研）

1994年6月22日(水) [座長、金子邦彦]

13:00-13:20 事務連絡

13:20-13:45 世話人 研究会のテーマと背景

13:45-15:25 坂田文彦（東大・核研） 時間依存平均場理論と集団運動の発生・成長転化・死滅

15:45-17:00 加藤太治（電通大） 二電子励起状態と二重イオン化における電子相関

17:30-19:30 懇談会

6月23日(木) [座長、午前：青柳 睦、午後：見附孝一郎]

19:00-10:40 中村宏樹（分子研） 原子・分子の二電子励起状態における集団回転と電子相関

山本知幸（東大・教養） ヘリウム原子の古典論と半古典論

11:00-12:15 斉藤 晋（東工大・理） アルカリ金属族クラスターおよびfullerene における電子系の個別励起と集団励起

13:45-15:00 矢花一浩（新潟大・理） クラスターの巨大共鳴と電子・格子結合
市村 淳（宇宙研） 原子の巨大共鳴

15:20-17:00 高柳和雄（電機大・理工） 金属クラスターおよびバルク金属における電子間有効相互作用

江藤幹雄（慶大・理工） 0次元少数電子系における多体効果

6月24日(金) [座長、午前：市川行和、午後：足立 聡]

9:00-10:15 山田一博（核融合研） 多価イオン-原子衝突における多電子移行機構
山口知子（都立高専） 多価イオン-原子衝突における二電子移行機構
：電子相関の効果

10:35-12:15 山崎泰則（東大・教養） 多価イオン-固体表面衝突における中空原子生成

	小池文博（北里大・医）	原子からの多電子放出過程
13：45－15：00	中村正人（日大・理工）	有限多電子系の殻効果と超殻効果
	交久瀬五男（阪大・理）	金属クラスターのスーパーシェル（実験）
15：00－16：00	総合討論	

「直線偏光・円偏光放射光を用いた分子科学研究とその周辺」

提案者：太田俊明（東大理）

1994年11月2日(水)

- 13:00-13:40 受付、coffee
- 13:40-13:50 太田俊明（東大理）挨拶
- 13:50-14:40 木下豊彦（分子研）偏光放射光を利用した光電子分光
- 14:40-15:10 鎌田雅夫（分子研）UVSOR円偏光ビームライン
- 15:10-15:40 圓山 裕（岡大理）Fe酸化物フェリ磁性体のFe K-吸収端X線磁気円二色性
- 15:40-16:10 coffee break
- 16:10-17:00 大柳宏之（電総研）X線吸収分光と分子科学—第3世代光源の可能性—
- 17:00-17:05 城 健男（広大理）VUVからX線領域磁気円二色性の理論の現状

11月3日(木)

- 8:00-9:00 breakfast
- 9:00-9:30 宮原恒あき（高工研）異なる内殻励起によるMCDの比較
- 9:30-10:00 藤森 淳（東大理）MCDで見た近藤効果
- 10:00-11:00 横山利彦（東大理）直線偏光・円偏光軟X線吸収分光の表面科学への応用
- 11:00-11:30 上田 潔（東北大科研）光電子-蛍光コインシデンス実験
- 11:30-11:50 小杉信博（分子研）UVSORの現状と将来
- 12:00-13:30 lunch, UVSOR見学、coffee
- 13:30-14:00 関 一彦（名大理）ラビング法によるポリ（テトラフルオロエチレン）（テフロン）配向膜の作成とその偏光軟X線吸収・真空紫外吸収
- 14:00-14:30 大内幸雄（名大理）XANESを用いたポリイミド薄膜の表面構造評価
- 14:30-15:00 田中健一郎（高工研）内殻励起表面光化学反応
- 15:00-15:30 宇理須恒雄（分子研）分子配向を制御した吸着層での放射光励起光化学反応
- 15:30-15:45 太田俊明（東大理）まとめ

「酸素結合蛋白質の精密構造機能研究の新展開をめざして」

提案者：今井清博（阪大医）

12月5日(月)午後（12：55～18：00） 【口頭発表】

0. 12：55 あいさつ

1. 13：00 ○城 宜嗣、飯塚哲太郎（理研）

「ヘムタンパク質の配位子結合反応におけるいくつかの問題」

2. 13：30 根矢三郎（京都薬大）

「ヘム蛋白質反応場の動力学と機能評価」

3. 14：00 山本泰彦（筑波大・化学系）

「NMRによるミオグロビンの超微細構造解析」

4. 14：30 ○M. Ikeda-Saito, J. S. Olson*, G. N. La Mar**, S. G. Sligar*** &
A. J. Wilkinson****

(Case Western Reserve Univ., *Rice Univ., **Univ. of Calif., Davis, **
*Univ. of Illinois & ****Univ. of York)

“Effect of distal pocket mutations on the reactivity, electronic structure, and
stability of Mb”

5. 15：00 ○P. Jewsbury, T. Kitagawa*（蛋工研、*分子研）

“Haem pocket control of the binding site in MbCO- the role of the proximal re-
sidue?”

6. 16：00 若杉桂輔、稲葉謙次、石森浩一郎、○森島 績（京大・工）

「モジュール置換によるキメラグロビンの合成と特性解析」

7. 16：30 千葉 薫、猪飼 篤、小西康子*、○木原 裕**（東工大・生命理工、*北里
大・医、**自治医大）

「ミオグロビン・フォールディングに果たすヘムの役割」

8. 17：00 妹尾康喜（名大・理）

「ヘモグロビンの機能についての立体構造エネルギー計算の現状」

9. 17：30 柏木 浩（九工大・情報工学）

「タンパク質の全電子計算の試みー電子移動のメカニズム解明のためにー」

12月5日(月)夜(19:00~21:00) 【ポスター発表】

- P 1. ○北山和子、小林道頼、牧野誠夫* (新潟大・理、*筑波大・基礎医学系)
「カプトガニのヘモシアニンの酸素運搬効率」
- P 2. 植野洋志 (京大・農)
「クロライドイオンとヘモグロビン」
- P 3. 柴山修哉 (自治医大・物理)
「多孔性ガラスによるヘモグロビンの高次構造固定とその応用」
- P 4. 雲財 悟、柴山修哉*、○森本英樹 (阪大・基礎工、*自治医大・物理)
「金属置換混成ヘモグロビン」
- P 5. ○A. Tsuneshige, Y. Zhou & T. Yonetani (Dept. of Biochem. and Biophys., Univ. of Pennsylvania)
“A simple kinetic method reveals differences in quaternary structure among oxylike and intermediately-ligated Hbs”
- P 6. ○紙中庄司、北川禎三* (久留米大・医、*分子研)
「時間分解紫外共鳴ラマン法による光解離COHb Aの4次構造遷移の研究」
- P 7. ○河野美由紀、宮崎源太郎*、中村春木**、志賀 健、今井清博 (阪大・医、*阪大・基礎工、**蛋工研)
「蛋白質工学によるヘモグロビン機能の改変：Lys-66 β 置換による酸素親和性の制御」
- P 8. ○八巻真理子、松原景子、永山国昭、後藤寿夫*、蝦名 恵 (新技術事業団・永山たん白集積プロジェクト、*徳島大・総合科学)
「環形動物巨大ヘモグロビンの分子機構—その形態とリンカー鎖の特定—」
- P 9. 若杉桂輔、○石森浩一郎、森島 績 (京大・工)
「Mb, Hb鎖間でのモジュール置換キメラグロビンの特性」
- P10. ○内田 毅、海野雅司、石森浩一郎、森島 績 (京大・工)
「S-S結合を導入したミオグロビンの配位子結合反応」
- P11. ○深海—小林 薫、水谷正輝、郷 通子 (名大・理)
「グロビン遺伝子のイントロンの進化的起源」
- P12. ○田村浩二、中村寛夫、飯塚哲太郎、城 宜嗣 (理研)
「根粒菌FixLの構造・機能解析」
- P13. 堀 洋 (阪大・基礎工)
「EPR法でみるヘム蛋白質の活性部位の構造—ヘモグロビンの協同現象—」
- P14. ○島田秀夫、木股洋子、広瀬忠明、石村 巽 (慶応大・医)
「非天然型アミノ酸(O-methylthreonine)の部位特異的導入法を用いたチトクロムP450cam

