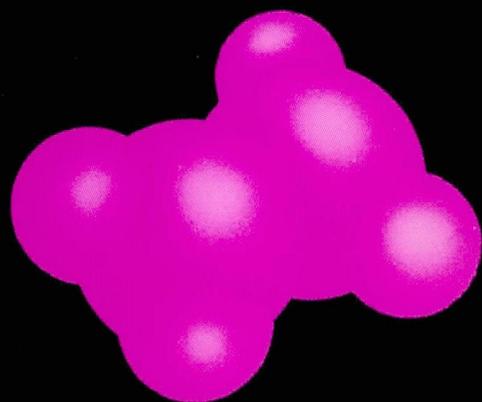


分子研レターズ

1997・1 No.35



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

目 次

巻頭

黒潮と親潮	朽津耕三	1
-------	------	---

研究紹介

短寿命分子の高感度高分解能分光：

直線 4 原子分子の Renner-Teller 効果	齋藤修二	3
-----------------------------	------	---

2 次元光電子分光

一励起分子から振りほどかれた電子を観る	見附孝一郎	7
---------------------	-------	---

研究室紹介

分子基礎理論第四研究部門 (平田グループ)	平田文男	13
分子基礎理論第四研究部門 (米満グループ)	米満賢治	16
分子集団動力学研究部門 (小林グループ)	小林速男	18
相関分子科学第一研究部門 (井上グループ)	井上克也	21
機器センター	猿倉信彦	24

流動研究部門紹介

分子クラスター研究部門 (西グループ)	西 信之	26
分子クラスター研究部門 (永田グループ)	永田 敬	29
錯体合成研究部門 (芳賀グループ)	芳賀正明	31
錯体合成研究部門 (櫻井グループ)	櫻井 武	34

レターズ

COE の条件	正島宏祐	37
---------	------	----

ニュース

第 6 回分子科学研究所オープンハウス	宮島清一	41
---------------------	------	----

総研大ホームページの開設	渡辺芳人	42
受賞者紹介		
吉原経太郎教授に日本化学会賞	松本吉泰	45
北川禎三教授に日本分光学会学術賞	小倉尚志	46
廣田俊君に第12回井上研究奨励賞	北川禎三	47
流動部門を終えるにあたり		
岡崎は私の人生のスタート	吉川雄三	49
狸の住む丘	中沢 浩	50
分子研を去るにあたり		
使い回しのできる便利なネタ	沢辺恭一	52
研究の輪，人の輪	富宅喜代一	53
外国人研究員の印象記		
Ii Naomasa from Brazil	Ornellas, Fernando Rei	55
私の日本	Kröber, Jonas	56
新任者紹介		60
新装置紹介		
赤外磁気光学測定装置	木村真一	69
高感度蛍光分光光度計—SPEX Fluorolog-2—	山中孝弥	71
IMS マシン成果報告	浅香修治	72
岡崎コンファレンス報告		
第54回「水素原子移動反応の動力学的研究」		75
第55回「生体機能発現における金属蛋白質の作用機構」		80
第56回「凝縮相中の量子力学：化学系への対応」		84

総合研究大学院大学

修了者紹介	87
平成8年10月入学者紹介	88

研究会報告

ポリマー・生体系の分子科学	89
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	94
大気化学反応の素過程	95
有機機能材料の基盤となる新規π電子系の分子設計と創出	97
励起子研究・・・今日の到達点とこれからの課題	99

国際研究協力事業報告

日英協力「物質化学に関する日英N+N会議」	齋藤修二	102
重点研究国際協力「光誘起電荷移動」	渡辺芳人	106

分子研コロキウム（第651回～）	108
共同研究実施一覧（平成8年度前期）	109
施設利用（平成7年度前期・後期）	116

国際交流

海外からの研究者	119
海外渡航	120
人事異動	124
編集後記	128

巻 頭

黒潮と親潮

城西大学理学部 朽津耕三

夏のある一日、久しぶりに分子研を訪ねて伊藤所長をはじめ多数の所員たちと語り合うことができた。レポート、Annual Review や本誌などを読んで多少の予備知識は持っていたが、まず所長とお会いしてその熱意に打たれ、各研究室で若い方々と話して、私が受けた感動は予想を大きく上回った。創設以来、発展を絶えず見守って来た分子科学の仲間の一人として、分子研の活躍ぶりに心からの拍手を送りたい。また、レポートに記された二つのセンターなどの将来計画と、各系で進められている様々な研究計画の順調な展開に強く期待したい。[「良いものは素直に褒めよう」という所長の呼びかけ(本誌, No. 31 (1994)) を実践している積もりである。]

関係者は、「分子研の今後の課題は突出したピークを創ることである」と口を揃える。そして誰もが、言うは易く実現は至難の業であることを知っている。誰もが語る最短路の図式は、「既成の概念にとらわれない自由な発想に敢然と挑戦し、英知と覇気に溢れて研究に没頭する若手研究者の一群、その人々を暖かく支えて人的・物的環境を確保する指導者層、共鳴し批判し刺激して萌芽を大物に育てあげる同志チームの存在」である。現在の分子研を見ると、決定的に欠ける要素はなさそうである。(強いて言えば、主幹をはじめ教授層にかかる人事選考・国際対応など管理運営責任の重さが「没頭」と両立しにくいことぐらいであろう。しかし、全所員の信望を集め研究を離れて所長補佐に徹する academic administrator の職があったとして、そこに適任者が得られる場合を除けば、現状に優る解は望めないであろう。) とすれば、最短の道は連続を辿りつつ不連続の発現を模索し、必然を窮めつつ偶然の訪れを待つことなのだろうか。

科学史は、学問の大きな breakthrough の契機として異質の概念・方法論との遭遇・融合が決定的であることを教える。黒潮と親潮が合流する地点は最良の漁場だそうである。私は最近、森野米三先生の追悼文集の編集に参加して、日本における分子科学の源流に思いを馳せる機会を得た。文集に寄稿された先輩たちは、水島研究室などの「大部屋」(半世紀前の旧制大学や理研などには何処にでもあった)で行われた活発な学問的・人間的交流を懐かしみ、それが当時の新しい発想を出現させ、いわゆる独創的研究者を育てる良い温床になったと強調する。英国系の研究機関での tea をはじめ、どの国でも一流の研究機関には伝統と知恵に基づく交流の場が設けられている。分子研では、外部からの研究者(特に外国人)や院生などの滞在と来訪が多く、岡崎コンファレンスをはじめ優れた研究集会も多く、さらに交流の場所は所内・市内に事欠かない。ま

た総研大の院生諸君に対しては、豊かな交流の場が所外にも設けられていると聞く。これらの場を研究の発展と後継者の教育・指導に如何に活用するかは、在籍者の意識と英知に依存するよう
に思われる。

研究紹介

短寿命分子の高感度高分解能分光： 直線 4 原子分子の Renner-Teller 効果

分子研 齋 藤 修 二

1. 高感度高分解能分光

分光法で気相分子を調べる場合、一つの重要な要素は分解能である。分解能を向上させることにより、分子が本来持っているスペクトルを忠実に再現することができれば、分子が示す新しい現象を見出すことが可能になる。しかし、吸収分光法であれ、発光分光法であれ、分解能を高くすることは、検出器が受ける単位周波数当たりの光量が小さくなり、検出が難しくなる。分解能の向上は感度の向上を伴わなければならない、また、分光法の感度は高ければ高いほど良い。感度が高ければ、吸収強度の小さい分子の検出、極微量の濃度の分子の検出、寿命が非常に短いため平均の濃度が非常に低い分子の検出も可能になる。分光法の感度の向上は、分光法本来の意味での可能性を広げるのみならず、関連する分野での分光法の応用も容易に広くなり、新しい分野を切り開くことが可能になる。

分子の回転スペクトルを主な対象とするマイクロ波分光法は、いろいろな波長領域の各種分光法と較べて非常に分解能の高い分光法である。最近各種レーザーを用いた分光法が開発、導入されているが、レーザー分光法といえども特別な工夫を用いない限り、その分解能はマイクロ波分光法のそれには追いつかない。筆者は 1960 年代後半よりマイクロ波分光法の高感度化を図ってきた。考え方としては、分子の回転スペクトルの遷移強度が周波数の二乗ないしは三乗に比例することに着目した。すなわち、その時点で、できるだけ高い周波数領域における最も性能の良い光源および効率の高い検出器をそれらに見合った変調法、吸収セルと組み合わせることにより感度を向上させた。1960 年代には 60GHz (波長 5mm) が高感度分光の限界であったのが、1970 年代には 120GHz (2.5mm) のミリ波帯での分光が可能になり、1980 年頃には 300GHz (波長 1mm) 以上のサブミリ波帯に入り、1991 年再び分子研で分光器を再整備した後は 600GHz (0.5mm) までの高感度高分解能サブミリ波分光が可能になった。現在、当研究所の分光システムの感度は検出可能な吸収係数で表して、電磁波が試料中を 1cm 進む間の電磁波電力の変化として、 10^{-9}cm^{-1} に達してる。この値は検出可能な分子数として $10^7/\text{cm}^3$ に対応し、光の領域の高感度レーザー励起蛍光分光法の感度に近い値である。¹⁾

我々は通常の実験条件では高い濃度を維持するのが難しい、寿命の短い分子、すなわち、フリー

ラジカル，分子イオン，不安定分子の分光にこの高感度分光法を適用してきた。これまでにほとんど分光学的に知られていない，100種弱の新しい分子種のスペクトルを明らかにした。その中には基本的な化学反応の反応中間体や，あるいは，星間化学において重要である分子種などが多数含まれる。¹⁾ 最近の興味ある研究成果としては，(1)第一電子励起状態 ($a^1\Delta$) および第二電子励起状態 ($b^1\Sigma^+$) にある NCl ラジカルのマイクロ波スペクトルの検出，特に第二電子励起状態のマイクロ波スペクトルの測定としては希な例，^{2,3)} (2) $\text{TiO}(^3\Delta_r)$ ， $\text{MnO}(^6\Sigma^+)$ ， $\text{CoO}(^4\Delta_i)$ ， $\text{NiO}(^3\Sigma)$ ， $\text{CuO}(^2\Pi_i)$ など一連の 3d 遷移金属酸化物のマイクロ波スペクトルの検出，これまで解明例の少なかった多重項特有の相互作用項の決定例，⁴⁾ (3) 含りん化合物の酸化過程で生成する非常に安定な含りんフリーラジカル H_2PO の検出および炭素との反応で生成する新しい含りんカルベン HCCP の検出，これまで気相での情報が皆無の例，⁵⁾ (4) 平面か，非平面かで分子構造論的に注目されていた CHF_2 のスペクトルの解明，これは反転運動の対称性に依じて異なった超微細構造（通常の一重項分子の場合には単なるスピン重率になる）を示す分光学的に初めての例，⁶⁾ (5) HCCS，DCCS のマイクロ波スペクトルより明らかにした，直線 4 原子分子についての Renner-Teller 効果の初めての解析例，⁷⁾ などである。さらに，より高い周波数領域での高感度高分解能分光の新しい展開を目標に，周波数可変遠赤外レーザーサイドバンド分光システムの開発を行っている。⁸⁾ 後者の新しい分光法については別に紹介する機会もあると思うので，本稿では，分光学的にも初めての例であり，分子構造論としても意味の大きい直線 4 原子分子の Renner-Teller 効果を以下に紹介する。

2. 直線 4 原子分子の Renner-Teller 効果⁷⁾

電子状態が縮退している直線型フリーラジカルの変角振動が励起された場合，振電相互作用により縮退が破れる現象を Renner-Teller 効果と呼ぶ。この現象は電子が核の変位を感じる（Born-Oppenheimer 近似の破れ）ことで起こる。例えば直線 3 原子分子が変角振動により変角した配置を取ると，核のまわりを回っている電子は三つの核が作る平面内にある時と，面外にある時とは異なるポテンシャル（つまり，縮退のとれる軸対称でないポテンシャル）を感じる。ポテンシャルは変角振動に従って変化するので，その中には縮退している電子状態の成分を混合するような周波数成分が存在することになる。そのようなポテンシャルは

$$V = V_0 + k_2\rho_2^2/2 + j_2^{(1)}\rho_2\cos(\nu - \chi_2) + j_2^{(2)}\rho_2^2\cos 2(\nu - \chi_2) \quad (1)$$

と与えられる。ここで第 1 項は核が直線配置の時に感ずるポテンシャル，第 2 項は振動 (ν_2) の項，第 3，4 項の項は振電相互作用を表す項で， ρ_2 は変角振動の振幅， ν は電子の方位角， χ_2 は振動の方位角である。Renner-Teller 効果による縮退した電子状態の分裂は第 4 項により直接的に

($\Delta v_2 = 0$), および第 3 項の二次摂動により間接的にもたらされる ($\Delta v_2 = \pm 2$)。直線 3 原子ラジカルの Renner-Teller 効果については、これまでに理論的にも詳細に検討され、^{9,10)} また多くの分子についての解析例も報告されている。^{10,11)}

一方、構成原子が一つ多い直線 4 原子ラジカルは 2 つの縮退した変角振動をもつが、その振動励起による Renner-Teller 効果を詳しく調べた例は少なく、しかも、マイクロ波分光の精度で調べられた例はない。HCCS は $^2\Pi$ 電子状態を持つ、数少ない直線 4 原子ラジカルの一つである。我々は直線 4 原子ラジカルの Renner-Teller 効果がどのように現れるかに興味を持ち、振動励起状態にある HCCS, DCCS ラジカルのマイクロ波スペクトルの測定をおこなった。基底状態のスペクトル以外の複雑な、弱いスペクトル線の帰属は、予想される $HCC(\nu_4)$ と $CCS(\nu_5)$ の変角振動数、各振電状態に期待されるスペクトルパターンおよび HCCS から DCCS になった時のパターンの変化に対応する整合性に基づいておこなった。各振電状態についての回転スペクトルを解析した結果、 $\mu/\kappa^2\Sigma$ 状態のスピンの結合定数 γ_{eff} が回転定数の 2 倍近い大きさを持ち、しかもお互いに 3GHz も異なることが判明した。これまでの直線 3 原子分子についての理論に基づくと、 γ_{eff} はせいぜい数 10MHz 以内でなければならない。このような異常な値はこれまでの理論ではまったく説明出来ない。

我々は二つの変角振動を有する場合のポテンシャルとして、2 個の変角振動を独立に考慮した振電相互作用の項のみならず、それらが同時に寄与する項を考慮する理論式を展開した。この場合の Renner-Teller 効果のポテンシャルとしては、

$$\begin{aligned}
 V = V_0 &+ [k_4\rho_4^2/2 + j_4^{(1)}\rho_4\cos(\nu - \chi_4) + j_4^{(2)}\rho_4^2\cos 2(\nu - \chi_4)] \\
 &+ [k_5\rho_5^2/2 + j_5^{(1)}\rho_5\cos(\nu - \chi_5) + j_5^{(2)}\rho_5^2\cos 2(\nu - \chi_5)] \\
 &+ j_{45}^{(2)}\rho_4\rho_5\cos(2\nu - \chi_4 - \chi_5)
 \end{aligned} \tag{2}$$

を用いた。このポテンシャルのもとでの回転運動への影響を検討した結果、これまで考慮されていた $\Delta(v_4 + v_5) = \pm 2$ の行列要素のみならず、 $\Delta(v_4 + v_5) = 0$ の行列要素がより大きな効果を与えることを明らかにした。その結果、Renner-Teller 効果の程度を表す Renner パラメーター ϵ としてはそれぞれの振動による独立な ϵ_4 と ϵ_5 に加えて、両振動の交差項として ϵ_{45} の寄与があり、その内容は(2)式のポテンシャルの第 4 項からの寄与の他に、第 2 項と第 3 項の交差項が対等に寄与していることが明らかになった。HCCS, DCCS の振動についての信頼できる情報がないので、Renner パラメーターとして ab initio 計算による値 $\epsilon_4 = 0.37$, $\epsilon_5 = 0.10$ をマイクロ波分光データの解析に用いた。その結果、異常な γ_{eff} を矛盾なく説明できる値として $\epsilon_{45} = 0.4$ が得られた。すなわち、二つの変角振動の干渉的な Renner-Teller 効果が回転運動に非常に大きい影響を与えていることが明らかになった。 ϵ_{45} が得られた初めての例である。

先にも記したように、縮退した電子状態を持つ直線4原子ラジカルの高分解能分光例は非常に少ない。しかし、今後多くのラジカルに適用され、 ϵ_{ij} についての値がいくつか知られるようになると、2個の変角振動を持った分子の Renner-Teller 効果の物理的描像が明確になって行くものと考えられる。

参考文献

1. S. Saito, *Appl. Spectrosc. Rev.*, 25, 261 (1989-1990); *Astron. Soc. Pacific Conf. Ser.*, 16, 249 (1991).
2. K. Kobayashi, M. Goto, S. Yamamoto, and S. Saito, *J. Chem. Phys.*, 104, 8865 (1996).
3. K. Kobayashi and S. Saito, *J. Phys. Chem.*, accepted (1996).
4. K. Namiki and S. Saito, *Chem. Phys. Letters*, 252, 343 (1996), K. Namiki and S. Saito, to be published.
5. T. Hirao, S. Saito, and H. Ozeki, *J. Chem. Phys.*, 105, 3450 (1996), I. K. Ahmad, H. Ozeki, T. Hirao, and S. Saito, to be published.
6. N. Inada, H. Ozeki, S. Saito, K. Saito, and M. Hayashi, to be published.
7. J. Tang and S. Saito, *J. Chem. Phys.*, 105, Nov. issue (1996).
8. 齋藤修二, 尾関博之, *固体物理*, 31, 101 (1996).
9. J. T. Hougen, *J. Chem. Phys.*, 36, 519 (1962).
10. Ch. Jungen and A. J. Merer, in *Molecular Spectroscopy: Modern Research*, edited by K. Naragari Rao (Akademic Press, New York, 1976), Vol. II, p127.
11. G. Herzberg, *Electronic Spectra and Electronic Structure of Ployatomic Molecules* (van Nostrand, Princeton, 1966).

2次元光電子分光

—励起分子から振りほどかれた電子を観る—

分子研 見 附 孝一郎

赴任後しばらくして研究室紹介の原稿を頼まれた時のことですが、編集担当の先生に、「見附さんには、少なくともあと2回は分子研レターズに寄稿してもらいます。研究紹介と分子研を去るにあたっての2つです。」と言われたことを思い出しました。いよいよ研究紹介を書いてくださいと言われ、たいした理由もないのに1回はお断りをしていました。研究室紹介で表明した目標のうち、限られた成果しかあげられていないという後ろめたさがあるせいかも知れません。この5年半で今更のように感じたのは、放射光の強度はレーザーに比べて著しく弱いということと、ビームラインを最高の状態に維持することは片手間では不可能であるということの2点でした。必然的にグループの全スタッフがUVSORに専念することになり、分光器の性能に合わせてテーマも下方修正しなければならなくなりました。こんな状況の中で、この研究はUVSOR謹製ですと人前と言えるものが二つ三つでも残せたのは、ひとえにメンバーの全面的な協力のおかげです。

これでは、まるで「分子研を去るにあたって」の内容になってしまい、出だしからそもそも研究紹介にふさわしくないとお叱りを受けそうなので気を取り直して、本稿では服部秀男・彦坂泰正君らの協力による「2次元光電子分光」の最近の成果を概説しましょう。^{1),2)} もう一つ、将来の発展に期待しつつ、現在とても楽しみながら研究を進めているテーマに「レーザーと放射光の厳密同期の実験」(協力者、水谷雅一博士他)があります。開発的要素がまだ多く、分子科学領域で新しいデータを産み出すまでには至っていないので細かいことは省略しますが、いつかレ

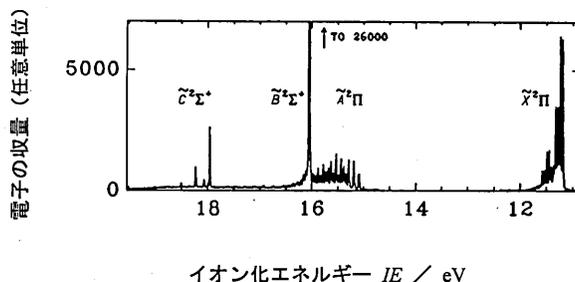


図1 硫化カルボニル(OCS)のHe I光電子スペクトル

電子エネルギーの分解能は約13meV。励起光のエネルギーPEは21.22eV。

文献3)より転載。

ターズに書ければいいなと思っています（生来の筆無精のせいで、空手形にならないといいのですけど）。

図1に示したのはカリフォルニア大の Shirley 達が報告した硫化カルボニル (OCS) の HeI 共鳴線光電子スペクトルです (分解能 13meV)。³⁾ 分子線を利用することで、回転やドップラーによる線幅の広がりを極力抑えることに成功しています。これによってイオンの振動定数が精密に求められ、観測された振動準位のほとんどすべてを帰属することができるようになったばかりでなく、スペクトルを拡大してみるとわかりますが、 $OCS^+ (A^2\Pi)$ バンドのスピンの軌道分裂や $OCS^+ (X^2\Pi)$ バンドの振電相互作用に基づく Renner-Teller 分裂なども分離できるようになりました。今後はレーザー多光子イオン化光電子分光 (MPI-PES) やしきい光電子分光 (TPES) などによって、さらに高分解能のデータが得られるようになるでしょう。ただ、どちらの手法も通常の光電子分光に比べて汎用性に若干欠けるといった側面がありますが。

このように、原子価電子領域では、気相光電子分光装置の性能はほとんど限界まで引き出され、議論はすべて尽くされてしまったように一見感じられます。⁴⁾ ところが、さほど高分解能を追求しなくても、光電子スペクトル中にはまだ未解決のおもしろい問題がいくつも残っていました。図2(a)と(b)は、15eV 付近の光エネルギーにおける OCS の光電子スペクトルです。これらは UVSOR のビームライン 3B で彦坂君が測定したものです。感度を上げる目的で電子エネルギー

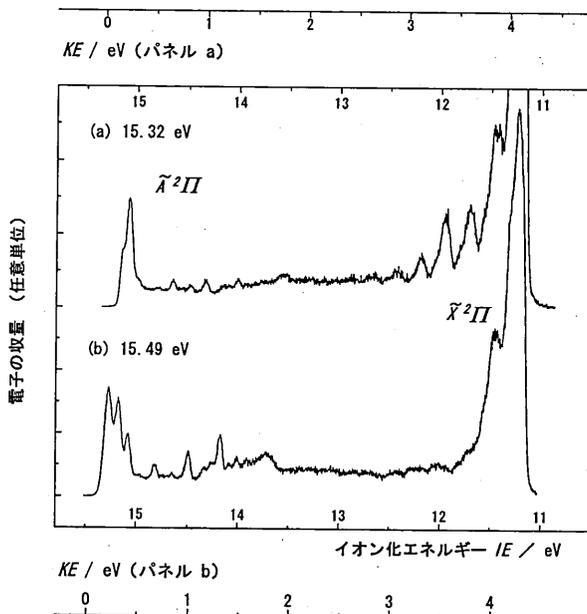


図2 硫化カルボニル (OCS) の光電子スペクトル

電子エネルギーの分解能は約 70meV。励起光のエネルギー PE は(a) 15.32 と(b) 15.49eV。

の分解能を 70meV まで落としています。図 1 と比較するとスペクトルの様子が大いに異なっているのがおわかりでしょうか？ 図 2(a)の 12 から 12.7eV にかけて OCS^+ ($X^2\Pi$) の高い振動準位のピークが、また、図 2(b)の 14eV 以上の領域に OCS^+ の振電バンドには同定できない複数のピークが存在することが見て取れます。基底状態分子からイオンへの直接イオン化過程ではこれらのピークは決して理解できません。このような現象は励起光のエネルギー (PE) を変えてはじめて観測されたのですから、いままでのように電子の収量をイオン化エネルギー (IE) または電子の運動エネルギー (KE) のみの関数として眺めていては埒が明かないということがおわかりになると思います。

そこで、 PE を連続的に変化させながら図 2 のような光電子スペクトルを何枚も測定し、2次元の絵で表してみました。言葉で言うと容易で単純な作業に聞こえますが、実際はそうではありません。装置条件を長時間安定に保持すること、光波長の正確な検定ならびに電子エネルギー軸および電子の透過率の厳密な補正が必要です。測定に際して、忍耐力と注意力のどちらか一方でも欠けると、信頼度の高い 2次元光電子スペクトルを得ることは困難です。

図 3 は縦軸の PE と横軸の KE の 2変数関数として、光電子の収量を 8段階の濃淡で表したものです。ただし、強度の強いところは飽和させています。まず目に入るのが、画面右側と左上側の 2つの領域を傾き 1 で横切る斜めの太縞でしょう。それぞれ OCS^+ ($X^2\Pi$) と OCS^+ ($A^2\Pi, B^2\Sigma^+$) への直接イオン化に対応するものと結論されます。直接イオン化では IE が一定となり、もともと $IE = PE - KE$ の関係があるので PE は KE に対して傾き 1 の直線で表されます。次に、 $PE = 14.80, 14.94, 15.17\text{eV}$ 等々の位置に、水平方向に延びる多数のパターンが見られます。この内から $PE = 15.32\text{eV}$ のパターンを選び (a ⇨印)、水平方向に切断した結果が図 2(a)の

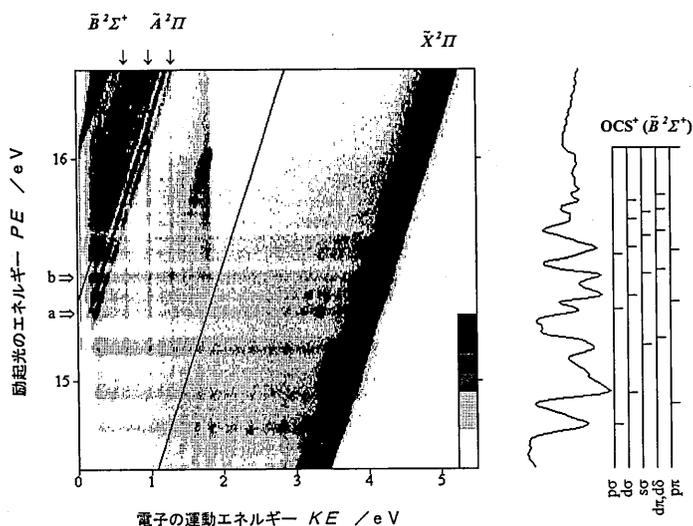


図 3 硫化カルボニル (OCS) の 2次元光電子スペクトル

ベクトルだったのです。先程の説明の際には、 $IE = 12$ から 12.7eV にかけて $\text{OCS}^+ (X^2\Pi)$ の高振動準位が現れていると書きました。これらのピークは、図3の $PE = 15.32\text{eV}$ の水平パターン上で、 $KE = 2.6$ から 3.3eV の範囲にある昆虫の体節のような飛び飛びのスポットに対応しています。

図3に見られる水平パターンの PE は、すべて、 $\text{OCS}^+ (B^2\Sigma^+)$ に収斂するリュドベリ状態の励起エネルギーに合致しています。これらの状態は、HOMO から数えて3番目の 9σ 軌道から電子を1つ空のリュドベリ軌道に励起した電子配置で表現され、中村先生に習えば第1種の超励起状態⁵⁾に分類されます。超励起状態はイオン化連続状態に埋まっているので、電子間のクーロン相互作用で速やかに自動イオン化します。最終的に生成するイオンの振動分布は、イオンと中性基底状態のフランク・コンドン因子だけで決まる直接イオン化の場合と異なり、途中の超励起状態の平衡核配置に大きな影響を受けます。したがって、多くの場合、直接イオン化よりも自動イオン化の方が分子振動が強く励起されます。そのため、図1には見られない $\text{OCS}^+ (X^2\Pi)$ の高振動準位が $PE = 15.32\text{eV}$ の水平パターン上で観測されたのです。⁶⁾

一方、図2(b)のスペクトルは、図3の $PE = 15.49\text{eV}$ に延びる水平パターンの切断面を示したものでした (b ⇨ 印)。前者の $IE \geq 14\text{eV}$ に存在する複数のピークは、後者では $KE \leq 1.5\text{eV}$ の領域に濃いスポットとして表現されます。ここで注目していただきたいのは、これらのスポットが $15\text{eV} < PE < 16\text{eV}$ の範囲に延びる垂直方向のパターン (↓印) との格子点に位置しているという事実です。それぞれの垂直パターンは、リュドベリ状態の励起エネルギーのところで強度が強くなっています。言い換えると、様々なリュドベリ状態が $KE = (\text{一定})$ の電子を放出することが、垂直パターンの起源となっているのです。どう頭をひねっても、分子の自動イオン化ではこの現象を合理的に解釈することができません。種明かしをしましょう。実はこれらのリュドベリ状態は、一旦ある特定の解離性状態に移行し、硫黄原子と一酸化炭素に分解するのです。もともとのリュドベリ分子が大きな内部エネルギーを持っているので、解離断片のS原子も超励起されており、イオン基底状態 $\text{S}^+ (4S)$ に自動イオン化することができます。そのとき放出される電子の KE の大きさは、S原子と $\text{S}^+ (4S)$ とのエネルギー準位の差だけで決まり、最初どのリュドベリ状態に光励起されたかということには無関係です。これから、 PE に依らず KE は一定となり、2次元スペクトルに垂直方向のパターンがなぜ生ずるのか納得がいきます。

分子の超励起状態の大きな特徴の一つは、自動イオン化過程以外に化学結合が切れて中性断片に解離するチャネルが開いているということです。原子の超励起状態ではこういった緩和は起こりません。昔は、主量子数の小さなリュドベリ状態は自動イオン化の寿命が短すぎて、分子解離の可能性が小さいと考えられてきました。しかし、旗野先生等によって開発された2次元蛍光分光の一連の研究結果⁷⁾ は、このような単純な推測が必ずしも正しくないことを証明しています。

我々の2次元光電子分光の結果も東工大グループの結論を支持しています。解離した中性断片が発光するか自動イオン化するかの違いはありますけれども。以上に関連して、主量子数の比較的大きなリユドベリ状態の前期解離において、コアイオンモデル⁸⁾がどの程度まで成立するかが興味を持たれてきました。図3をもう一度見てください。これまで説明しなかった際立ったパターンが、 $1.6\text{eV} < KE < 1.8\text{eV} : 15.8\text{eV} < PE < 16.05\text{eV}$ の限られた領域に斜めに観測されます。このパターンは、リユドベリ状態から解離性状態へ移行する際に主量子数がほぼ保存されていることを示唆しており、したがってこの系ではコアイオンモデルがよい近似となっていることが期待されます。