活性部位アミノ酸残基の機能解析」

- P15. ○小西康子、細見直樹、*根矢三郎、**菅野幸子、*舟崎紀昭、鈴木春男（北里大・理、*京都薬大、**北里大・看護）

「抗N-メチルメソボルフィリン・モノクローナル抗体の触媒活性」

- P16. ○佐藤文俊、重光保博、岡崎 功、八尋秀一、福江昌幸、小鶴慎吾、柏木 浩（九工大・情報工学）

「タンパク質の全電子計算を目指した密度汎関数プログラムの開発」

12月6日(火)午前（9：00～12：00） 【口頭発表】

10. 9：00 森本英樹（阪大・基礎工）

「ヘモグロビンのアロステリック効果の研究は普遍性をもちうるか？」

11. 9：30 今井清博（阪大・医）

「精密酸素平衡曲線のcurve-fitting」

12. 10：00 ○小林道頼、今井清博*（新潟大・理、*阪大・医）

「ヘモグロビンの酸素平衡曲線のS字状カーブと酸素運搬効率」

13. 10：30 ○D. T. -b. Shih, R. T. Jones & M. F. Perutz*（Dept. of Biochem. and Mol. Biol., Oregon Health Sci. Univ. & *MRC Lab. of Mol. Biol.）

“The chloride effect in human hemoglobin: A new kind of allosteric mechanism”

14. 11：00 ○長井雅子、北川禎三*（金沢大・医療技術短大、*分子研）

「紫外共鳴ラマン分光法によるヘモグロビンの四次構造変化の研究」

15. 11：30 ○T. Yonetani, A. Tsuneshige & Y. Zhou（Dept. of Biochem. and Biophys., Univ. of Pennsylvania）

“Allosteric function of mixed metal hybrid hemoglobins”

12月6日(火)午後（13：00～16：00） 【口頭発表】

16. 13：00 後藤寿夫（徳島大・総合科学）

「環形動物細胞外ヘモグロビン巨大化の分子機構ーリンカー鎖のレクチン活性による糖鎖接着ー」

17. 13：30 鈴木知彦（高知大・理）

「無脊椎動物ヘモグロビンの多様性と進化」

18. 14：00 ○郷 通子、高橋健一、由良 敬、深海ー小林 薫（名大・理）

「酸素結合蛋白質のモジュールと機能と進化」

19. 14：30 ○岡崎太郎、佐藤浩之、猪口直美、奥村 敏（日本医大）

「ラットグロビン遺伝子群の構造解析」

20. 15:00 竹中 修 (京大・霊長類研)

「カニクイザルの多重重複した α グロビン遺伝子の役割」

《総合討論》(15:30~16:00)

「化学物理の諸問題とその発展」

提案者：谷村吉隆 (分子研)

1994年12月8日(木)

座長 川勝年洋 (都立大)

13:00-13:10 挨拶、事務連絡

中村宏樹 (分子研)

13:10-14:00 高分子・複雑液体の物理

土井正明 (名大理)

14:00-14:50 電子移動反応の理論

立矢正典 (物質研)

座長 田中秀樹 (京大工)

15:20-16:10 化学反応理論の進展

住 斉 (筑波大物質工)

16:10-17:00 分子配列システムにおける非平衡光化学過程

山崎 巖 (北大合成化)

17:00-19:00 ポスターセッション

19:00- 化学と物理の懇親会

12月9日(金)

座長 足立 聡 (東工大理)

9:00-9:50 溶液中の緩和過程

平田文男 (京大理)

9:50-10:40 溶液のダイナミクスにおける実験と理論の接点

中原 勝 (京大化研)

座長 大峰 巖 (名大理)

11:10-12:00 分子動力学の発展

能勢修一 (慶大理工)

座長 古賀伸明 (名大情報文化)

13:30-14:20 電子構造の理論

萩下 聡 (慶大理工)

14:20-15:10 化学反応理論の諸問題

加藤重樹 (京大理)

座長 高野 宏 (慶大理工)

15:40-16:30 分子物理におけるカオス

池田研介 (立命館理)

16:30-17:10 化学物理と統計力学

鈴木増雄 (東大理)

17:10-19:00 ポスターセッション

12月10日(土)

座長 柴田文明 (お茶大理)

9:00-9:50 化学反応過程における量子モンテカルロ法

高須昌子 (金沢大理)

9:50-10:40 ラマン散乱による水の動的構造

富永靖徳 (お茶大理)

座長 福田礼次郎 (慶大理工)

11:10-12:00 フラストレーションの物理と分子

笹井理生 (名大人情)

座長 有光敏彦 (筑波大理)

13:30-14:20 光で見る緩和現象

木下修一 (阪大理)

14:20-15:10 分子の光過程理論と非平衡統計力学

谷村吉隆 (分子研)

15:10-16:00 総括、今後の方針

北原和夫 (東工大理)

ポスターセッションリスト

12月8日 17:00-19:00 (掲示期間 12月8日午後-9日昼)

森林健悟 (分子研) 軽電子移行化学反応における量子動力学

染田清彦 (分子研) タイトル未定

首藤 啓 (分子研)	
北尾 修 (京大工)	ゼオライトの親水性
石田俊正 (静大教)	超励起状態の関与する反応 (ベニングイオン化) の理論的研究
木野康志 (理研)	ミュオン触媒核融合におけるミュオン原子分子反応の計算
甲賀研一郎 (京大工)	タイトル未定
吉森 明 (名大理)	溶媒和ダイナミックスの非線形の効果
村尾美緒 (お茶大理)	量子強結合系における緩和過程
江崎ひろみ (東大工)	低次元励起子系における形状の効果
井川淳志 (京大理)	Electronic Structure of the Ionic States of m-Phenyl-Carbene Oligomers
時弘哲治 (東大工)	低次元輻射場中の超放射
富田憲一 (分子研)	一次元拡張ハバードモデルにおけるSDW-CDW相転移
高須昌子 (金沢大理)	スピンボゾンモデルの数値計算
岡崎 進 (東工大総理工)	溶媒の調和振動子浴近似における量子系の遷移確率ゆらぎ
藤谷洋平 (予防衛生研)	相同組み換えの頻度の相同部分の長さへの依存性
村上 洋 (阪大理)	複素系の緩和現象ー蛋白質・有機ポリマー
関 和彦 (物質研)	溶媒のゆらぎと誘電緩和
森田明弘 (京大理)	誘電緩和のsnowball modelはMDで検証できるか。
12月9日 17:00-19:00 (掲示期間 12月9日午後-10日午前)	
高田彰二 (分子研)	
北原和夫 (東工大理)	多成分系の非平衡熱力学
田中篤司 (東工大理)	kick系の非断熱遷移 (仮題)
出口哲生 (お茶大理)	On the Probabikity of Random Polygons Being Knotted
山城 敦 (京大理)	Kドープステージ1ポリアセチレンの電子格子状態のクラスタ計算
天能精一郎 (分子研)	タイトル未定
富永圭介 (分子研)	高次非線形分光法による液体のdynamicsの研究
市野善朗 (阪大理)	非品質ー有機色素系の単一サイトスペクトルのmirror symmetry
島田幸洋 (阪大理)	パルス誘導光散乱法による分子の配向緩和の研究
泰岡顕治 (名大工)	気相均一核生成の非平衡分子動力学 (泰岡顕治、松本充弘)
西川武志 (慶大理工)	C76 (D2)結晶構造と相転移の分子動力学法による予測、又は、固体C70 (D5h)の結晶内分子配向の分子動力学法による研究
内山智香子 (山梨大工)	A Prototype of a Non-equilibrium Open System

-A Microscopic Laser Theory-

- 梶谷喜美子 (名大人情) 化学振動から情報処理への展開
—非線形ダイナミクスのおもしろさ—
- 岡田 朗 (名大物) Formulation of Electronic Coupling for Electron Transfer Reactions in the Superexchange Case
- 鄭 誠虎 (京大理) 積分方程式理論による電子移動反応へのアプローチ
- 朱 超原 (分子研) Theory of nonadiabatic transition for general two-state curve crossing problems
- 奥村 剛 (分子研) Inversion Methodによる遍歴電子の強磁性相の研究
- Patric Grisfils (東工大) Statistical Hydrodynamics of Lattice Gas
- V.V.Vasilevskaya (名大人情) To the Theory of DNA Compactization
- 谷村吉隆 (分子研) 多準位量子Fokker-Planck方程式による非断熱遷移過程の研究

国際研究協力事業報告

日英研究協力

日英協力「分子科学」は文部省と英国科学工学研究会議（SERC）の支援により、昭和56年以来、次の5分野について活発に続けられている。：(1) 分子計算化学、(2) 高分解能分光学、(3) 電子構造動力学、(4) 放射光利用化学、(5) 物質化学。

活動内容は情報交換を行ういわゆる「5+5 ミーティング」と具体的共同研究を行うための研究者交流からなっている。平成5年度までに計17回のミーティングが開催され、平成7年度には2件を開催する予定である。日本から若手研究者の派遣（半数以上は所外研究者）は2～3名程度であり、具体的成果が上がっているが、これをもっと充実してゆくことが望まれる。

平成5年6月には本活動の成果が評価され、これを更に継続推進していくことで文部省とSERCが合意し覚書に調印している。本事業に興味のある方は各分野のキーパーソン（(1) 中村宏樹、(2) 斎藤修二、(3) 梶本興亜（京大理）、(4) 宇理須恒雄、(5) 丸山有成）或いは全体の世話役である中村宏樹にお問い合わせください。なお、年度別に事業報告を作成している。

日本インド研究協力

平成5年度から日本学術振興会の「日本－インド学術交流事業」として共同研究テーマ「分子構造、分光及び動力学」を実施することになり、広い意味での分子構造学、分子分光学、化学反応動力学、分子物性論（新物質及び高分子を除く。）に関する理論的及び実験的研究を開始した。その共同研究の内容は、(1) 短期若くは中期の研究者派遣及び受け入れ、(2) 限られた人数（双方数名程度）の小規模な専門家によるセミナーの実施、(3) 共同研究の可能性を検討するための、主として研究責任者（教授、助教授等）による研究現場への相互訪問及び視察等である。

平成5年度は初年度であったので、実際の研究期は短かったが、

研究者派遣 2名

研究者受入れ 2名（うち1名は博士研究員）を実施した。

平成6年度（平成6年12月現在）は

研究者派遣 1名

研究者受入れ 5名（受入先：分子研、名大、都立大、阪大、東大）

この他に、研究推進会議を10月26日バンガロール市内のインド科学大学の

J. ネールセンターにおいてアジア学術セミナー開催中に実施した。日本側の出席者は、

吉原経太郎（分子研教授）、茅幸二（慶応大教授）、梶本興亜（京大教授）、インド側出席者は、C.N.R.Rao (IIS)他 3 名であった。将来の研究方針及び研究会の開催（日本）を決定した。

分子研コロキウム

- 第620回 平成6年10月19日 Twists and Turns in Organic Photochemistry: Picosecond
Transient Raman Studies of Polyene Photoisomerization
(Terry L. Gustafson)
- 第621回 10月26日 金属錯体の経験的力場計算(Empirical Force Field
Calculation of Metal Complexes) (吉川雄三)
- 第622回 11月 8日 The Chemistry of Cyclometallated Tertiary Phosphine
Complexes (M. A. Bennett)
- 第623回 12月 7日 Ultrahigh Peak Power Laser and Applications
(Gerard Mourou)
- 第624回 12月21日 ヘム酵素による酸素活性化の分子機構 (渡辺芳人)
- 第625回 平成7年 1月25日 放射光を利用した固体および表面の光電子分光
(木下豊彦)
- 第626回 2月 8日 Dynamics of the Gas-Surface Reactions:H+Lif(001) and
D+Lif(001) (Laura Smoliar)
- 第627回 2月15日 時間分解ラマン・コヒーレントラマン分光法による溶液光
化学反応の研究 (田原太平)
- 第628回 3月 8日 Kinetic Barriers to Ligand Binding in Myoglobin and
Hemoglobin (John S. Olson)
- 第629回 3月 8日 パラジウム-銅複合錯体を用いるアルケンの触媒的酸化反
応-有機パラジウム化学の錬金術的側面- (細川隆弘)
- 第630回 3月16日 Probing the Electronic Structure of Reactive Intermediates
with Photons (John M. Dyke)

共同研究採択一覧(平成7年度前期)