原子に比べて分子の超励起状態にはわからない点が山のようにあります。ポテンシャルエネルギー曲面の形状やイオン化状態との電子的結合をはじめとして、近くに存在する他の超励起状態への非断熱遷移などなど、今後、実験・理論の両面から追求していかなければなりません。我々は超励起状態からの主要な出口チャンネルを詳しく研究したいという動機から2次元光電子分光法を開発してきました。今後は、イオン化や解離その他の可能なチャンネルすべてを洗い出し、振動状態まで区別して部分断面積を正確に求めることが最も重要であると思います。そして将来は、放射光とレーザーを併用した高速過渡分光で超励起状態を追跡できるような時代がきつとやってくるでしょう。このような研究は、自動イオン化や光解離のダイナミックスの解明に役立つばかりでなく、励起分子反応の遷移状態を直接的に観測したいという切なる願望を叶えてくれるに違いありません。

- 1) K. Mitsuke, Y. Hikosaka, T. Hikida, and H. Hattori, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **79**, 395 (1996); H. Hattori and K. Mitsuke, *ibid.* **80**, 1 (1996).
- 2) Y. Hikosaka, H. Hattori, T. Hikida, and K. Mitsuke, *J. Chem. Phys.* **105**, 6367 (1996).
- 3) L. S. Wang, J. E. Reutt, Y. T. Lee, and D. A. Shirley, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **47**, 167 (1988).
- 4) 本稿では深い原子価電子の励起までは考慮していない。励起光のエネルギーを上げると、イオン化エネルギー 25eV 以上の領域に1電子励起1電子イオン化のようなサテライト状態が多数観測される。こういった状態に関してはまだ不明な点が多く、今後も理論計算の助けを借りた詳細な研究が必要である。
- 5) 第1イオン化ポテンシャルよりも上に存在する中性励起状態を超励起状態と呼ぶ。例えば、中村宏樹, 高木秀一, 日本物理学会誌 **45**, 87 (1990).
- 6) 図3の水平パターンを精密に調べると、リユドベリ状態の自動イオン化だけでは説明がつかないことがわかる。おそらく励起分子の一部はリユドベリ状態から別の解離性状態に乗り

移ったあとに、自動イオン化するのだろうと考えられる。

- 7) N_2 , CO, N_2O 等の分子について研究がなされている。例えば, M. Ukai, K. Kameta, S. Machida, N. Kouchi, Y. Hatano, and K. Tanaka, *J. Chem. Phys.* **101**, 5743 (1994).
- 8) 主量子数の大きいリユドベリ状態では、一つの電子が高く励起されており、コアイオンはその電子に対しほとんど点電荷のように振る舞うとみなすモデル。

研究室紹介

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 (平田グループ)

分子研 平 田 文 男

昨年10月分子研に赴任して約8ヶ月が過ぎてしまいました。この8月に佐藤啓文さんを助手として迎えましたので、やっと研究グループの最小単位ができましたが、未だ、グループとして本格的に始動するという段階には至っていません。したがって、研究室紹介といっても、主として私個人の研究の経緯と、今後、分子研でどのような研究を進めて行こうとしているかについて述べたいと思います。

私の研究の中心は液体・溶液の構造とそのダイナミクスですが、その出発は北海道大学の学生だった約28年前にさかのぼります。当初、私は応用電気研究所（現在は電子科学研究所）の荒川先生の指導の下、超音波による水溶液の実験を行っていました。しかし、その問題が関係していた水の液体構造をもっと深く追及したいと思うようになり、「液体の理論をやりたい」と申出しました。このとき、荒川先生は最終的には理論への転向を認めましたが、「化学で理論をやる就職はないもとの覚悟しなさい」と釘をさされたました。荒川先生が私に言われたことは実は脅しでも何でもなく、当時のわが国の化学と液体論の現状そのものだったと考えています。そのころ、日本における化学の分野で「理論」を表看板にした研究室は非常に少なく、液体・溶液論にいたっては皆無でした。液相はいうまでもなく有機化学、分析化学などほとんどの化学の分野で重要な役割を果たしている物質の状態ですから、それを理論的に追及する研究室が無かったというのは今から考えると不思議に思えます。実際、米国では当時すでに化学物理の主題のひとつとして液体・溶液の統計力学が脚光を浴びつつあったわけですから、日本はこの面で大変遅れた状況にあったといえるだろうと思います。今回、いわばわが国の分子科学研究の中核ともいえるこの研究所に液体・溶液理論を「表看板」に掲げた研究室が出現したことはある意味では歴史的できごとであり、それを構想・実現された先輩スタッフの英断と努力に心から敬意を表したいと思います。

ところで、液体・溶液の理論が化学の中で長年その意義を認められなかったのにはそれだけの理由があります。それは当時の液体論が化学者とくに実験家からの要請にほとんど応えることができなかったからだろうと思います。1960年代までの液体論はもっぱら「パチンコの玉」のような球形の分子の集合体の統計力学だったといってよいでしょう。(私はこのような液体論を「物

理の液体論」と呼んでいます。) このような液体論では液体の個性はほとんど分子の直径だけに反映されており, 有機化学反応や生体高分子の安定性など化学で問題となるような溶媒効果の強烈な個性を説明できないことは明らかです。特に, 水やアルコールなどに典型的に見られる水素結合によるネットワーク構造などは旧来の液体論でははるかに手の届かない問題とされていました。分子の個性は本質的には電子状態によって決定されますが, それは古典的に観ると分子の幾何形状と電荷分布に反映されています。1970年代にこのような分子の個性をあらわに考慮して液体を扱う二つの理論的手法が出現しました。ひとつは分子シミュレーションの手法で, もうひとつが D. Chandler と H. C. Andersen が提案した分子性液体の積分方程式理論 (RISM) です。分子シミュレーションは比較的早くから実験家にも容易に受け入れられ華々しい成功を納めました, 積分方程式理論の方はなおひとつ大きな山を越える必要がありました。オリジナルな RISM 理論では分子の幾何形状は正しく取り扱うことができましたが, 分子を特徴づけるもうひとつの化学的個性である電荷分布の方を考慮していなかったからです。この問題を最終的に解決したのが 1982年に私と P. J. Rossky が発表した拡張 RISM 理論です。拡張 RISM 理論はまず水の液体構造の特徴を定性的に説明することに成功し, その後, イオンやポリペプチドの水和構造の安定性, 溶媒和のダイナミクス, 水和電子, 溶液内分子の電子状態などほとんどすべての溶液内化学過程に応用され, すくなくとも定性的なレベルでは溶媒の化学的個性を正しく表現することに成功しています。

すぐ前に分子シミュレーションについて言及しましたが, この機会に液体の統計力学と分子シミュレーションの違いについてよく聞かれる疑問に関して私自身の見解を述べておきます。その疑問とは「計算機の性能が上がってきて, 大抵の問題は分子シミュレーションで分子レベルの詳細な情報を得ることができるのだから液体の統計力学は必要無いのではないか」というものです。分子シミュレーションは運動方程式やボルツマン統計などの最も簡単な法則に従って分子やその集合体の思考実験を計算機を使って行うものであり, 確かに溶液の構造やその動きに関して最も詳細な情報を提供してくれる強力な研究手段であることは論をまたないところです。しかし, それはあくまでも「実験」であって決して解析的理論に置き換わるものではない。例えば, 電解質溶液中のイオン間相互作用は無限希釈では厳密に $\exp(-\kappa r)/\epsilon r$ のような関数形でイオン間距離 r とともに減衰することやその減衰パラメータ κ はイオン濃度ではなくその平方根に比例することなどが統計力学から明らかになっています。このような振る舞いはイオン間の平均力ポテンシャルをいわゆる Mayer の f -関数を使って濃度展開したときの無限級数の和として解析的に出てくるものであり, イオン間相互作用の遮蔽という物理的現象に明確な数学的な説明を与えることができます。もし, 非常に長い分子シミュレーションを実行すればイオン間相互作用のこのような振る舞いを任意の精度で再現することができるでしょう。しかしそれはあくまでも解析的理論の予

測をの正しさを確認しているだけであって、「何故、イオン間相互作用が指数関数で減衰するのか」、「何故、減衰パラメタ κ は濃度ではなくその平方根に比例するのか」といった疑問に答えることはできません。このような例は物理現象において枚挙にいとまがなく、分子シミュレーションと液体の統計力学に関する先に述べた疑問は異なる方法論の位置付けに関する単純な誤解から生じたものであると理解しています。

私は拡張 RISM 理論を理論化学において未解決の三つの問題に展開し、いわば『化学における液体論』を構築したいと願っています。その三つとは (1) 溶液内化学反応, (2) 生体高分子の構造安定性と立体構造予測, (3) 溶液内の緩和過程であります。もちろん、これらの課題は私のグループだけで達成できるものではなく、研究所内外の研究者との協力が本質的意義をもっています。例えば、蛋白質の立体構造予測では同じ理論系の岡本グループや京都大学、九州工業大学の研究者と密接な共同研究を進めていますが、それまで自分だけでは不可能だと思っていたことが共同研究を通じて可能になる、その喜びを実感しています。分子研の使命のひとつは共同研究を促進することであり、そのため研究者間の交流が非常にやりやすいのが最大の長所だと感じています。私はこの長所を最大限に活かして、研究所内外の多くの研究者と協力して上に述べた三つの課題を追及していきたいと思っています。

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 (米満グループ)

分子研 米 満 賢 治

平成8年2月に東北大学工学部応用物理学科から転任して7ヵ月になります。ここ数年間は転々と研究所を移ってきていたのですが、ようやく腰を落ち着けて研究に専念しています。この9月に助手として岸根順一郎さんが加わり、少しづつグループらしくなってきました。解析的な仕事の得意な彼は東京大学の駒場キャンパスの研究室出身で、赴任後さっそくイギリスからの研究者と議論をしに東京に出張するなど、積極的に働いています。私たちのグループでは計算機などの研究機器の整備や共同研究のネットワークづくりはまだですが、周りの先生方、秘書の方々と学生さんたちの暖かい支援のもとで、研究室としての体裁を整えています。理論研究系の第一印象は、それが分子研の定常状態なのかもしれませんが、最近来られたメンバーが多く専門分野が広範囲にまたがっているせいでしょうか、非常に友好的で、学際的な共同研究を始めたり、一緒にスポーツを楽しんだり、とてもよい雰囲気です。これは組織改革や教育や雑用に追われている多くの大学ではなかなか味わえないものだと思います。

私のこれまでの研究歴について紹介させていただきます。東大物理の和田靖先生の研究室で修士のとき、ポリアセチレン中のソリトンと呼ばれる非線型励起状態での電子相関について興味をもち論文を書きました。ソリトンは最初は流体力学の分野で研究されていたことからわかるように、基本的に古典的（あるいは平均場的）な見方にとらえられるものです。したがって強相関電子系にソリトンという概念が持ち込まれることはあまりありません。当時は高温超伝導体が発見されたばかりで、世界的にその研究が盛んになりつつありました。ですから早くポリマーの研究から抜け出して、そちらに移りたいと思っていました。実際、博士論文のテーマは高温超伝導の機構に関するものです。そのときは予想はしなかったのですが、ソリトンに関して勉強したことは、高温超伝導体を含む広い意味での強相関電子系の研究に実はとても役立っています。ポリマーほど単純ではなくても、ソリトンの概念は固体物理のいろんな場面で応用されていて、Prog. Theor. Phys. の特集号にもなっています。

博士研究員をしてきたロスアラモス国立研究所、トリエステの国際理論物理センター、ジョージア大学は、いずれも研究が活発で多くの研究者が訪問するところでした。共同研究をした人々の専門や技法が異なっていたので、幸運にもいろいろな理論的方法を学んだり開発したりするこ

とができました。主なテーマは、2次元物質である銅酸化物や1次元ハロゲン架橋遷移金属複合体などの電子充填率を制御してできた状態の格子振動、光吸収、磁氣的応答、伝導性、電子対の対称性や超伝導との関連などでした。最近では繰り込み群という場の理論や統計力学でよく使われている方法を擬1次元電子格子系に應用して、1次元特有の電子状態や金属絶縁体転移の様子を調べています。

分子研では分子性固体・有機(半)導体、磁性、低温、統計力学・物性基礎論にまたがるこれまでの興味と様々な理論的方法、計算手法をもとに低次元の強相関電子系に対する理解をより深めていきたいと思っています。固体では 10^{23} 個のオーダーの電子が関わってきますので、少数多体系である原子核、分子、マイクロクラスターなどとは本質的に異なった現象が起こります。金属絶縁体間などの相転移や、超伝導や反強磁性などの長距離秩序の形成がそうです。多電子系は個々の電子状態の組み合わせで決まる天文学的な数の自由度を持っています。現在よく性質が理解されている物質ではそういった自由度の多さとは裏腹に、パウリの排他則のお陰で、個々の電子が感じるのは他のすべての電子が作る平均的なもの(場)と考えて構いません。ところが高温超伝導体の異常金属相や近藤格子系の重い電子状態では、そういった平均的な“場”では説明できない、自由度の多さを直接反映した現象(強相関効果)が起こっています。これは無機的な遷移金属化合物に限ったことではありません。分子研の功績がとても大きいのですが、分子性固体における超伝導相、金属相、反強磁性相などでも強相関効果が重要なことがわかっています。分子性固体では合成される構造が多様だし、電子の運動方向の意味での低次元性も効いてきて、様々な電子相が現われます。これらの発現機構を電子相関を考慮しながら解明し、無機物質から分子性物質にわたる電子状態を系統的に理解するのが我々のグループの目的です。方法としては遷移金属化合物などでも使われている数値的なもののほかに、低次元系特有の量子効果を扱うために素粒子物理学でよりポピュラーな場の理論を用いたり、秩序パラメタのコヒーレンスが短い多体系ということで原子物理学の方法を應用することもあります。現在は他の理論グループほど計算機を使っていませんが、機器を充実させ環境を整えて数値的な研究もさらに発展させていこうと思います。

それぞれの研究室で活発でいい雰囲気を保っておられる周りのスタッフの方々からいろいろ学びながら、グループのメンバーと活動を充実させていきたいと思っています。皆様のご助言、ご援助をよろしくお願いいたします。

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 (小林グループ)

分子研 小林 速 男

分子動力学部門は丸山先生が定年で辞められた後、平成7年夏に、分子性物質の物性開拓研究を目指し小林が着任しました。とは言いましても一人では研究室の片付けもままならず、運びこんだ200個程のダンボール箱を積み上げて置く場所を作るのがやっとで、しばらくはダンボール箱とガラクタに挟まれて過ごしました。私も頭を使わない単純な肉体労働くらいなら今でも比較的出来るのではないかと思っていましたが、やはり一人では人力不足でした。その内に、部屋がそのまま放置されている事を気にされた丸山先生が病み上がりで現れて、一人で後始末をされようとしておられたのには大変恐縮しました。私も荷物を放り出したまま、晩秋に導入した低温X線装置の調整をしたり、磁化率測定装置を使わせてもらったりしているうちにたちまち日が過ぎ、研究室が片付き、動きだしたのは、若い人が来てくれた平成8年4月でした。冬から春にかけ、二月末に雪が降った時、湿った樹木を見てもうすぐ春が来ると思った事、春になって夜道を帰る時、街灯に浮かんだ桜が大変綺麗に見えた事が印象に残りました。4月から、いざ結晶作成や合成実験が始まると、注文した道具や薬品が揃うのに信じられないほど時間がかかり、最初の二ヶ月程は驚きの連続でした。今後やりたい事は沢山あるのですが実際出来る事は限られますので、現実との妥協の落ち着く先は未だ決まっていません。物質開拓の研究は動きだしても状況を見ながら目標を臨機応変に修正していく事が普通ですからその辺の事情も不確定要素となります。