課題研究

炭素原子クラスター科学の新展開	分子研	丸山 有成
金属酸化物クラスターの合成と触媒機能	分子研	田中 晃二

協力研究

TTF=量体を含む電荷移動錯体の構造と赤外吸収強度の理論的研究

千葉工業大 松澤 秀則

トルエン誘導体のメチル基内部回転運動の解析と電子状態効果の理論的解明

早稲田大理工 藤井 正明

励起分子の構造と動的挙動の関する理論的研究

神戸大理 加藤 肇

凝縮相中の分子協力現象

慶應大理工 高野 宏

Cu₅Liのクラスター計算

北大理 野呂 武司

CO₂、CS₂の理論的研究

東京農業大生物産業 竹下 幸一

不安定イミンの高分解能分光

北大理 江川 徹

肝臓シトクロムP450の反応機構：共鳴ラマンスペクトル解析

東北大反応化学研 清水 透

変異ミオグロビンの共鳴ラマンスペクトル測定による軸配位子効果の検討

慶應大医 江川 毅

ピコ秒時間分解ラマン分光法を用いた光合成モデル系の電子移動に関する研究

大阪大基礎工 中島 聡

酢酸菌由来チトクロム a₁の共鳴ラマン散乱

姫路工大理 鐸木 基成

ダイヤモンドのH₂センターのホールバーニング分光

大阪大基礎工 半沢 弘昌

赤外・ラマン分光法による液晶分子の配向ならびに構造研究

北里大理 片山 詔久

表面-光SHG法を用いた固体-液晶界面相互作用に関する研究

名古屋大理 大内 幸雄

塩素化芳香族分子の光解離ダイナミックス

東京工業大理 市村 禎二郎

分子衝突による回転励起の画像分光

東京都立大理 田沼 肇

気相分子の光化学反応の磁場光効果

三重大工 松崎 章好

メチレン鎖連結系の外部磁場効果と磁気同位体効果

金沢大薬 中垣 良一

金属リン化合物超伝導体の電子物性

室蘭工業大 関根ちひろ

低い転移温度をもつ有機超伝導体の研究

岡山大理 大嶋 孝吉

同位体置換による有機超伝導体のNMR

お茶の水女子大理 河本 充司

一次元ハロゲン架橋Ni錯体の電子構造と伝導性	東北大科学計測研	岡本 博
d- π 型分子システムの開拓	北陸先端大	北川 宏
部位特異的アミノ酸置換による人工ヘム蛋白質の分子設計	京都大工	石森浩一郎
ロジウム三核体の構造と性質	大阪市立大理	西岡 孝訓
複合型一次元金属錯体の合成と構造	姫路工大理	小澤 芳樹
ハロメタンの内殻励起におけるRydberg-valence混合の研究	東北大科学計測研	上田 潔
固体表面の光化学反応における中間体の研究	北大触媒セ	佐藤 真理
非線形ラマン光熱分光法による励起分子ダイナミックスの研究	東京工業大理	鈴木 正
金属原子・水素分子-ファンデアワールス錯体の光分解過程	北陸先端大	梅本 宏信
L-システインおよびその誘導体を含むコバルト(Ⅲ)錯体の光化学反応	岡山大理	小島 正明
遷移金属アルコキンドの合成と性質	東京農工大工	小宮三四郎
6族遷移金属-ケイ素結合をもつ新規有機金属錯体の合成	横浜国立大工	伊藤 卓
遷移金属-リン間共有結合のLewis塩基による切断反応	広島大理	三吉 克彦
金属錯体の光化学	お茶の水女子大理	森 幸恵
有機金属錯体の電子構造	青山学院大理工	星 敏彦
モリブデン三核錯体の磁性	埼玉大理	永澤 明
ルテニウム多核錯体におけるプロトン移動とその小分子活性化への応用	三重大教育	芳賀 正明
金属錯体におけるアトロプ異性現象	静岡大理	宇津野峻司

招へい協力研究

高次非線形分光法による振動の位相緩和の研究：その理論的アプローチ

東北大大理 藤村 勇一

研 究 会

π -d複合電子系分子性固体の設計と新規物性	名大情報文化	山下 正廣
極紫外光プロセスの基礎	豊橋技科大	英 貢
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	広島大理	青木百合子
実験家のための理論分子科学と理論家のための実験分子科学-分子科学研究所20周年記念研究会-	分子研	谷村 吉隆

UVSOR課題研究

赤外分光用施設ビームラインBL6A1の分光装置の高性能化	神戸大理	難波 孝夫
放射光励起光化学反应用高効率分光器の開発	分子研	宇理須恒雄
BL2B2用射入射分光器の開発	分子研	見附孝一郎
スピン偏極光電子分光システムの開発	分子研	鎌田 雅夫

UVSOR協力研究

In-situ合成されたDCNQI-金属化合物の光電子分光	東北大理	田中 章順
真空紫外領域におけるシアン化合物の光解離過程の研究	いわき明星大理	神田 一浩
AuCl ₃ -及びKox-GICの電子状態	東京工業大理	榎 敏明
金属基板上の有機薄膜の光電子分光	名古屋大理	石井 久夫
アミン誘導体の真空紫外光励起過程の研究	広島大理	田林 清彦
フラーレン類の光電子分光	千葉大工	日野 照純
機能性有機分子超薄膜の構造と電子状態	千葉大工	上野 信雄
質量分析法による光励起エッチング反応の研究	高エネ研	田中健一郎
放射光による光励起プロセスの診断	豊橋技大	英 貢
有機金属吸着層のSR照射による光分解	佐賀大理工	西尾 光弘

UVSOR招へい協力研究

円偏光アンジュレータの建設	理化学研	北村 英男
UVSOR電子蓄積リングを用いた高輝度放射の研究(ビームサイズモニターの開発研究)	理化学研	高野 史郎

UVSOR施設利用

アルキルアンモニウム金属ハライドにおける励起子緩和機構	山形大理	吉成 武久
非晶質CdI ₂ の結晶化過程(Ⅱ)	福井大工	福井 一俊
アルカリハライド混晶系におけるオージェ・フリー発光	信州大工	伊藤 稔
結晶及びアモルファスSiO ₂ の緩和励起子発光	京都大理	神野 賢一
金属ハロゲン化物の励起子内部構造と緩和の相関	京都大総合人間	林 哲介
内殻励起子の2光子分光	京都大総合人間	渡辺 雅之
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
金属酸化物の紫外分光	大阪電気通信大工	大野 宣人
鉛・錫ハライド結晶の内殻および吸収端励起子構造	海上保安大	藤田 正実
短波長レーザー用光学素子の特性評価	宮崎大工	黒澤 宏

Sr ₂ RuO ₄ の超伝導体の内殻共鳴光電子分光	東北大理	高橋 隆
La _{2-x} Sr _x CoO ₄ (0≤x≤1.5)の電子構造	神奈川工科大	小俣 孝久
InNの共鳴光電子分光	福井大工	山本 嵩勇
Si(100)表面でのCsとCl共吸着構造と光脱離	豊橋技科大	並木 章
シリコン表面に吸着したベンゼン分子の光電子分光法による研究	大阪府立大工	田口 幸広
GaAs(100)/Cs/O, GaAs(100)/K/O系の光電子分光とSXAFS	分子研	田中慎一郎
重希土類化合物の共鳴光電子分光	分子研	木村 真一
光電子-光イオン・コインシデンス測定法による放射光誘起イオン脱離過程の研究	分子研	間瀬 一彦
放射光による半導体プロセスの開発	豊橋技科大	吉田 明
放射光照射によるa-Si:Hの光劣化	豊橋技科大	Ganjoo Ashtosh
二価金属ハライド混晶に於ける自己束縛励起子発光	和歌山大教育	宮永 健史
シンクロトロンによるアモルファス半導体の内殻電子励起効果に関する研究	分子研	林 浩司
SR光照射によるアルカリハライドからのアルカリ原子放出	分子研	鎌田 雅夫
d電子励起の光化学-CF ₃ I, CHF ₂ Br, CF ₂ Br ₂	北大電子科学研	川崎 昌博
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
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
遷移金属カルボニル化合物のイオン化解離過程の研究	姫路工大理	小谷野猪之助
エステル類の酸素2s吸収しきい電子スペクトルの測定	分子研	平谷 篤也
BL3A2でのアンジュレーター利用のための整備	分子研	平谷 篤也
X線多層膜望遠鏡の較正	東京大理	常田 佐久
希ガス固体からの中性粒子脱離の動的過程の解明	学習院大理	荒川 一郎
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
BL5Bの整備	分子研	木村 真一
超イオン電導ガラスの遠赤外・ミリ波分光	東北学院大工	淡野 照義
低次元量子スピン系の赤外吸収分光	東京工業大理	腰原 伸也
微粒子の相転移	神戸大理	難波 孝夫
CeNiSnのエネルギーギャップの検証	神戸大理	太田 仁
近藤絶縁体の赤外吸収	分子研	木村 真一
リン化合物のP-K吸収スペクトルの測定	宇都宮大工	中井 俊一
アルカリ金属を添加したMgOの構造解析	東京学芸大	長谷川貞夫

シリカマグネシア複合酸化物中のマグネシウムの局所構造	京都大工	吉田 郷弘
アルカリおよびアルカリ土類金属添加酸化モリブデンの構造解析	京都大工	田中 庸裕
porousGeの内殻吸収スペクトル	鳴門教育大	松川 徳雄
元素添加物およびイオン打ち込み非結晶質シリカの発光・吸収のメカニズムの解明	早稲田大理工	大木 義路
鉛ハライド結晶の自己束縛励起子	福井大工	中川 英之
真空紫外光検出器の分光感度特性測定	京都大化学研	佐藤 直樹
Siイオン注入 Al_2O_3 及びAlイオン注入 SiO_2 の紫外光学特性	工業技術院大阪工業技術研	福味 幸平
超臨界エタンおよび超臨界希ガス中のアントラセンの光イオン化過程	神戸大発達科学	中川 和道
CuCl及びCuBr微粒子吸収から見た相転移	神戸大理	桜井 誠
アモルファス材料の光反射スペクトルによる物性研究	香川大教育	川瀬 雅也
UVSOR励起プロセスによるダイヤモンド薄膜の形成と極微細加工	名古屋大工	後藤 俊夫
SOR光によるプロセス技術に関する研究	名古屋大先端技術共同研究セ	森田 慎三
放射光によるダイヤモンドのエッチング	大阪市立大工	石黒 英治
50nm分解能のX線顕微鏡による大気中の生物像の観察	関西医科大	木原 裕
SR光による紫外域フォトンエコー	香川大教育	伊藤 寛
金属酸化物表面の放射光励起エッチング反応	分子研	正嶋 宏祐
Cu/ SiO_2 多層膜のCu-M, Si-L, O-K吸収	東北大科学計測研	渡辺 誠
ポリエステルフィルムの偏光内殻吸収スペクトルの測定	鳥取大教養	大内 伊助
エステル類の酸素 $1s$ 吸収による解離過程	分子研	平谷 篤也
BL8B1の整備	分子研	平谷 篤也

施設利用（平成6年度前期）

施設利用（I）

グラファイト層間化合物の研究	群馬高専	五十嵐睦夫
2、2'-ビピリジン類とその亜鉛（II）錯体の励起状態	横浜国大工	八木 幹雄
半導体薄膜成長と特性評価	豊橋技科大	吉田 明
ゼオライト膜の合成と応用	豊橋技科大	堤 和夫
アルコキシド法による機能性材料の調製	豊橋技科大	角田 範義
錯体の構造と反応、及び溶液内挙動	愛知教育大	中島 清彦
光及びプラズマを用いて合成した機能性薄膜の評価	名大工	堀 勝
高分子固体表面に化学的に存在する共重合鎖の極低温における分子運動性	市邨学園短大	坂口 真人
ガス中蒸発法による半導体ナノ粒子の生成とキャラクタリゼーション	京大原子研	東野 達
合成ダイヤモンドの格子欠落の構造に関する光反応ESRの研究	阪大基礎工	半沢 弘昌
希土類マンガナイトの層転移と物性の研究	豊橋技科大	亀頭 直樹
ポーラスSiの発光に関する研究	山梨大工	清水 東
低温におけるすべり摩擦の基礎研究	山梨大工	岡田 勝藏
超微粒子の電子状態の研究	三重大教育	佐光三四郎
希土類塩アイオノマーの高次構造	岐阜大工	沓水 祥一
Ti ³⁺ : CaGdAlO ₄ 結晶を用いた可変波長レーザー発振	岐阜大教養	山家 光男
有機超伝導体K-(BEDT-TTF) ₂ Cu[N(Ch) ₂]BrのH体とD体の結晶構造の比較	お茶の水大理	今野美智子
鉄オキソ多核錯体の構造解析	金沢大理	林 宜仁
一次元鎖状シアノ架橋多核クロム（III）錯体の磁気的性質	金沢大教育	井原 良訓
アルミニウム細線の陽極酸化によるワイヤー型通電触媒の開発	静岡大工	上野 晃史
補酵素ブテリン誘導体を含む金属錯体の構造と反応性	名大理院	船橋 靖博
d-f金属イオン間の磁気的相互作用	山形大理	坂本 政臣
ポリアニリンの電子スピン共鳴による研究	広島大総合科学	小島 健一