私は大学院を出て間もなく未だ分子研の建物が出来ていない頃、当時ここに残っていた二階建ての木造校舎で開かれた研究会に出席した事があります。その研究会は誕生したばかりの分子性金属についての研究会でした。私が分子研に足を運んだのはそれが最初ですが、今居られる方々の内では非常に早い時期に分子研に足を運んだ一人ではないかと思えます。その研究会は小さな会議でしたが、思い出しますと、分子性伝導体の分野に物理の方が進出し始めた事を示す記念碑的な会議でした。そこに出席されていた物理分野の若かった方々は鹿児島さん、山地さん、住さん、それに学生であった金藤さん達ですが、今は皆、分子物性分野の大家になりました。化学の先輩では東大の近藤さんが一番若いくらいでしたが、一次元金属は当時の物理化学の大きな研究室の主要テーマから外れておりましたので、伝導体を中心に仕事を続けられる方は数える程度でした。私自身はと言えば、その後も昨年まで24年間在職させて戴いた東邦大学で分子性伝導

体の研究を継続していましたが、若い時一緒に仕事をしていた森君（現、東工大）も言う様に、時の流れの忘れ物になって久しく経ちました。その間、分子研はいつも遠い存在でした。昨年度急に今までと全く環境の異なる分子研にやって来た時、適応するために多少の努力をしなければと思いました。しかし、来てみますと長い間閉じ籠っていた人間の緩和時間はひどく長くなっていくという事に気付き、そのうち慣れるだろうとあきらめました。

分子集団動力学部門には秘書の佐藤春菜さんや助教授の宮島さんのグループのメンバーが居りますが、我々の研究室の新メンバーは5名です。助手の藤原君、IMS フェローの坏君、総研大D1の佐藤あかねさん、特別研究生の新井さんと私です。分子研に来る前は分子研の研究単位は（助）教授+助手+技官とっておりました。私のこれまでの主な仕事は新しいタイプの金属性（あるいは超伝導性）分子結晶の物性開拓に関するものです。この仕事は合成、構造、物性測定に跨っていますが、それらを一通りカバーしながら、ある程度の速度で研究を進める必要があります。そのためには仕事の分担が絶対必要とっておりましたので、新任教官は技官の方が採れないと聞いた時はかなりショックでした。しかし一方、助手の公募には多数の若い方が応募して下さい、まずは幸先良くスタート出来ました。私自身は合成を致しませんが東邦大学にいた時から研究室で片腕となってもらった若い人はいつも合成の仕事を選ばれる方を選びました。私自身にとりましては今回は加藤君（現、東大物性研）、内藤君（現、北大理）に続き三代目でしたが、物作りを優先するというプリンシプルは最大限に満たす事が出来たと満足しています。物作りが続いて次の段階で一通りの物性吟味をしないと何事も進まないのが我々の仕事ですが、手分けをしなければ全体として能率良く仕事をする事は出来ません。任期が短いのが心配ですが、IMS フェローを認めて戴いて本当に安心しました。新超伝導体、分子性金属磁性体等の開発、低温（高圧）X線構造研究の緒が付けられましたが、その先、もう少し新しい事が出来ないものかと思案している処です。現在の処、藤原君と新井さんは化学試料室の一室で合成実験をしている事が最も多く、坏君は低温センターや機器センターで物性測定をしている事が多く、佐藤さんは実験棟で結晶成長やX線実験をしている事が多いと言う状況です。皆必要に応じて仕事をオーバーラップさせながらやっています。

新しい物質を作り出す事は化学の本業であると思っておりますが、物を作るとは言いません、私達の分野は有機合成とは違い、出来た物が物性的観点から新鮮である必要があります。しかし、物性研究における物質開拓は評価してもらう事が大変難しい仕事です。例えば、仮にある人が酸化物の伝導体を15年前に研究していたとしましょう。特殊な問題は別として、それまでに余り知られていないような酸化物を混ぜたり焼いたりしている人がいてもそこから高温超伝導の様なものが出現するかもしれないと予め評価される事はまず期待できないでしょう。大抵の物性研究は問題の在処が明確になった未解決の問題について、正確な実験をし（あるいは計算や、理論を

考え), 本質的理解を目指しているという場合が一般的です。こういう場合は取り扱っている問題がトピックスであれば, 質の高いデータが出れば評価されるのは一般的には自然でしょう。従って他には無い大規模で高性能の装置の開発や, ある場合にはそれらを装備する環境を備える事がそのまま仕事の評価に直結すると一般に思われているような気がします。物質開拓は一見その点趣を異にします。有利な条件が備わった研究室から新物質が出てくるとは限らない場合が多いからです。しかし, 出て来た結果がどのように扱われ, また, どのように発展していくかは研究環境の力に依存する処が大きいように思われます。一方, 研究の性格上, 乏しい研究室でも全く手を付けることが出来ないわけではありません。しかし, 特殊な場合を除き, 良い仕事が見い出された場合, 更に発展させ, 完成させる上では広がりを持たなければ大きな限界があります。重要な物質が出現するためにはそれが出現するための欠かせない過程が重要なのだと思いますが, それらは現状では研究としての評価を受けることが難しいものです。誤解を恐れずに言えば, 物性研究は目的物質さえあれば出来ますので, 物性にしか関心が無ければ物質開発のプロセスは重要ではありません。新物質よりも, 質の好い実験データを可能とする「試料」を如何に手に入れるかと言う観点から物質に対する関心や評価が決まるのは自然です。「物質」と見るか「試料」と見るかには大きな隔たりがあります。一方, 物質にしか興味を持たない者にはすぐには役に立たない様に見える高尚な理屈よりも一つの新物質の方が生命力に富むように見えてしまうのではないのでしょうか。この二つを遊離させない事が難しい処ですが, 私達の分野は物性, 物理化学, 錯体化学, 有機化学の研究者が共存する広い分野になりましたので幅広いスペクトルを単一の視野で纏める必要もないのだと思います。現在新たな環境の中で, 新分子性物質開拓を安定的に行うために必要とされる最も重要なものは畢竟何であるのかを考えている処です。

相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 (井上グループ)

分子研 井上 克也

平成8年1月に北里大学理学部から分子研にやってきて研究室を立ちあげてきました。有機合成に力を入れたいと思っていましたので、まずそちらの方からそろえていき、今ではほぼ立ち上がり、せっせと合成を行っています。また磁性測定装置に関しては Quantum Design 社製の MPMS SQUID 磁束計を買っていただき、フル稼働で動いています。あとは人ですが、3月下旬から学振の特別研究員として Abdel Elzaizi 氏がフランスのツールズからやって来て有機合成をしてくれました。彼は無機合成の研究者ですが、驚くほどのスピードで有機ラジカルの合成を行いました。やっと目的の化合物ができてこれからは楽しいというところで3ヶ月の滞在期間が終わってしまい、泣く泣く6月にフランスに戻っていきました。また4月には東大物性研からドクターを取ったばかりの細越裕子さんが来てくれました。彼女は物性研の木下實先生の所で大学院時代を過ごし、主に磁性物性の研究を行っています。大学院では新規の有機化合物を合成して物性測定を行っていくという研究をしており、有機合成の腕もあります。彼女は6月から助手に採用されましたので現在も研究室で立ち上げ、人集め等で手伝ってもらっています。現在または将来分子研で行っていこうと思っている研究テーマを以下に書きます。

1. 全体の研究指向

○有機合成を生かした研究。

大学時代、大学院時代ともに有機合成を行ってきましたので、それを生かしていきたい。物性研究ではこれからは(も?)新しい分子を作り出す必要があると信じている。

○物性がらみ。

大学院時代からこれまで磁性体の研究をしてきました。これまではもっぱら局在スピンの単純強磁性を対象に取り組んできましたが、これからはもっとバラエティーを持たせていきたいと思っています。磁性を中心に、伝導性、光物性、またそれらの絡み合った問題などに広く積極的に取り組みたいと思っています。それから、結晶全体のバルクとしての性質の他に、分子サイズの物性(超常磁性、スピングラス、単磁区分子等)にも興味を持っています。

○合成とその物性評価。

物質開発の分野では、なんと言ってもまず、モノづくりが先行します。とにかく合成しないこ

とには何も始まりません。だから合成には力をいれます。そのうえで、せっかく作ったモノの評価をしていかなければいけません。その物質の何が面白いのか、その評価手段もこれから拡充整備していくつもりです。

2. 研究テーマ

○有機ラジカルと遷移金属の自己集合集積化による高次元分子磁石の開発および物性研究。

有機ラジカルを配位子とする様々な次元性の遷移金属錯体を構築する。

磁性および構造がクリアな磁性体が得られるため、物性研究の面からも面白い。分子間の相互作用に配位結合を用いるため比較的構造設計が容易。まだまだ転移温度の上昇が見込まれる。また、ラジカルと金属の間の相互作用はその配位状態に依存するので、これを光、圧力、温度等の外部場で変化させることも考えている。新しい有機ラジカル配位子の開拓も進めていく。

○新規強磁性有機結晶の探索

新規有機ラジカルを合成して、結晶中での磁気相互作用を明らかにする。

有機ラジカル結晶における分子間磁気相互作用はまだ不明な点が多い。何か新しいことが見つかるかも知れない。また、有機物のような磁気異方性の小さい系はスピンの量子性という観点から興味を持たれている。強磁性、反強磁性相互作用の共存する新しい系の構築とその基底状態の評価も合わせて行っていく。

○高圧磁性の研究

SQUID 用の高圧セルを作ったので主に有機ラジカル結晶の高圧磁性を研究する。

SQUID を磁気測定に使えるため他の測定方法ではできない高感度の測定が可能。加圧によって相互作用を強くすることができる。また構造の変化を伴う相転移では圧力をかけることにより相転移を抑えられるケースがある。最近見つけた例では、ガルピノキシルの結晶は高温相では分子間に強い強磁性的相互作用が働くが、常圧下では約 90K でダイマー化を起こし反磁性に相転移をする。一方 7Kbar の圧力下では相転移を起こさず、高温相のまま低温に持っていくことができた。残念ながら分子間の強磁性相互作用は一次元的だったので、1.8K までは強磁性体への相転移を起こさなかった。

○自由電子の単離

ケージ化合物の中で自由電子を単離してみたい。

液体アンモニア中では自由電子は比較的安定に存在するので単離できないことはないと考えている。自由電子の磁性については興味を持たれる。

まだまだ、これから新しいテーマを探していこうと思っています。人をあっと言わせるような面白い機能を持った物質が作れないか、といつも考えています。合成にしる測定にしる、積極的

に新しい方法を取り入れて行きたいと思っています。分子研の皆様には色々お世話になることがあると思いますが、よろしくお願ひ致します。

機器センター

分子研 猿 倉 信 彦

今年の2月に機器センターの一角にスタートした本研究グループでは、新レーザー光源の開発とその新しい応用の開拓を研究テーマとしている。1916年に誘導放出がEinsteinにより提唱され、1954年にTownesがアンモニアでメーザーを実現し、1960年にMaimanがルビーレーザーの発振を成功してすでに40年近くがすぎている。その間に、核融合研究用の大出力レーザーから光通信用の様々なレーザーが開発されその性能や装置あるいは部品としての利便性は日々めざましく進歩している。

理学応用を考える上でのレーザー光の特徴は、時間、波長（エネルギー）、空間領域でのコヒーレンスを高精度に制御できる光である点にあり、言い換えればレーザーを上手にデザインすれば、数多くの光子を非常に限られた空間、時間、波長（エネルギー）に集中する事が出来る。この特徴を分光学に生かせば、フェムト秒領域での物質の過渡的な振る舞いの観測や、ミリエレクトロンボルト未満の高い分解能での物質のエネルギー構造の観測なども可能となる。すなわち、レーザーにより時間あるいはエネルギー領域での顕微鏡を作ることが出来るわけである。より優れたあるいは全く新しいレーザーをこの様な研究に用いることにより、今まで誰も手にしたことの無い知見をかちえることが期待される。

より具体的には、近赤外領域のチタンサファイアレーザーの様にエレガントで新しい固体レーザー媒質などを用いた全固体紫外波長可変レーザー^(1,2)や遠赤外超短パルスレーザーの開発⁽³⁾とその物質科学への応用を当面手がける予定である。

現在のところ人員は、猿倉、大竹秀幸助手、劉振林、和泉田真司 総研大生の4人で、研究室の立ち上げに奮闘している。

参考文献

1. N. Sarukura, Z. Liu, Y. Segawa, V. V. Semashko, A. K. Naumov, S. L. Korableva, R. Y. Abdulsabirov, and M. A. Dubinskii, "Direct and passive sub-nanosecond-pulse train generation from a self-injection-seeded ultraviolet solid-state laser", *Opt. Lett.* 20, 599-601, (1995).
2. N. Sarukura, Z. Liu, Y. Segawa, V. V. Semashko, A. K. Naumov, S. L. Korableva, R. Y. Abdulsabirov, M. A. Dubinskii "Ultraviolet sub-nanosecond pulse train generation from an all-solid-state Ce: LiCAF laser" *Appl. Phys. Lett.* 67, 602-604 (1995).

3. N. Sarukura, Z. Liu, H. Ohtake, S. Izumida, T. Yamanaka, Y. Segawa, T. Itatani, T. Sugaya, T. Nakagawa, and Y. Sugiyama "All-solid-state, THz-radiation source using a saturable Bragg reflector in a femtosecond mode-locked laser", in preparation for Opt. Lett.