UVSOR施設利用

アルカリハライド混結晶系における内殻正孔の緩和過程	信州大工	伊藤 稔
Pbハライド結晶の励起子状態	福井大工	中川 英之
フラーレン誘導体の真空紫外吸収	名大理	関 一彦
金属ハロゲン化物結晶と混晶の励起子内部構造と緩和過程	京大総合人間	林 哲介
層状金属ハライド・イオン結晶の固有発光の研究	京大理	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
高密度無極性媒質中のフラーレン等の光物性	神戸大発達科学	中川 和道
CuCl微粒子の励起子吸収の圧力効果	神戸大理	太田 仁
鉛ハライドの光学スペクトル	海上保安大	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
I-VII化合物ヘテロ構造の光物性	琉球大教育	江尻 有郷
BL1Bの整備	分子研	鎌田 雅夫
UPSによる伝導性酸化物の価電子帯構造に関する研究	東工大工業材料研	細野 秀雄
電子受容体の軟X線吸収分光	名大理	大内 幸雄
紫外光電子分光法による白金／シリコン酸化膜／シリコンMIS型		
ダイオードのシリコンバンドギャップ内の表面準位の観測	阪大有機光工学セ	小林 光
ポリエステルフィルムの光電子エネルギー分布の測定	鳥取大教養	大内 伊助
多孔質シリコンの軟X線励起スペクトル	鳴門教育大	松川 徳雄
Pt表面に吸着したN ₂ OのNEXAFSによる吸着構造に関する研究	分子研	松本 吉泰
GaAs表面上のNEA形成についての研究	分子研	田中慎一郎
放射光励起による薄膜成長温度の低温化と特性評価	豊橋技科大	吉田 明
二価金属ハライド結晶における励起子緩和Ⅲ	和歌山大教育	宮永 健史
アンジュレータ光を光源としたⅡ-Ⅳ族化合物半導体のシンクロトロン放射光励起成長	分子研	西尾 光弘
極端紫外光照射によるアモルファス半導体の光学的性質の変化に関する研究	分子研	林 浩司
SR光照射によるアルカリハライドからのアルカリ原子放出のダイナミックス	分子研	鎌田 雅夫
d 電子励起の光化学-CF ₃ Br, CF ₃ Iについて-	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
遷移金属カルボニル化合物のイオン化解離過程の研究	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
BL3A2の整備	分子研	平谷 篤也
高時間分解光電子分光法の開発	東大生産技術研	岡野 達雄
励起子生成によって誘起される希ガス固体からの粒子放出	学習院大理	荒川 一郎
極端紫外域における多層薄反射鏡及び2次元検出器の性能評価		
	名大理	山下 広順
AlGaAsヘテロ構造の内殻吸収	大阪大産研	井上 恒一
半導体X線画像検出器の性能評価Ⅲ	大阪大極限物質セ	有留 宏明
化合物半導体の光学物性に関する研究	佐賀大理工	小川 博司
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
アモルファス半導体の内殻吸収と光劣化現象の研究	分子研	林 浩司
遠赤外分光法による希土類カルコゲナイドの圧力誘起金属非金属転移の研究		
	東北大理	鈴木 孝
超イオン誘導ガラスの遠赤外・ミリ波分光	東北学院大工	淡野 照義
アモルファス氷の遠赤外分光	大阪大基礎工	小林 融弘
微粒子系の相転移	神戸大理	難波 孝夫
磁性半導体の磁場で遠赤外分光	分子研	木村 真一
赤外マルチチャンネルフーリエ分光法の開発	分子研	浅香 修治
BL6A1の整備	分子研	鎌田 雅夫
ウィグラー光利用のための整備 (V)	東北大科学計測研	渡邊 誠
MgPS ₃ , ZnPS ₃ のP及びSのK吸収スペクトル測定	宇都宮大工	中井 俊一
ナトリウムを添加したMoO ₃ -ZnOのXAFSによる構造解析	東京学芸大	長谷川貞夫
ワイドギャップP型伝導性酸化物の電子構造	分子研	川副 博司
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	池沢 幹彦
純粋及び元素添加非晶質シリカの局所構造と真空紫外域光学特性		
	早稲田大理工	大木 義路
BaF ₂ , CsClなどのオージェフリー発光の研究	立教大理	窪田 信三
a-SiO ₂ 中の欠陥に関する研究	分子研	植田 尚之
筋繊維及び筋蛋白質の時分割蛍光分光	名大理	谷口美恵子
TiO ₂ を含有する酸化物ガラスの真空紫外吸収、反射スペクトル		
	三重大工	那須 弘行

シアン化アルカリの励起子構造	京都教育大	橋本 哲
アルカリ臭化物結晶における励起子ポラリトンの観測	大阪電通大工	大野 宣人
アルカリシリケートガラスの紫外光学特性	工業技術院大阪工業技術研	北村 直之
CeRuSbの真空紫外反射スペクトル	神戸大理	桜井 誠
合成シリカの構造欠陥の研究	分子研	川副 博司
UVSORと炭化水素ラジカルを用いたダイヤモンドの成膜	名大工	後藤 俊夫
SOR光による有機Si系薄膜のエッチング	名大先端技術共同セ	森田 慎三
放射光によるブレード回析格子の作製	大阪市立大工	石黒 英治
50nm分解能のX線顕微鏡の開発とウェットな生物像観察への応用	関西医科大教養	木原 裕
SOR光による蓄積フォトンエコーⅢ	香川大教育	伊藤 寛
様々な担体上のMg酸化物XAFS構造解析	名大工	吉田 郷弘
Na, Mgを含む鉱物のXANES	京都教育大	村田 隆紀

国際交流

海外からの訪問者

(前号記載以降1月まで)

Antonija Lesor	(スロベニア ジョセフステファン研究所 研究員)	6. 8.23—6. 8.24
Beatrice Vallone	(イタリア ローマ大学 研究員)	6. 8.30—6. 8.31
劉 本 恩	(中国 中国科学院弁公庁主任)	6.12.15
邱 華 盛	(中国 中国科学院国際合作局亜非拉美処副処長)	6.12.15
鄭 淑 芝	(中国 中国科学院国際合作局公室主任)	6.12.15
韓 忠 恵	(中国 中国科学院半導体研究所外事弁公室主任)	6.12.15
趙 文 璧	(中国 中国科学院長春応用化学研究所外事弁公室主任)	6.12.15
朱 賓 滬	(中国 中国科学院上海分院外事弁公室)	6.12.15
陳 研	(中国 中国科学院大連化学物理研究所外事弁公室)	6.12.15
陳 志 輝	(中国 桂林市科学技術委員会外事弁公室)	6.12.15
R. Zadoyan	(アメリカ カリフォルニア大学 アーバイン校研究員)	6.12.19

海外からの招へい研究者

(平成7年度予定者)

1. 外国人客員研究部門

- Ming-Chang Lin (アメリカ エモリー大学化学科 教授) 7. 1. 5 - 7. 8.31
- Heinz R. W. Fischer (ドイツ フリードリッヒ・シーラー大学イエナ校 研究員)
6.12.16 - 7. 9.30
- Frank O. Goodman (カナダ ウォータールー大学応用数学科 教授) 6.12. 1 - 7. 9.30
- Sergei Krouglik (ベラルーシ ベラルーシ学士院物理学研究所 上級研究員)
7. 2.20 - 7. 8.31

2. 日本学術振興会招へい外国人研究者 (*外国人特別研究員)