流動研究部門紹介

分子クラスター部門 (西グループ)

分子研 西 信 之

分子科学研究所の流動部門は、有機構造活性研究部門のように有機化学基礎研究センターの創設につながったり、錯体合成研究部門のように関連分野としての錯体科学分野を積極的にバックアップするという分子科学周辺分野へのサポートを目的として導入されてきた。また、界面分子科学研究部門は、触媒研究分野と分子科学分野との橋架けを行うと同時に、さらに分子科学研究の重要な主題にも取り組んできている。分子クラスター研究部門は、分子科学にあって新しい流れを作りつつあるクラスター科学研究を一層推進するために、大学において活躍しているこの分野の研究者を分子科学研究所に招へいし、2年間研究に専念する機会を設けるということで平成8年5月に設立された。この流動部門の存在意義の一つとしては、根幹となる各研究系とそれぞれに深い学問的な関わりがあり、系を超えた広いクラスター科学分野からの研究者招へいが可能であることが重要であろう。

大学では、ここ5年間、教養部解体や大学院重点化に伴ってその実体が大きく変化しつつあり、研究とともに教育に対する積極的な取り組みが求められている。大学院の学生数は学部と同等近くとなり、設備の充実は改善しつつあるが、研究室はますます狭く感じられ、スタッフは学生の指導に追われ、自ら装置にかじりついて研究を行う時間の確保が困難になってきている。このような状況にあって、籍を2年間ではあるが研究所に移し、講義や実験指導を離れ、自ら研究に没頭できる機会を持てるのはなんと素晴らしいことであろうか。特に、学生にマシンタイムを奪われ欲求不満気味の助手諸君にとっては、研究者として大きく成長していくためには重要な2年間となるであろう。この流動制度の導入は、大学の研究者にとっては多少の犠牲はあるが、結果的には大きなプラスの効果をもたらすはずである。犠牲があるというのは、もう一面の重要な問題であるのであえて指摘しなければならない。重点化に伴い、大学では講座構成が大講座になったり、良くて教授1、助教授1、助手1という構成が普通になってきている。教授と助手が流動で出ていくと、残った助教授が研究室を切り盛りし、教授の講義の数コマ分と助手が担当していた学生実験とを自分のノルマに加えて負担しなければならないのである。これをこなせる助教授は教授よりはるかに実力があるに違いない。

さて、新設の分子クラスター部門には、九州大学から、教授（筆者）と助手の大橋和彦君が、

東京大学から永田敬助教授が赴任し、永田助教授のグループの助手として朱雷氏が着任している。西グループには、博士後期課程2年の井口佳哉君が九州大学から常駐参加し、永田グループと共に日夜研究に専念している。しばしば、大学から修士課程の学生が何人か講義の合間をみて実験に参加している。眺めのよい4階の実験室には、中央に2組のレーザーシステムが設置されその両端に1組ずつそれぞれのグループの真空装置が置かれ、大きな架台に載った赤外レーザーは架台ごと90度あるいは180度回転させてタイムシェアリングで共通に使用されている。このような使い方は、レーザー開発センターがスタートした場合、各レーザービームラインに2~3種類の装置をつなぐことによって高価なレーザーを有効に活用し、研究所内外での共同利用を活性化するために積極的に導入すべきではないかと思う。複数のグループが共通の場に集うことによって、技術的なノウハウを交換したり学問上の議論を自由に(時には激しく)交わすことができるなど、多くのメリットが生まれるであろう。また、レーザーはある程度は日常的に運転していた方が故障も少なく、共通であれば、バージョンアップにもすぐに対応できるであろう。少ない人数の1研究室が、幾つもの同じようなレーザーを占有できても、これを維持更新するのは大変なことであり、そのようなお金があるのなら、実験に必要な測定装置の方にまわした方が効果的であろう。共通と言ってもある程度の使用者の枠を設定して、それぞれの研究計画に遅れがでないような調整が必要であることは言うまでもない。共同利用研究所としても、このような研究室の枠を少なくとも光源面では取り除いた運営が望まれる。20人も人間が数台のレーザーに張り付いている大学の現状からすれば、今の分子研の状況は効率が問題である。そういう訳で、2つのグループは共存共栄をめざして仲良くやっている。

さて、流動期間中のテーマであるが、二つのグループではっきりと違っている点は、西グループは陽イオンクラスターを、永田グループは陰イオンクラスターを扱っているということであろう。もっとも、陰イオンクラスターの光電子分光は中性クラスターの基底状態の情報を含んでいる訳であるが、構造的電子的な性質は、両者で全く異なっている。これは、陽電荷は分子または分子対(不活性原子では3原子)に局在化しやすく広い空間にわたる電荷移動に時間がかかるのに対して、陰イオンの準安定な電子は非局在化した広い空間を動き回り、軌道がクラスター全体に及んでいる場合がめずらしくない。前者は、フレンケル的であり、後者はワーニヤ的とも言えるだろうか、関与する電子軌道が原子価的か、それともリユードベリ的かの違いと言った方が良いだろうか。これは、二人のグループリーダーの性格とも通じるところがあるかもしれない。残念なことに、陽イオンになりやすい分子の集団と、陰イオンになりやすい分子の集団とは、必ずしも共通でないことが多い。言うまでもないが、イオン化ポテンシャルの低い分子は往々にして電子親和力が弱い。しかし、その中間的性格の「分子」にはあまり興味がない。どちらかの性格が強い「分子」が面白い。これは人間の場合にもあてはまるかもしれない。チームを組むとき

には、意図的に様々な背景、実力、性格をもった人間を集めておくと、それぞれの立場と役割がはっきりして皆がやりがいをもってテーマに取り組むようになるし、この組み合わせを更に定期的に変えていくと活性状態が持続するということを、会社の人事担当の人が言っていた。どちらもはっきりしない人間の採用はしないそうである。本題に戻って、更に具体的なプロジェクトの内容について述べよう。

陽イオンと中性分子の相互作用は主として電荷移動と静電力によるが、中性分子の HOMO 軌道の電子と陽イオンの SOMO 軌道のホールとの相互作用である。それぞれの波動関数の位相がそろっている時は結合性となり、位相が逆の時は反結合性となる。これは、励起状態なのであまり認識されていない。原子から分子が出来るときの σ 結合と同じであるが、安定化エネルギーを与える共鳴相互作用エネルギー (H' : 分子の場合の β 積分) が、分子間では小さいため $2H'$ が赤外エネルギー領域にはいつてくる。即ち、分子内の $\sigma^* \leftarrow \sigma$ 遷移は多くの場合に真空紫外領域に現れるが、分子間のそれは赤外から遠赤外領域に現れるはずである。分子と違って分子間結合に関わる電子の数は(縮重した特殊な系を除くと)ほぼ 1 個であり他の電子対はコアとして存在すると考えられるので、ややこしい配置間相互作用が無いに等しい。電子遷移エネルギーは良い近似で $2H'$ を与えるのである。相互作用している 2 種の分子のイオン化ポテンシャルが異なる系では若干複雑になる。同種分子間の場合は、ベンゼン誘導体について既に実験的に確認している。ベンゼンだけでなく、様々なイオンと中性分子の組み合わせに対して測定が可能であり、分光学的に相互作用エネルギーが見積もられると考えている。相互作用が弱くなると遷移強度も急激に弱くなり実験的な問題が生じるが、とにかく系統的に調べる必要があるであろう。このような測定は赤外レーザーと長光路オントラップセルを用いた光解離分光法を用いて初めて可能となる。このあまりにも単純な思考に、ご批判ご助言を頂きたい。以上のモデルが正しければ、純液体中でも電荷はクラスターと同様分子対に局在化しているはずである。これについては、吉原グループと共同でフェムト秒の過渡吸収測定実験を行い、これを証明するような結果を得ている。さらに、ヒドロニウムイオンクラスターなどの水素結合クラスターにおけるプロトン移動機構にも挑戦したい。2 年間でどこまでやれるかが問題であるが、少し長いスパンで流動の成果を見て頂きたいと思っている。

ここで流動部門の利点も宣伝しておかないといけな。2 年後には大学に帰るのであるから、大学の研究室運営には、籍が移ったといっても流動期間中も当然責任を伴う。つまり、大学と分子研と両方の掛け持ちという状況になる。研究に最適の新しい空間と人間環境、そして流動促進経費などの経済的なサポートを利用し、新しい発展を築く絶好のチャンスである。是非、全国の研究者の皆さんが積極的にこの機会を利用され、新しい研究展開にチャレンジされるようお勧めしたい。

相関領域研究系分子クラスター研究部門

(永田グループ)

分子研 永 田 敬

分子研に着任して四ヶ月になる。まだ四ヶ月と言うべきかもしれないが、私の場合には既に任期の六分の一を過ごしたことになる。そこで、研究グループの現状を簡単に紹介させて頂く。

構成員の紹介

現在、研究グループの構成員は私を含めて3名である。朱 雷 (Lei Zhu) 助手は中国復旦 (Fudan) 大学物理学科の準教授でレーザー物理学が専門である。最近では C_{60} の光学的性質に関する研究などクラスターに関連した分野で仕事を行っており、サバティカルの形で当部門に参加している。佐伯盛久君は東京大学大学院の博士課程に在学中であり、特別研究学生として在籍している。

研究テーマについて

部門の名称からもお判りのように、「分子クラスター」と呼ばれる物質系が研究の対象である。分子クラスターは、数個から数百個の分子が弱い分子間力によって会合した気相の分子集合体である。言わば、凝縮相の一部を真空中に切り出したミクロスコピックな系と見做せる。しかし、その性質を詳しく調べてみると、凝縮相とはかなり異なっている。単にサイズが小さいというだけでなく、分子クラスターと凝縮相の間には本質的な差異が存在する。すなわち「Small can be different」なのである。

我々は、特に、余剰な電子を束縛した分子クラスター（分子クラスターの負イオン）に着目している。一般に、閉殻の電子構造を持つ孤立分子の電子親和力は負である。しかし、それらの分子が会合してクラスターになると電子束縛状態を形成することがある。これまでの研究から、ある種の分子クラスター負イオンは、凝縮相中の負イオン種や溶媒和電子とは違ったメカニズムで余剰電子を束縛していることが明らかになってきた。このような電子束縛状態は、少数の分子が会合することによってのみ形成が可能となる集合体特有の電子状態である。我々の目的は、①分子クラスター負イオンの幾何構造・電子構造を分光学的に調べ、電子束縛のメカニズムを明らかにすること、②電子束縛状態に特有なダイナミクス（電子移動、エネルギー緩和、反応など）を

見いだすことである。

分子研は機器センターを含め、種々のレーザー設備が充実している。そこで、クラスターイオンビームと赤外レーザーを組み合わせて、分子クラスター負イオンの振動分光にトライしている。突貫工事の末、クラスター装置の製作・調整を終え、この二カ月は主力となる単一縦モード共振器を備えた波長可変光パラメトリック発振器を調整しているが、なかなか一筋縄ではいかない。この調整が今後の研究の進展を左右しそうである。

むすび

東京にも研究室を持っているため(家族がいるため?),毎週、東京と岡崎を往復する生活を送っている。存在比は岡崎:東京=4:3である。当初は週に二回、旅行気分で行き先に乗るのが嬉しかったが、今では大分飽きてきて"通勤時間"はもっぱら睡眠不足の解消に使っている。分子研で何より良いのは雑用がないことである。この点では、流動部門に呼んで下さった伊藤所長に感謝している。

分子クラスター負イオンの構造に関する研究テーマは、数年前から岩田末廣先生と共同で ab initio 計算からもアプローチしている問題である。岩田先生の後を追って分子研にやって来た訳ではないが、数10m離れた所に居られるのは心強い。(但し、以前に較べて極端にお忙しいようだが.....)

流動部門ということもあって、着任にあたっては管理局の方々にいろいろとご面倒をお掛けした。また、これまで渡辺先生を始めとする関連領域研究系の皆さんには学問を離れてお世話になっている。紙面を借りてお礼申し上げたい。

錯体化学実験施設錯体合成研究部門

(芳賀グループ)

分子研 芳賀 正明

平成7年4月から2年間の予定で、前任の吉川先生の後を受けて三重大より赴任してきました。分子研に赴任するにあたり、三重大教育学部の木下学部長、化学教室の先生方、分子研の伊藤所長、田中（晃）施設長にはいろいろな面で大変お世話になりました。はじめにお礼を申し上げたいと思います。先生方の努力なしにはここで研究を始めることもできなかったと思っています。また、ゼロからの研究室の立ち上げの支援してくれたのは大阪大理からの流動助手である文珠四郎秀昭君、IMS フェローの原田和正君、それと三重大から一緒についてきてくれた学生の村田、加藤、留学生のフセイン君たちで彼らには本当に感謝しています。

これまで何をやってきたの？

錯体研究を行なっている研究者はだれでも各人自分の好みの金属イオンをもっているものです。それはコバルトであったり、亜鉛であったり、白金であったりします。私の場合にはルテニウムです。これまで周期表の第Ⅷ族元素（現在では7～9族元素）、その中でも特に貴金属に属するイリジウム、ロジウム、そしてルテニウムを学生時代以来取り扱ってきました。卒業研究ではバスカ錯体と言われるイリジウム錯体とエチレンなどとの相互作用を研究しました。これら第Ⅷ族元素の錯体は触媒活性があり、また光励起状態からの発光が見られたり、酸化還元反応においても興味ある物性を示します。決定的であったのは、博士課程を終える頃に Whitten と Meyer による長鎖アルキル基を有するルテニウム錯体による水の光分解が報告された論文に出会ってからです。腰を据えてルテニウム錯体を研究するにつれ、その錯体のもつ光機能と電子移動の面白さに引かれていきました。酸化数の異なる金属イオンを含む複数個の金属が集まった多核錯体を混合原子価錯体といいます。その中で光誘起原子価間遷移 (photoinduced intervalence charge transfer transition, IT 帯) は近赤外領域に特徴的な吸収を示します。ルテニウム錯体を研究していくうちにジベンズイミダゾレート架橋配位子をもつ混合原子価錯体が大きな強度をもつ IT 帯を示すことを見いだしました。これ以来、ベンズイミダゾールを配位子として使っています。ベンズイミダゾール配位子のイミノ基のプロトンはルテニウム錯体の酸化還元機能と共役可能であり、いくつかの興味ある系に発展してきています。教育学部という教育への比重の大きい学部で学生も毎年1-2人という状態で研究を続けるには忍耐がいります。この間に York

大学の Lever 教授のもとで博士研究員として、オーストラリア Deakin 大学で Bond 教授（現在は Monash 大学）のもとで文部省在外研究員として過ごすことができたのは研究の活力を保つのに大いに役立ちました。ルテニウムカテコール錯体およびルテニウム錯体の電気化学についてこの間に研究でき、プロトンと酸化還元について考える時間がありました。プロトンは電子移動との共役という点では、光合成膜での ATP 生産に重要な役割を演じています。このようなプロトンと電子移動の共役系をルテニウム錯体を用いた人工系で再現できないか？再現するためにはどのような細工をすればいいのか？膜は必要か？などいくつかの点で問題点をあげ、それらを含めて広範に錯体膜を研究するプロジェクトを分子研で行なうことにしました。文献を調べていくうちに金属錯体を表面に並べる研究は無機-有機複合材料としての層間化合物の化学、電極表面への簡単な分子の化学吸着や金属イオンと配位子の組み合わせによる超分子結晶の研究が進んでいますが、その他の基礎的研究はほとんどなされていないことがわかってきました。

いまの研究テーマは表面錯体化学

現在我々のグループでは、光、電子機能性を有する超分子錯体の化学および溶液錯体化学を基礎にした「表面錯体化学」とそこから得られる表面分子集合体の分子配向およびその中でのエネルギー変換および情報変換に関する機能発現を研究の目的として、次の研究課題に取り組んでいます。

(A) 溶液エピタキシ法の探索

—固体基板上に固定されたアンカー基への錯形成および LB 膜による錯体層成長。

固体表面上にセルフアセンブリーで固定化されたアンカー基への錯形成反応を利用した溶液エピタキシ法の可能性を探りたいと考えています。たとえば、基板として金の場合にはアンカー部の片方にはチオール基を、ガラスの場合にはシラン基を用いて基板上に固定被覆し配位子基としてはポリピリジン基およびホスフォネート基を用い、これらの配位子基に Ru^{2+} および Zr^{4+} などの金属イオンあるいは反応性金属クラスターを結合させてその表面構造を種々の物理化学的手法 (XPS, 電気化学, AFM 等) により検討したい。配列制御された二次元構造をもつかどうかの一つの評価基準になる。二次元構造をもつ場合には、さらにその上に錯形成反応により層構造を作る。また、ルテニウムおよびオスミウムイオンの場合には水や DMF などの配位子の含窒素架橋基による置換反応によって錯形成させて多層化を検討したい。それらの光および電子機能について検討し、電子移動のベクトル化が可能であるかどうか検討したい。

(B) 光誘起プロトンポンプ系の構築

光合成を行うチラコイド膜では光による電荷分離とそれに伴うプロトン濃度勾配ができます。また、バクテリオロドプシンなどでもプロトンポンプ現象が見られます。このように、生体における光プロトンポンプにならった系を、いままで我々が行ってきたプロトンスイッチングを行う

錯体系を使い、実現したいと考えています。プロトン解離可能な配位子 L-H をもつ $\text{Ru}(\text{bpy})_2(\text{L-H})$ 錯体は Ru の酸化状態が Ru(II) から Ru(III) になるとその pKa が 7 から 1 程度に小さくなり、プロトン解離を起こします。この現象を利用して光誘起電子移動とこのプロトン解離反応とをカップリングさせることを考えています。プロトンの動きと電荷の動きにともなう光起電力を情報変換として利用していくことを検討したいと考えている。

以上、2つの研究テーマは従来行ってきた架橋配位子による多核錯体合成の手法を利用して、界面で多層超格子構造を作るための新しい分子配列法であり、溶液エピタキシ法とも呼べるものであり、この手法を確立してゆきたいと考えています。このような配位構造および層状構造を制御しながら配列制御された表面錯体アレイ系を作り、分子内電子移動を異相界面で行なう光集光系やスイッチ機能を有する系を構築するためには分子設計がなかなか大変です。グループの皆で議論しながら適当な配位子系の探索を行なっているところです。分子間相互作用の制御や表面置換反応の制御など基本的な解決すべき問題を多く含んでおり、流動期間中にそれらの点の一つでも明らかにできればと考えています。

研究室の構成はいま一。

助手の文珠一郎君は表面分析のプロ。持ち前の緻密な実験で測定系を組み上げ、LB膜の評価および金およびシリコン上への錯体の配向を目指してアンカー基の効果や別の金属錯体の状態について XPS などの表面分析測定を続けています。異相界面での新しいその場観察法としての光電子分光法の開拓を目指しています。表面への配列に対する的確な指摘は錯体プロパーのものにとって大変有りがたい。IMS フェローの原田君は X線結晶解析が得意で、固体中で規則正しく並んだ格子を見てきているので、これを人工的に界面で作るとしたときの配列格子のサイズと用いている分子のサイズなどに注意を払ってくれており、貴重な存在です。忍耐力のある点は魚釣りの待ちの心からきているのかもしれませんが。学生では、三重大から分子研についてきてくれた特別研究学生の村田さんは紅一点の存在で彼女の笑顔が研究室に花を添えてくれています。環状架橋配位子を現在合成中。バングラデシュからの留学生のフセイン君は無口だが、もくもくと実験するタイプ。金表面への固定化配位子を現在合成中です。最後に加藤君は LB 膜法によるルテニウム錯体の配列制御を手掛けています。シティボーイの彼が研究室の種々の企画、特に研究室旅行や飲み会等の世話を引き受けてくれています。

分子研では研究を持続するために学生、研究員を確保するのが大きな課題の一つです。来年度の博士研究員の費用を確保するのに機会があるごとに申請書を出し続けているこの頃です。

最後に 2 年間という短い期間ですが、分子研の皆さまにはいろいろとお世話になると思います。どうかよろしくお願ひします。

錯体化学実験施設錯体合成研究部門 (櫻井グループ)

分子研 櫻井 武

平成8年4月に流動部門に赴任してから5カ月がたち、ようやくスムーズに分子研の櫻井ですと挨拶できるようになったところです。9年前に大阪大学から金沢大学に移った頃も、しばらく混乱していたことを思い出します。

金沢大学では薬学部、教養部、自然科学研究科生命科学専攻(博士課程)、理学研究科化学専攻(修士課程)を担当していました。あちこちに所属するのは、研究の独立性を保つには都合のいい反面、学生諸君が混成部隊であること、送りだし側の方々と良好な関係を維持している必要があることなどそれなりの絶え間ない努力が必要です。

研究の独立性と言えば、大阪大学の助手時代から全く好きなように研究させてもらってきたので、その点では大変幸せなのですが、“ひと”ではずっと苦勞しております。自分のスタッフを持つ甲斐性がないからと言ってしまえばそれまでですが、流動部門がそれ自体抱える問題点でもあり、流動部門が将来にわたって、健全な形で存続可能かどうかを左右するポイントの一つであるように思います。とはいえ、専門の異なる武田定氏(大阪大学理学部助手、この文章が印刷されるころは群馬大学工学部助教授へ栄転されています)にはSQUIDを利用した実験(後述)の立ち上げで御尽力をいただきましたし、同じ流動部門の芳賀先生、文珠一郎先生にも日常的にお世話になっており、多国籍軍のメリットも十分生かすことができます。

現在、研究チームの学生メンバーは櫻井宣彦君(金沢大学大学院自然科学研究科生命科学専攻D2)、黄紅衛君(同D1、北京医科大学からの留学生)、原功君(金沢大学大学院理学研究科M1)、松本宏紀君(名古屋大学理学部化学科山内研4年)です。引越し当時、新婚の櫻井君は京都から新幹線定期で岡崎に通ってくるという頑張りをみせてくれました。黄君は今年来日したばかりのところを、まだ訳のわからないうちに、引越ししてもらいました。原君には最初から岡崎へ引越しするということを納得してもらいました(金沢から岡崎に来るのはいやだということで逃走した学生もいます)。+-差し引いて流動部門が学生レベルでも十分魅力的であること、そしてそのことが全国の学生に知られていることが必要でしょう。受託制度がある以上、特別研究学生も、総研大学生が受けられるのと同じ便宜を受けられるというのは最低限のことで、この点を文部省に働き掛けられないのでしょうか。(愚痴が多くて申し訳ないです。これは私が年を

取った証拠ではありません。ただ、口でストレスを発散させているだけです)。松本君にはただ一人隔離された所へ来てもらうことになり、ちよっぴり気の毒なような気がしますが、違う世界を見ることができてよかったと思っていてくれれば結果オーライです。同じ流動部門の芳賀先生のグループとは合同の雑誌会をやっております。また、居室の使用も共同にしており、セクショナルリズムに走らなかったことはよい選択だったようです。

研究室の立ち上げには2カ月くらいかかりました。引っ越し荷作りなども入れるとさらに1カ月要しています。研究ではもっぱら生もの(タンパク質、酵素)を扱っていますので、化学屋と生化学屋の両方の道具が必要で、結局これらはすべて金沢から持ち込みました。もともと共同で購入した備品も2年間という約束で相当数移管させてもらいましたので、金沢大学には大きな借りを残してきたことになります。よく移管させてくれたと思うものもあります。また、すでに来上がっている研究体制をわざわざ解体してくるというのは如何にも効率の悪いことで、腰を落ち着けて研究するには、2年間というのは、短すぎるように感じます。

それでは研究テーマですが、金属タンパク質、金属酵素の生物無機化学です。私どもは日本におけるこの領域の草分けである中原昭次先生の分派グループの一つで、生物無機化学という言葉がまだ市民権を得ていない時代から、生体系における金属イオンにスポットを当てて研究してきました。研究をはじめた当初はモデル研究からスタートしましたが、数年で、限界を感じて、タンパク自身を研究対象とするようになりました。このことは我々の研究のセールスポイントになっている反面、錯体化学の仲間からさえ、何度か、どこに論文を出しているんですかと質問されたことがあります。我々の研究も、現時点での化学の守備範囲からある程度はみ出していることもありますが、ある意味で、これは非常にまずいことであることに気が付いたころにはポイントオブノーリターンを既に通り越していました。現在の研究テーマは次の通りです。

1 マルチ銅オキシダーゼ(ラッカーゼ(うるし)、アスコルビン酸オキシダーゼ(キュウリ)、セルロプラスミン(ヒト、ウシ)、ビリルビンオキシダーゼ(微生物))の活性中心と反応に関する研究。特に、タイプ2, 3銅によって構成される三核銅クラスターの構造と磁氣的性質および反応のターンオーバーに係る酸素の結合と4電子還元に興味をもっており、ESR, CD, SQUIDなどを主たる武器にしています。

2 ブルー銅タンパク質(プラストシアニン、プランタシアニン、アズリン、シュードアズリン、ウメシアニン、ステラシアニン)の電子移動反応。以前は活性中心の構造を分光学的および磁氣的に研究していましたが、最近では電気化学で電子移動反応と分子認識の問題にアプローチしています。ただし、電気化学の限界はすでに見てしまったような気がしますので、今後の展開をどうしようかと思案しているところです。

3 NOリダクターゼの単離、キャラクタリゼーションおよび遺伝子クローニング。NOリダ

クターゼは脱窒過程に関与する膜タンパクで、しかもチトクロム *bc* コンプレックスになっています。正直言って膜タンパクがこんなに難しいとは思いませんでした。生化学のプロでもなかなか手を出してこない対象をターゲットにしてしまい、若干の後悔もありますが、後には引けず、中央突破するしかないと自分に言い聞かせています。

4 プロモペルオキシダーゼの単離とキャラクターゼーション。能登特産のツルアラメ（春先のみ食べられる）という褐藻類をソースとしています。当初、V含有タンパクと信じて研究を始めましたが、どうやら、遷移金属イオンは含まれていないようで、錯体化学の場では発表不可能なようです。ではどうやって、遷移金属を使わず、Brが活性化できるのか、増々疑問が持たれます。

これ以外にも興味は色々あり、それらは自分の頭の中ではつながってはいるのですが、見掛け上は仕事が発散しつつあります。テーマによっては、今始めていないと、将来もやれなくなるかもしれないという危惧をしていることもあるのですが、現状では手一杯というところです。現在進行中の研究そのものはこれまでの研究の延長線上にあります。タンパクのSQUIDや遺伝子レベルの研究など、これまで構想のみであった研究も分子研でスタートすることが出来ました。望むらくは、分子研滞在中に、今後10年くらい喜んで付きあうことの出来る新たなテーマを探しだしたいと思っています。

COE の条件

名古屋大学工学部 正 島 宏 祐

私が面接のために分子研に最初に訪れたのは17年半も前のことである。当時からまだ分子研にいる方は数人となった。それほど、昔のことであり、またそれほど分子研の人事流動は活発である。名古屋大学に赴任してからもう3年弱になるが、その間に変わった人員は多く、教官の人事に関する限り5年もすると全く見知らぬ研究所に来たような印象をもつのは私だけではないであろう。このように高い人事の流動性は、大学にはない。人事の流動性を高めるのに分子研が果たした役割は、極めて大きい。その影響範囲は、分子科学の分野だけではない。多くの大学で、閉鎖的な人事選考法から脱却して、公募による選考法を採用してきた。

分子研が人事の流動性を高める役割を果たせたのは、その高い研究水準にあった。また、その高い研究水準は、大学と比べると豊富な研究費と整えられた技術課の支援体制であったと思う。有能な人材が豊かな研究費のもとに、大学では手が出せない研究を始めることができた。そのようにして若い研究者が育ち、大学等に出ていった。人事の流動性は、人事公募をしたことと、内部昇格禁止の事項をかたくなに守ったために若い研究者が外に出て行かざるを得なかったこと等の理由が加わった。その結果、大学で通常となっている定年を迎える助手が残ることはないし、今後もないであろう。このような人的な面での分子研のポテンシャルを十二分に生かし、突出した研究所であり続けるためには、大学の研究者が羨む研究環境をもつことが必要である。分子研のOBとして、文部省の直轄研究所として分子研が、世界の誰もが羨むような夢のような研究環境を持った研究所になるために、次のようなことがかなえられることを切に希望する。

- 1) 定員を減らしてでも一研究グループが使える研究費を増額すること。
- 2) 予算の自由な支出を可能とすること。
- 3) 研究者が研究に割ける時間を増やすこと。

これらの条件は、研究費の面で現在以上のサポートによって解決される筈である。その理由を述べたい。

分子研は、研究条件の劣悪な大学のそれと比較すると、わが国の中では最も素晴らしい研究環境を提供している数少ない研究所の一つであるが、真に世界第一級の研究環境を整えているかという点はまだである。所員が研究の面でできる努力は常に続けなければならないし既にされている。これからさらに飛躍するためには、分子研から外への働きかけと共に外からの援助が必要

であろう。

分子研の予算の話をするとき、ほとんど誰もが大学では金がかかっていないと言う。ところが、研究や教育にかかる費用はいわゆる実際に使える研究費（教官校費、科研費、その他）だけではない。その議論において人件費は全く見過ごされている。もちろん、教育のために人は必要である。ところが、教授1、助教授1、助手2、技官1名よりなる国立大学の1講座の人件費はゆうに5千万円に達することがある。そこに、500万円の講座費では余りにも少ない。このような投資の仕方は少なくともアメリカではやらないし、ドイツでもやっていない。最近、わが国でもそれを認識しているので自由に使える特別経費を増やそうという傾向になっている。

そこで、分子研のように研究だけで生きていく研究所では、こじんまりとした1研究グループ当たり5000万円程度の年間研究費は必要である。ある時は設備備品を購入する費用も必要であるが、それが揃うとそれを使う研究者が必要となる。博士研究員一人雇うと年間500万円程度は必要となる。したがって、グループ構成員の人件費も入れると1研究グループ当たり7500万円程度は必要である。分子研では現在、教授と助教授がそれぞれ独立した1部門2研究グループ制を採っている。その場合には、1部門1億5千万円が必要となる計算である。分子研の研究グループ数（40グループ）を考慮すると、人件費も加えて、実際に使える予算として30億円が必要となる。この額には、共同利用研究所として所が備えている電子計算機等にかかる費用を考慮していない。建物等にかかる設備費と光熱水料等は入れていないつもりである。将来的には、むしろ人を減らしても1研究グループ当たりの研究費が十分となるように努力すべきではないだろうか。

次に、予算支出の自由度を増すことを進めていただきたい。既に述べたが、装置を購入する際にはその費用が必要であり、またそれを使った研究をするには研究者が必要なこともある。最も理想的には、旅費、物件費、外国人研究員、設備整備費等の垣根を無くすことである。それがどうしても出来ないならば、大雑把な目標を設け、ある程度の融通性を許すことにしてほしいものである。これは、国家予算の執行上困難ではあろうが、管理局の方々にも努力をしていただいて、これを是非とも実現していただきたい。その結果、国からの予算を数倍も価値ある働きをさせることができ、研究の実は画期的に増すであろう。

第三に、所員特にグループリーダーの実質的な研究時間を増やすように努力すべきであろう。分子研は共同利用研究所であるが、そのミッションはユニークな研究の芽を育てることである。研究者が活発に研究できていれば、水が高いところから低いところに流れるように、国の内外から研究者は集まってくる来る筈である。これまで二国間研究協力ということで、分子研が中心となって多くの国際研究集会をもってきた。協力相手先が研究水準の高い場合には、討論を重ねることによって充分足しになるが、そうでない場合には相当な福祉精神がなければ大きな負担にな

る。数人の外国人研究者を招へいする研究会の開催の準備には、研究者の一月程度の時間はゆうに食われることがある。一日の内に数時間の研究時間を捻出するのに苦労している先生方が、年に10%近く時間を取られるのは質の高い研究水準を維持するという観点からはほとんど致命的である。特に、海外研究者との交渉を任せられる秘書がない（または育てない）現状では、国際研究集会は持たない方がよい。国内の研究者のための分子研研究会も同様に負担となっているのではないだろうか。分子研研究会は、必要ならば開催場所を所外としてもよいのではないだろうか。