- Haridas Pal* (インド バーバ原子研究センター 研究員) 6. 3.29 - 8. 3.28
- Saleck, A. H. * (ドイツ ケルン大学物理学科研究助手) 6. 6. 2 - 7. 6. 1
- Jonas V. Kröber* (ドイツ) 6. 9.13 - 7. 9.12
- Suketu R. Gandhi (アメリカ マックスプランク研究所博士研究員) 6. 7.25 - 7. 6.30
- 蔡 永強* (Cai, Y. -Q.) (オーストラリア ラトローベ大学物理学科 助手)
7. 1.12 - 8. 1.11
- Moshe Shapiro (イスラエル ワイズマン研究所化学物理科 教授) 7. 6. 1 - 7. 6.30
- 李 宇敏* (Li, Yumin) (中国 上海薬物研究所 研究員) 7. 4. - 8. 3
- 孫 文華* (Sun, W. -H.) (中国 ランツォウ化学物理研究所 助手)
7.10. - 8. 9
- Jorg Matysik* (ドイツ マックスプランク放射線化学研究所大学院生) 7. 4. - 8. 3.31

3. 特別協力研究員

- Martin Kotora (チェコ) 6. 5.11 - 7. 5.10
- Hahn, Rainer (ドイツ ミュンヘン大学 研究員) 6. 5.14 - 7. 5.13
- Lavaud, Nathalie (ドイツ ミュンヘン大学 博士研究員) 6. 5.14 - 7. 5.13
- Mikhail Kozlov (ウクライナ ウクライナ科学アカデミー半導体研究所 上級研究員)
6. 9.11 - 7. 8.11
- Yuxiang Mo (中国 中国科学院武漢物理学研究所 助教授) 6.10. 1 - 7. 5.31

Jangseok Ma (アメリカ テキサス大学化学・生化学科 博士研究員) 6.11. 1 - 7.10.31

※平成7年2月末現在で平成7年度に来所が予定されている（継続して滞在する予定者を含む）を整理した。日附は予定日。

海外渡航 (6. 8. 1～7. 1.31)

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	6. 8. 5 ～6. 8.14	ア メ リ カ	日米科学協力事業セミナー「量子エレクトロニクスを用いた基礎実験技術手段と新しい物質の状態の研究」に参加し講演するため
坂 東 俊 治	機 器 セ ン タ ー 助 手	6. 8. 5 ～6. 9.18	ア メ リ カ	特異な構造をもつ炭素化合物の物性の研究実施のため
木 村 真 一	極端紫外光実験施設 助 手	6. 8.10 ～6. 8.20	オ ラ ン ダ	強相関電子系の国際会議に参加し発表を行うため
伊 藤 光 男	分子科学研究所長	6. 8.21 ～6. 8.27	香 港	第14回ラマン分光光学国際会議に出席のため
北 川 禎 三	分子構造研究系 教 授	6. 8.21 ～6. 8.27	香 港	第14回ラマン分光光学国際会議に出席のため
小 倉 尚 志	分子構造研究系 助 手	6. 8.21 ～6. 8.27	香 港	第14回ラマン分光光学国際会議に出席し招待講演を行うため
富 永 圭 介	電子構造研究系 助 手	6. 8.21 ～6. 8.27	香 港	第14回ラマン分光光学国際会議に出席し招待講演及び討論を行うため
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 教 授	6. 8.21 ～6. 8.27	ア メ リ カ	アメリカ化学会シンポジウムで招待講演をするため
宮 島 清 一	分子集団研究系 助 教 授	6. 8.21 ～6. 8.28	ロ シ ア タタルスタン	第27回アンペール会議に出席し講演を行うため及び共同研究打合せのため
浜 広 幸	極端紫外光実験施設 助 手	6. 8.21 ～6. 9. 1	ア メ リ カ	第16回自由電子レーザー国際会議への出席、発表及び他研究施設の見学のため
鈴 木 俊 法	電子構造研究系 助 教 授	6. 8.27 ～6. 9. 8	ス ペ イ ン ス イ ス	ヨーロッパ原子分子衝突会議に出席し研究発表を行う及びチューリッヒ大学を訪問するため
森 田 紀 夫	分子構造研究系 助 教 授	6. 9. 1 ～6. 9.21	ス イ ス	科研費特別推進研究(1)「異常長寿命ハドロン原子の開拓的研究」のうちの反陽子ヘリウム原子のレーザー分光実験遂行のため
井 口 洋 夫	岡崎国立共同研究機構長	6. 9. 2 ～6. 9.11	ド イ ツ	第2回ヨーロッパ分子素子国際会議に出席のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
高 田 彰 二	技 術 課 文 部 技 官	6. 9. 6 ～6.10. 1	イ ギ リ ス	国際学術研究「分子科学 5 分野における共同研究」に関して「多次元トンネルの半古典力学的理論の研究」に係る計算手法及びプログラム作成の調査のため
小 倉 尚 志	分子構造研究系 助 手	6. 9.11 ～6. 9.23	ア メ リ カ ス ペ イ ン	日米科学協力事業共同研究の実施並びに第 8 回欧州生体エネルギー国際会議で研究発表するため
田 中 晃 二	錯体化学実験施設 教 授	6. 9.12 ～6. 9.20	フ ラ ン ス	小分子の選択的変換と触媒反応に関する日欧シンポジウムで招待講演を行うため
鎌 田 雅 夫	極端紫外光実験施設 助 教 授	6. 9.13 ～6. 9.24	ロ シ ア ド イ ツ	新材料の光物性に関する日本CIS共同研究の推進とシンクロトン放射光施設の視察のため
鎌 田 雅 夫	極端紫外光実験施設 助 教 授	6.10. 8 ～6.10.20	中 国	International Symposium on SR Applicationに出席し招待講演を行うため
岩 田 末 廣	理 論 研 究 系 教 授	6.10. 9 ～6.10.13	中 国	第 3 回日中理論化学シンポジウムに出席し討論するため
見 附 孝 一 郎	極端紫外光科学研究系 助 教 授	6.10.22 ～6.11. 2	ア メ リ カ	光イオン化に関する国際研究集会に出席し講演を行うため
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 教 授	6.10.23 ～6.10.29	中 国	原子分子物理学アジア国際セミナーに出席し招待講演を行うため
小 杉 信 博	極端紫外光科学研究系 教 授	6.10.23 ～6.10.29	ア メ リ カ	「光イオン化に関する国際ワークショップ」に出席し招待講演を行うため
足 立 純 一	技 術 課 文 部 技 官	6.10.23 ～6.10.29	ア メ リ カ	「光イオン化に関する国際ワークショップ」に出席のため
伊 藤 光 男	分子科学研究所長	6.10.24 ～6.11. 6	中 国	レーザー分子分光学の研究及び中国の分子科学研究の現状視察のため
斎 藤 修 二	分子構造研究系 教 授	6.10.25 ～6.11. 5	イ ギ リ ス	日英協力事業「分子科学」高分解能分子分光 5 + 5 ミーティングに参加のため
川 副 博 司	極端紫外光科学研究系 教 授	6.11. 6 ～6.11.11	オ ラ ン ダ ド イ ツ	Journal of Non-Crystalline Solids編集者会議に参加及び無機光電子材料に関する研究動向調査のため
木 下 豊 彦	極端紫外光実験施設 助 教 授	6.11.10 ～7. 1. 3	ド イ ツ	アレクサンダーフォンフンボルト財団の研究員として、スピン偏極光電子分光を用いた研究に従事し、かつ、ワークショップに参加するため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
松 本 吉 泰	電子構造研究系 助 教 授	6.11.13 ～6.11.20	ア メ リ カ	「環境制御による分子システムのエネルギー物質変換」に関する研究成果をゴードン会議にて講演、発表するため
川 副 博 司	極端紫外光科学研究系 教 授	6.11.19 ～6.11.21	大 韓 民 国	ガラスプロセス研究会に参加、研究発表及び討論のため
吉原経太郎	電子構造研究系 教 授	6.11.20 ～6.11.27	イ ン ド	アジア学術セミナー「分子科学と分子材料」に出席のため
丸 山 有 成	分子集団研究系 教 授	6.11.20 ～6.11.27	イ ン ド	アジア学術セミナー「分子科学と分子材料」に出席のため
井 口 洋 夫	岡崎国立共同研究機構長	6.11.20 ～6.11.27	イ ン ド	アジア学術セミナー「分子科学と分子材料」に出席のため
北 川 禎 三	分子構造研究系 教 授	6.11.20 ～6.12. 1	イ ン ド	アジア学術セミナー「分子科学と分子材料」に出席並びにセミナー「スペクトル、構造とダイナミクス」に出席のため
伊 藤 光 男	分子科学研究所長	6.11.20 ～6.12. 2	イ ン ド	アジア学術セミナー「分子科学と分子材料」に出席並びにセミナー「スペクトル、構造とダイナミクス」に出席のため
岩 田 末 廣	理 論 研 究 系 教 授	6.11.26 ～6.12. 5	イ ン ド	セミナー「スペクトル、構造とダイナミクス」に出席し講演する及びNational Chemical Laboratoryで量子化学について講演し、討論するため
丸 山 有 成	分子集団研究系 教 授	6.11.27 ～6.12. 4	ア メ リ カ	アメリカMRS秋季会議に出席し講演及び討論を行うため
水 田 勉	錯体化学実験施設 助 手	6.11.28 ～7. 3.20	ア メ リ カ	日本学術振興会重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動及びその関連現象研究」を実施するため
斎 藤 修 二	分子構造研究系 教 授	6.12. 5 ～6.12. 9	中 華 民 国 (台 湾)	中央研究院原子・分子科学研究所で講演及び調査を行うため
中 村 晃	錯体化学実験施設 教 授	6.12.16 ～6.12.22	マレーシア	ユーラシア国際化学会議に出席し招待講演を行うため
田 中 晃 二	錯体化学実験施設 教 授	6.12.16 ～6.12.22	マレーシア	ユーラシア国際化学会議に出席し研究発表を行うため
田 中 晃 二	錯体化学実験施設 教 授	7. 1. 5 ～7. 1.11	ア メ リ カ	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における日米情報交換セミナーに出席のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
染 田 清 彦	理 論 研 究 系 助 手	7. 1. 7 ～7. 2. 9	イスラエル	日本・イスラエル共同研究所（国際学術研究） の実施のため
高 橋 保	錯体化学実験施設 助 教 授	7. 1. 19 ～7. 1.22	大 韓 民 国	「有機合成における有機金属」セミナーで招待 講演を行うため
岩 田 末 廣	理 論 研 究 系 教 授	7. 1.21 ～7. 1.27	イスラエル	日本・イスラエル合同シンポジウムに出席及び 研究打合せのため
伊 藤 光 男	分子科学研究所長	7. 1.21 ～7. 1.28	イスラエル	日本・イスラエル合同シンポジウムに出席及び 関係研究機関訪問のため
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 教 授	7. 1.21 ～7. 1.28	イスラエル	日本・イスラエル合同シンポジウムに出席及び 研究打合せのため

人事異動（6. 8. 13～7. 2. 16）

異動年月日	氏 名	区 分	異動後の所属・職名	現（旧）の所属・職名	備 考
6. 9.30	磯 山 悟 朗	併 任 終 了		極端紫外光実験施設 教授	大阪大・ 産業科学研
〃	磯 邊 清 辞	職	大阪市立大学 理学部 教授	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 助教授	
〃	田 所 誠 辞	職	大阪市立大学 理学部 助手	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 助手	
6.10. 1	渡 辺 芳 人	昇 任	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 教授	京都大学 工学部 助教授	7. 3.31 まで
〃	成 田 吉 徳	併 任	相関領域研究系 有機構造活性研究部門 教授	九州大学 有機化学基礎研究センター 教授	
〃	木 下 豊 彦	昇 任	極端紫外光実験施設 助教授	東京大学 物性研究所附属軌道放射物性研究施設 助手	
〃	奥 村 剛 探	用	理論研究系 分子基礎理論第二研究部門 助手		
〃	成 田 吉 徳	転 出	九州大学 有機化学基礎研究センター 教授	相関領域研究系 有機構造活性研究部門 助教授	
6.10.15	山 室 憲 子	辞 職	筑波大学 研究協力部 研究協力課 技官	分子集団研究系 分子集団動力学研究部門 非常勤の講師	
6.11. 1	持 田 智 行	探 用	分子集団研究系 分子集団研究部門 助手		
〃	安 正 宣	転 出	北陸先端科学技術大学院大学 材料科学研究科 助手	装置開発室 助手	
6.11.30	下 村 博 志	辞 職	アメリカ ノートルダム大学 博士研究員	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 非常勤の講師	
6.12. 1	中 井 利 仁	探 用	分子集団研究系 分子集団動力学研究部門 非常勤の講師	カナダ プリティッシュコロンビア大学 リサーチ・アソシエイト	
6.12. 9	尾 関 夢 香 子	改 姓	旧姓：小久江（化学試料室事務補佐員）		
6.12.31	鈴 木 敏 泰	辞 職	日本電気(株) 基礎研究所 主任研究員	分子集団研究系 分子集団動力学研究部門 助手	
〃	田 中 邦 彦	辞 職	愛知大学 情報処理センター 書記	技術課 電子計算機技術係 技官	
7. 1. 1	田 原 太 平	探 用	極端紫外光科学研究系 基礎光化学研究部門 助教授	(財)神奈川科学技術アカデミー 研究員	
7. 1.16	濱 広 幸	昇 任	極端紫外光実験施設 助教授	極端紫外光実験施設 助手	
7. 2. 1	小 林 敬 道	転 出	科学技術庁 無機材質研究所 主任研究官	電子構造研究系 電子構造研究部門 助手	
7. 2.16	森 義 仁	転 出	名古屋工業大学 工学部 助手	電子構造研究系 電子構造研究部門 助手	

編 集 後 記

多くの方々に、ご多忙中執筆の依頼を快く引き受けていただき本当にありがとうございました。
多くの方が出入りされ、また、新しいコンピューターが動きだし、分子研の活動も活発な
と思います。

分子研レターズ編集委員

宇理須 恒 雄 (委員長)

加 藤 立 久 (本号編集担当)

谷 村 吉 隆

鈴 木 俊 法

宮 島 清 一

磯 部 清

高 橋 保

小 林 勝 則

分子研レターズNo. 32

発行年月	平成7年3月
印刷年月	平成7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