分子研が国際研究集会の開催をすることによって、アジアの国々における研究水準の向上に寄与することも必要であろう。集会の開催のための参加者との交渉、会場設営等をすべて世話することのできる人を機構でそろえているならば別である。そのような研究集会を開催するための十分な人的、予算的なサポート体制が整った上で、また研究の上で十分な余裕ができた時点で、そうするのもよからう。しかし、残念ながらわが国の研究者が置かれている立場は、後進国援助をするだけの余裕はないように見える。世界の第一線で活躍すべき研究者が秘書の役割をしてまでやることではない。

それに対して、5、6人の外国人を招待して開催している岡崎コンファレンスは、極めて有意義である。それは、分子研の判断で、招へいすると最も有用な討論ができる学者を呼ぶことができるからである。これは、是非とも続けていただきたい。そのような、研究集会は大学の研究者にとっても有意義である。

これらの研究集会を開催する予算も、可能ならば一袋できてほしいものである。ある程度の枠が付けるのも仕方はないと思えるが、その使い方には融通性があればさらに有意義となるであろう。

分子研では最近自前の装置を作製して研究をするということがだんだん少なくなったように見える。むしろ、お金で買ったものを使って研究するという傾向が強くなったように思える。もっと装置開発室を活用してもよいのではないかと思うが、どうであろうか。

以上のように夢のような願いを述べたが、それもすべてわが国が競争の激しい知的なオリンピックに勝利してほしいと願うからである。また、このようなことを述べたのは、COEである筈の共同利用研究所の研究環境が、創設時は別にして通常運転に入った時点で不十分な予算措置等しかされていないために、十分な成果を挙げられないのを嘆くからである。少なくとも共同利用研においては、大学にいる者から見ると、羨ましいばかりの研究環境を提供してもらいたい。それだけで素晴らしい研究成果が上がるとは限らないが、誰もが移りたいと願う研究環境がベストな人材を引きつけ、そうすることによって一層の素晴らしい成果が期待できるからである。

現時点では、分子研では十分な予算措置がなされていない。当面のところは、外部からの予算を取ることを勧めたい。グループリーダーと呼ばれる研究者は、基礎となる研究費はあるから、科研費の基盤研究Aのような大きな課題しか申請しないことを勧めたい。科研費の審査員には、分子研の研究者の申請を、大学の研究者からのと同様に審査する寛容さを見せたいものである。結局のところ分子科学にとってそれはプラスになる筈である。

最後に、戯言と思われるであろうことを書きました。“You are right, but ...”と言われるとは思いましたが。長い間お世話になりました。大学では、分子研で与えていただいたポテンシャルをもって頑張りたいと思います。研究所の発展を心より祈っております。

ニュース

第6回分子科学研究所オープンハウス

1996年5月18日(土)、第6回分子科学研究所オープンハウスが開催された。この行事は、全国の大学院学生と学部学生を対象とする見学会である。分子科学研究所は全国共同利用の研究機関であると共に、総合研究大学院大学の基盤研究機関のひとつとして、大学院教育に参加している。普段、比較的強調されることの少ない教育機関としての側面を広く知っていただくことも、この見学会の重要な目的のひとつである。本年度は、日本化学会と日本物理学会の会誌に広告を掲載させていただき、かつ分子科学関連分野の研究室に手紙と電子メールを送って参加者を募集した。準備期間が例年より短かったにも拘らず、蓋を開けてみると過去最大の90名の参加があった。参加者の内訳は、学部学生33人、修士課程学生46人、博士課程学生5人、研究生等2人、教員2人、会社員2人であり、このうち外国人が2人であった。

当日は、映画「分子科学」上映ののち、伊藤光男所長と吉原経太郎教授が各々、研究所と大学院大学の概要を説明した。その後、3時間40分のあいだ、参加者は研究室と研究施設を自由に見学した。最後に所員や大学院大学の学生達を交えて、たいへん賑やかな懇親会を行って終了した。

参加者が過去最大であったことの背景には、電子メールの普及によってこの種の行事の情報が広く速く行き渡るようになったこともあるだろう。しかしその分を割り引いて考えても、6回目を迎えたオープンハウスが、しだいに全国の学生たちに定着し、歓迎されていると見てよいのではないだろうか。共同研究や、施設を利用しての実験の可能性を熱心に質問する学生も多く、所員からいろんなアドバイスを受けて有意義な様子であったし、また、参加した学生間で交流して大いに楽しんでいる様子も見られた。参加者のうち26人が泊りがけで参加し、うち10人は2泊をしたというデータからも、彼らの熱心さを伺うことができる。

私の主観的な感想を言うと、この見学会には、学会での学生たちとのやりとりや一般の見学会にはない、一種の若々しい緊張感がある。参加している学生たちの中に、今後自分はどういう研究をするか、どんな研究者になりたいのか、あるいは研究者以外の道をめざすのか、など、濃淡の差こそあれ、自分なりの問題意識を持っている人々がいるからである。ボスに与えられたテーマを黙々とこなすだけでは満足せず、自分の脚で立って歩きたいからこそ、こういう場に見聞を広めに来たのだろう。そういう人たちとの会話を私は楽しんだし、ビールを飲みながら、オープンハウスは有意義だと感じた。

この行事の成功のために尽力された所内外の方々、特に各大学の先生方に感謝します。

(宮島清一 記)

総研大ホームページの開設

分子研 渡 辺 芳 人

昨今のインターネットブームの波に押されて、私をはじめとするネットワーク委員（加藤立・青柳・内藤）に総研大ホームページ開設の指令（？）が春先に届き、6月末にようやく形を整える事が出来た (<http://ims2.ims.ac.jp/index.html>)。本稿では、ホームページ作成に当たって留意した点、ページの紹介、最後にこの作業を通じて感じた事などを述べたい。

今回作成した総研大ホームページで、個別情報がどのような繋がり（リンク）で構成されているかを図1に示した。表紙ページは分子研全体の表紙に同居させていただき、機構のホームページからも入ってくる事が出来るようになってきている。「THE GRADUATE UNIV....」をクリックすると、総研大パンフ96年版の構成に従った写真などを含むほとんど全ての情報が入手できるようになっている。もちろん教官の顔写真入りの研究紹介のページも、そのまま提供している。国内の大学院生が漠然と分子研のホームページを覗く際は、このルートで大学院情報にたどり着くものと考えられるが、「総研大=分子研の大学院」として十分な情報が提供されていると考える。

今回のホームページ作成に当たって、「一体どのような情報が欲しくて、我々は海外の大学や研究所のホームページにアクセスするのか」を検討した。一つの結論は、特定の研究者のe-mailを含む連絡先の特定が主な目的であり、続いて研究内容などが挙げられた。そこで、表紙のページに「Who's Who」を設け、簡単に研究者の検索が出来るようにした。Watanabeを例に取った場合が図に示されているが、簡単に目的の研究者に到達できるのが解って頂けるだろうか。

総研大情報という点では、初期の目的は達したように思われるが、幾つかの点で今後課題を残しているため、以下に指摘しておきたい。

英語版の作成

日本語のホームページが出来上がると、必ず「英文のページがないのか？」というお叱りを受ける。もちろん英語原稿さえ作っていただければそれは可能である。しかし、それは、我々の仕事ではない筈であり、作業グループは別に組織されるべきものとする。

情報のアップデート

渡辺と加藤にお鉢が回ってきたのは、総研大パンフレットの作成に深く関わり、全ての画像と文字データを掌握しているためであり、電算機センターの青柳・内藤の両氏は、実際の作業実務に精通しているための人選であろうと理解している。今回は緊急避難としてやむなくホームページ開設作業をお引き受けしたが、総研大パンフレット作成を含めた総作業時間は膨大なものとなっている。今後、情報をアップデートする作業まで責任を持つことは不可能である。ますます

インターネットによる情報発信が重要になることは明らかであり、研究所として人的処置を含む抜本的な体制構築、すなわち適切な部署の設置を強く要望したい。

ANNUAL REVIEW 等の情報提供について

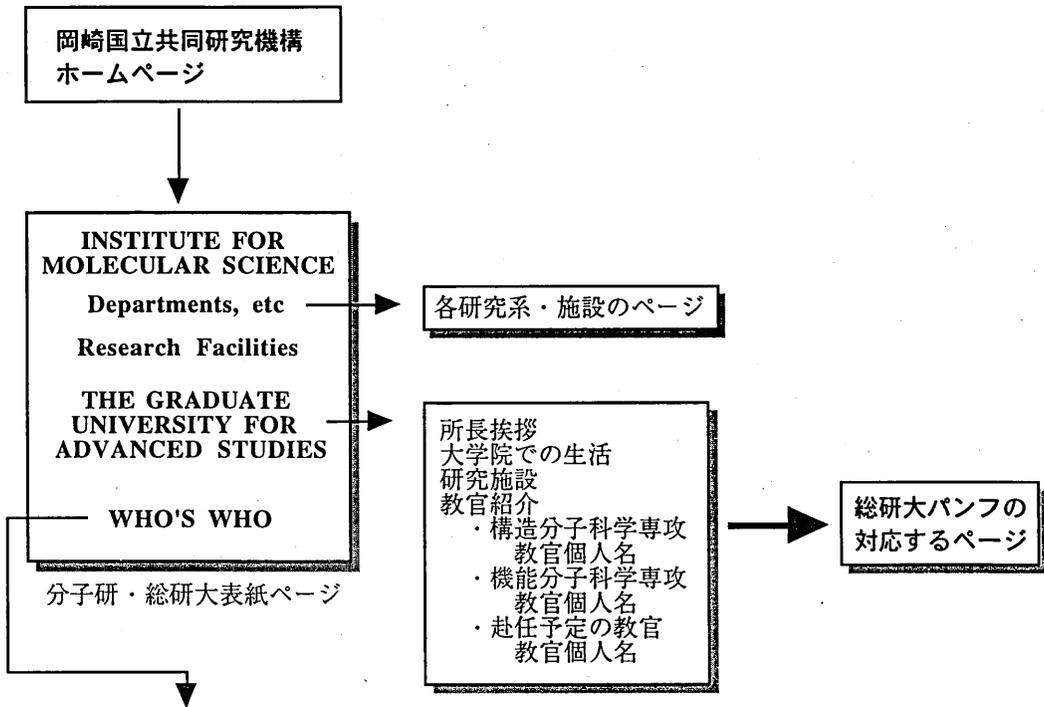
今回の総研大ホームページ作成が比較的スムーズに進んだのは、膨大な量の情報のハイパーテキスト化を担当した内藤さんの献身的な作業のたまものである。それと同時に、総研大パンフレットの情報が全てデジタル化され、編集委員会で掌握しているためである。これは、2年前にパンフレット作成に使う編集ソフト（印刷時のフィルム出力を含む）までもこちらから指定し、印刷屋が最終稿の版下作成に使うファイルが、こちらのパソコンでも加工できる体制を取っているためである。同様のことは、安全委員会発行の「緊急電話連絡のしおり」でも行われている。今年の ANNUAL REVIEW は MsWord で編集が行われるようであり、最終稿をホームページに加えることは可能である。既に指摘したように、そうした作業が今後増えるのは明かであり、分子研ネットワーク委員会のような特定の教官のボランティア作業では対応しきれない状況が生まれつつある。

なお、現在分子研ネットワーク委員会がどのような活動を行っているかを以下に紹介させていただく。

分子研ネットワーク委員会とは

上述したように、所内のネットワーク環境整備のための組織として分子研ネットワーク委員会がある。委員会の発足の経緯については分子研レターズ No.31 (1994.9) に紹介があるが、その後、主要メンバーの転出等があり、現在の主要メンバーは総研大のホームページ作成に関わった上記4名の他、小杉（委員長）、池上、戸村、酒井（雅）となっている。一般の委員や秘書の方々の協力を得ながら所内の環境整備を行っており、電子メールの運用、ファイル共有システム（ファイルサーバー）の運用、カレントコンテンツの運用、各種ユーティリティソフトの収集や更新など色々なサービスを支えている。また、WWW については管理局や秘書の方が深く関わる機構内・所内に限ったペーパーレス化の一環として整備しているところであり、総研大のホームページなどのように全所的な情報の編集・作成や所外に向けての情報発信サービスとは全く別の観点で活動している。このような活動はあまり外からは見えないが、情報ネットワークを有効利用していく上で必須の基盤整備であり、ネットワーク委員会の主要メンバーにはかなり負担のかかる作業内容となっている。

以上、総研大ホームページの紹介と、その過程で感じた点を率直に書かせていただいた。みなさんの建設的なご意見、積極的な参加によってホームページがますます充実することを願って、筆を置かせていただく。



IMS phone book

Input search strings.

If you enter some strings, please select logic option.
 AND OR

Result

There are 5 persons

- Hidekazu Watanabe Theoretical
- Kazuo Watanabe Excited State
- Masamitsu Watanabe UVSOR
- Michio Watanabe Equipment
- Yoshihito Watanabe Applied M

Yoshihito Watanabe

Name: Yoshihito Watanabe

Title: Professor

Office: Department of Applied Molecular Science
Applied Molecular Science I

Phone: +81-565-55-7430

Fax: +81-565-54-2254

E-mail: yoshi@ims.ac.jp

Address: Institute for Molecular Science
Okazaki National Research Institutes
Myodaiji, Okazaki 444, JAPAN

受賞者紹介

吉原経太郎教授に日本化学会賞

平成7年度の日本化学会賞が電子構造研究系の吉原経太郎教授の「超高速レーザー分光法による励起分子の研究」に対して授与された。分子科学研究所の一員として誠に慶ばしい限りである。

吉原教授はまず東大、赤松教授のもとで研究生活を開始されたあと、カルフォルニア大学リバーサイド校で博士研究員、東大物性研助手、理化学研究所研究員を経て、昭和50年より電子構造研究系教授として分子研に着任された。同教授は着任当初から超高速レーザー分光法が分子の励起状態や化学反応の重要な研究手段となることにいち早く注目して、新しいレーザー分光法の開発を行い、分子科学における動力的研究に多大な貢献をされてきた。今回受賞の対象となった研究業績を大別すると以下の4つとなる。

1. 分子間電子移動の動力的研究

色素-電子供与性溶媒系を用いて、溶媒和過程よりはるかに速く(100フェムト秒程度)起こる新しいカテゴリーに属する分子間電子移動を初めて見出した。これは電子移動において分子振動が関与することを直接示すものとして各方面にインパクトを与えており、電子移動の研究における全く新しい発展として重要である。また固体表面に吸着した分子の電子移動、さらに高等植物の反応中心濃縮粒子を用いた光合成系Iにおける電子移動、などの動的過程を明らかにした。

2. シストランス光異性化反応機構の研究

炭素-炭素二重結合を持つ化合物であるスチルベン、簡単な直鎖ポリエン(トリエン、テトラエン)、レチナル蛋白などのシストランス光異性化反応機構を新しい分光法によって研究した。特に、直鎖ポリエンのジェット分光では光異性化反応の遷移状態を初めて見出した。

3. ベンゼンの励起状態の研究

気相ベンゼンのレーザーフラッシュホトリシス分光を行い、それまで謎とされてきた新しい励起状態の発見や振動超高励起分子の冷却過程の動的機構を解明するなど、重要な研究成果を残した。

4. 超高速レーザー分光法の開発と分子分光学への応用

分子科学の分野にレーザーが導入されて以来、各種レーザーを次々と製作、またレーザー波長変換法を開発し、これを分子科学の研究者に普及させた。さらに分光法として新しい高次非線形分光法を開発し、液体の微視的構造や動的挙動に関する強力な研究手段を提供した。

(松本吉泰 記)

北川禎三教授に日本分光学会学術賞

分子構造研究系教授北川禎三先生に平成8年度の日本分光学会学術賞が贈られた。受賞対象は「振動分光法による生体分子の構造化学的研究」である。この賞は日本で分光学の分野において著しい業績をあげた研究者に贈られる。先生はタンパク質のマイクロ構造をもとに酵素反応の仕組みを探る研究に専心してこられた。先生の数多くの優れた業績のうちで以下の6つは特筆すべきものである。

1. Ni-OEP (ニッケルオクタエチルポルフィリン) の共鳴ラマンスペクトルの帰属の確立 (ヘムタンパク質の活性部位モデルとしての Ni-OEP の振動モードを同位体置換による実験と基準振動計算の両面から帰属)
2. 鉄-ヒスチジン伸縮振動に由来する共鳴ラマン線の観測を通して、ヘモグロビンへの協同的酸素結合におけるアロステリック機構の解明
3. フラビン酵素におけるフラビンと基質との相互作用の様式を電荷移動吸収帯に由来する共鳴ラマンスペクトルを解析することにより解明
4. 共鳴ラマン分光法によりペルオキシダーゼの反応中間体においてはじめて Fe(IV)=O ヘムの存在を証明し、その構造の酵素反応における重要性を解明
5. 紫外共鳴ラマン分光法によるヘモグロビンとミオグロビンのタンパク部分の速い構造変化の追跡
6. チトクロム酸化酵素における分子状酸素の4電子還元反応機構の解明

受賞を心からお祝い申し上げます。

(小倉尚志 記)

廣田俊君に第 12 回井上研究奨励賞

平成 3～5 年度の 3 年間に理学・工学・医学・薬学・農学等の分野で博士の学位を取得した 35 歳未満の研究者で、自然科学の基礎的研究において新しい領域を開拓する可能性のある優れた博士論文提出者 30 名に対して与えられる第 12 回井上研究奨励賞が、総研大数物科学研究科機能分子科学専攻を平成 7 年 3 月に修了した廣田俊君に授与された。

廣田君は京大大学院工学研究科分子工学専攻の修士課程では、山辺時雄教授の指導の下に電子状態理論、特に非経験的分子軌道法による超伝導メカニズムの解明について研究したが、総研大に進学して研究分野を大きく変え、生体分子科学の実験的研究をして標記の賞を得た。まず彼の勇気と努力に敬意を表したい。廣田君の学位論文は“Resonance Raman Studies of Fe-Ligand Vibrations of Oxygen Binding Heme Proteins and Structure-Function Relationship of Terminal Oxidases”と題するヘム蛋白質の共鳴ラマン分光に関する研究で、Part I と II の 2 部から成る。Part I ではヘム蛋白質の鉄イオンに 2 原子分子 (XY) が結合したときの FeXY 部分の振動の帰属を問題にしており、ヘム蛋白質としてはヘモグロビン (Hb), ミオグロビン (Mb), チトクロム酸化酵素 (CcO), チトクロム P-450 (P-450), チトクロム bo (Cyt bo), XY 分子としては O_2 , CO, CN^- , OH^- を取り上げている。彼の研究の特色は、ラマンスペクトルを非常に高いシグナル/ノイズ比で測定し、世界の誰もが気がつかなかった X, Y 同位体鋭敏ラマン線を発見したことにある。例えば $XY=O_2$ では、 $^{16}O_2$, $^{18}O_2$, $^{16}O^{18}O$ による同位体シフトの観測により、Fe-O-O 変角振動基音の観測に初めて成功すると共に、Fe- O_2 伸縮振動の倍音も観測した。XY=CO に関しては、これまで国際的に信じられていた帰属を覆す新しい帰属を提案している。すなわち、 ^{13}C や ^{18}O 同位体シフトを示す弱いラマン線を HbCO に見つけ、それがヘム蛋白質に共通に存在することを MbCO, P-450·CO, CcO·CO 等で示すと共に、それを Fe-C-O 変角振動の基音と考えると他の同位体鋭敏バンドを結合音や倍音として合理的に説明できることを J. Am. Chem. Soc. という化学の一流雑誌に発表した。現在この分野の専門家は、従来の考えが正しいのか、彼の新しい提案が正しいのか判断できない状態にあるが、それほど大きな問題を提起した。

Part II は末端酸化酵素の構造と機能の相関をラマン分光法で調べる研究で、ウシのチトクロム酸化酵素、大腸菌のチトクロム bo, 大腸菌のチトクロム bd の共鳴ラマンスペクトルを測定したものである。実験分野に転向してから既に 12 報の論文を書き、10 報が印刷されていて、その内 8 報が第一著者である。博士課程修了後、米国エモリー大学の L. G. Marzilli 教授のもとで NMR を勉強し、現在名大理学部助手として新しい分野の研究に専心している。修士課程のテ-

マとは全く別の分野の研究のために総研大に進学し、標記賞に輝く challenging な学生がいたという事実は後に続く学生に encouraging である。

(北川禎三 記)

流動部門研究を終えるにあたり

「岡崎は私の人生のスタート」

岡山大学 吉川 雄三

私共のグループは岡山大学理学部化学科無機化学講座から出向いた訳であるが、幸いにも流動研究が始まる時には、スタッフ、大学院生共に揃っていたため今までの方々と比べれば比較的恵まれていたといえる。(ここでどうしても書いておかなければならないことは、流動期間に分子研を訪れた幾人かの人達にも言われたことであるが、「小島(正明 助教授)さんが留守をしっかりとまっておられるので、吉川さんは安心して研究ができていいですねえ、」である。私自身もこのことには心より感謝している。) こうした好条件のもとで私共は分子研での所期の目的をほぼ達成することができた。ひとえに御協力をいただいた皆様のおかげと感謝する次第である。

所期の目的をほぼ達成といっても完璧ではない。分子科学研究所ひいては岡崎国立共同研究機構で研究を行っていたのだから、各研究所の方々と共同研究も計画していたし、そのつもりは充分あったから、それが果たせなかったのは残念ではある。特に基礎生物学研究所での共同研究は私の目指す天然無機化学(Cin-agrony)を発展させる絶好の機会と期待していたが耳学問だけに終わってしまった。2年間という短い年月を考えるとやむをえないであろう。

流動期間の間に岡山大学でも教養部が廃止された。このような動きは多かれ少なかれ他大学でも発生したものと思われる。これに伴い学部改組があり、教官の地位のふり替えとも相俟って助手の数が激減している。また政府高官はポストクワン人計画を提唱し、文部省は大学教官の任期制の導入を表明した。このように大学をとりまく状況は大きく動きはじめている。私共のグループは物質化学(大)講座の中に組み込まれていた。

私自身のことに戻って恐縮ではあるが、戦時中(1944年)この岡崎(分子研のすぐ近く)で戦災に会い、わが家が焼けるのを眼の当りにし、今でもそれを鮮明に覚えている。その後、名古屋に移り、約40年間過ごした。その間、不思議と岡崎の“岡”を皮切りにこの文字に関わるが多かった。今から思うと私の人事に関係したところは、すべて“岡”の文字が何らかの形で入っていた。最後には、とうとう岡山大学にお世話になることとなった。そして今回また岡崎の分子研にも。この次にはどんな“岡”が現れるか楽しみである。

おわりに、本流動部門教官に採用していただくにあたり、諸先生方に大変お世話になり、また、就任中は、伊藤所長をはじめ機構の先生方、事務職員の方々に大変お世話になったことを記し、厚く感謝いたします。

「狸の住む丘」

広島大学理学部化学科 中 沢 浩

「分子研のある丘に狸が住んでいる」。こんな話を耳にしたのは、私が広島大学から錯体化学実験施設の流動部門に赴任してきた1994年の4月のことである。その時からさかのぼること数年前に、広島大学理学部は広島市内から東広島市に移転した。新キャンパスは山と田んぼに囲まれ、その他には何も無い。まさに田舎である。そんなキャンパスの周辺でも狸が出るという話は聞いたことがない。比較的町中にある分子研の丘に狸が出るのだろうか。もし本当なら、早くお目にかかりたいものだと思いますながら、分子研での研究生生活がスタートした。

分子研は教授でも助教でも、教授会議なるものにも出席して対等に意見が述べられる。流動で2年間しかいない私も、同じように会議に出席した。当時、分子研は研究所の将来構想の一環として、組織改革に取り組み出していた。そのための特別委員会が設けられ、検討に入った。私もその一員に加わった。

分子研に来て、数カ月が過ぎていたが、未だに狸にはお目にかからず終いだった。会えないとなると、なおさら会いたくなるのが人情で、私も日に日にその思いは募るばかりであった。狸は夜行性だから夜によく出てくるという話を聞き、夜中に分子研の周りを歩いたりもしたが、徒労に終わった。それにしても分子研の連中は夜遅くまで仕事をしているものだと感じた。

特別委員会が検討を始めてから数カ月後、分子研は結論に達した。私にはその決断が非常に速く思えた。大学で組織改革と言えば、委員会をいくつも作り、長期間延々と議論のあげく、大山鳴動して鼠一匹というのが相場だ。しかし、分子研では自分達の組織を変えるのに、なぜこれほど迅速に決断を下せるのだろうか。不思議であった。

狸に会えない日は続いた。そんなある日、ふと思った。分子研がある丘に狸が住んでいるのではなく、狸が分子研に住んでいるのではないかと。そう言えば、将来構想に関するあの変わり身の速さ。会議でも、こまごましたことを言わずに話の通じる腹芸。夜遅くまで研究しているあの夜行性。狸でなくして何であろうか。私が分子研に来て以来、実は毎日狸を見、狸と話し、狸の生態を観察していたのだ。しまった。化かされていたか。

狸の件に関して独り納得してからは、急に狸に会いたいとは思わなくなった。そんなある日、南実験棟の脇で本物の狸に出くわした。親子と思える2匹である。愛嬌のある目でこちらを見ていた。結構かわいらしい動物である。しばし見つめ会っていたが、やがて西側にある竹藪の中に入っていった。どうもそこに巣があるようだ。それ以後、何度か狸を見る機会を得た。

私が分子研を去る数カ月前に、その竹藪が駐車場に変わった。それ以来一度も狸は見かけなかつ

た。どこへ行ったのであろうか。やはり、分子研には狸が似合う。

分子研を去るにあたり

「使い回しのできる便利なネタ」

名古屋大学 沢 辺 恭 一

エッセイなどを書くときに一度は使えて、しかも連載ものだと2度は使えない内容に「締め切りネタ」というのがあるそうです。つまり、「この原稿を書いているのが実は締め切りの日だから、果たしてこれが間に合うかどうか危ぶまれる」、などと書いて字数を埋めるといふ、姑息なそして便利なものです。この「分子研を去るにあたり」は連載物ではありませんので、私もその手を使わせてもらいましょう。少なくとも分子研に在籍していた過去の8年の間に見た分子研レターズにはその手の内容がなかったと記憶していますので、今こそ私が使わせてもらいます。もっとも、過去から未来にわたって分子研レターズに誰もそんなことをしようとは思わないでしょうが。

さて、実際にこの原稿は締め切りの日に書いています（しかも、昼間はセミナーやらなにやらで時間がとれず夜の9時半になってからです）。名古屋大学に来て、PR委員やらなんとか委員やらの編集担当となって原稿催促の電話、FAX, e-mail とかをすることが多く苦勞しているにもかかわらず、いざ自分のこととなるとなかなか締め切り間際にならないとやり始めないという性格が直りません。編集をしていますと、明らかに本当の締め切りは2、3日後とさばを読んでいる人がいるのがわかります。そこで、自分が編集担当のときにはその先を読んで本当の締め切りの4、5日前を締め切りとすることがあります。分子研レターズの編集もそうであることを願って、この原稿が本当の締め切りに間に合うことを期待して今書いているわけです。何にせよ、締め切り破りは甘えであり、こうした甘えの構造の意識が働いてしまうのは、まだ分子研に身内意識があるからかもしれません。やはり私にとって分子研は、8年の長きにわたって研究していた所なので研究生活における故郷とも思えるのかもしれません。

と、こうして書いていけば、少なくとも字数は埋まるという便利なものが「締め切りネタ」です。ちゃんと落ちもつけています。困ったときの神頼みならぬ、便利なネタ、ということです。しかし、内容はともかく、こうした「締め切りネタ」は使い回しされているわけで、書く方もそうですが読む方もたぶん見苦しいでしょう。さて、ある人が、いい研究をするとそのネタを使って何人もの研究者が研究を続けることができる、ということを書いていました。どなたが言った言葉かは失念してしまいましたが、そういう研究も研究者にとっては、この「締め切りネタ」と同様な「使い回しのできる便利なネタ」といえるのでしょうか。果たして、学会の要旨などを見ま

すと、そのような「使い回しのできる便利なネタ」にぶらさがっているものは、やはり、あります。もちろん、私の偏見でそう見ているだけかもしれませんが、その研究グループが持つ才覚があつたら「使い回しネタ」を使うのではなく、もっとオリジナルなネタをやってもいいのではないかと、思えるものがあります（誤解のないように書いておきますが、私の所属していた部門のことではありません）。「分子研を去るにあたり」思うことは、分子研には「使い回しのネタ」を使った研究ではなく「使い回しのされるネタ」としての研究をどんどんとやって欲しいと思います。

研究の輪，人の輪

神戸大学理学部化学科 富宅 喜代一

神戸大学に移って早や一年余りになりますが、実験が始められるようになったのはやっと先月で、分子研レターズに投稿させていただき余裕もできました。私が機器センターに着任したのは昭和63年の11月で、平成7年6月まで約6年半お世話になりました。この間、井口、伊藤両所長をはじめ花崎、齊藤両センター長の公私にわたるご指導と、センター職員の方のご協力のおかげで、センターの仕事と研究を何とか両立させることができました。

赴任当初は、やっと独立して研究できるので何か新しい方向をと色々思案したのですが、前地で始めていたクラスターの研究を自分なりの切り口で進めれば、新しい展開が生まれるのではというところに落ち着きました。翌年6月には美齋津典氏にグループに加わっていただき、溶液化学との関連で「電子・金属イオンの微視的溶媒和」をテーマとして研究を始めました。溶媒和金属イオンクラスターの研究は、当時はまだ熱力学的性質の検討に留まっておりましたので、この分野にレーザー分光法を導入すれば新しい方向がでるのではと、比較的軽い気持ちで始めました。少し研究を進めるとたちまち我々の前に立ちはだかった問題は、クラスターの構造です。幸い、私の大先輩に当たる岩田末広氏に、理論サイドからこの問題を取り上げていただき、金属イオンの水和構造、電子構造と酸化還元反応をクラスターの立場から掘り下げることが可能になりました。この問題と並行して、溶媒和電子の生成初期過程をクラスター内で捉えることを試みましたが、都立大の橋本健朗氏の協力を得て、最近やっと、単一のアルカリ金属原子が溶媒和電子の生成を伴って段階的に溶解する様子が明らかになってきております。

一方、機器センターについては、私が着任したときにはすでに確立されており、また技術系職員の方に囲まれて仕事をするのも初めての経験で、最初は多少戸惑いもありました。順調に走っ

ているセンターをより良く運営するためにはといった未経験の問題にぶつかり、私なりの答えとしてでたのは、センター職員の職場環境を良くする、という単純なものでした。しかし、この指針でさえ6年半ではなかなか全うできず、センター内外のご批判を受けるのも致し方ないと思っております。私は、分子研でお世話になるまでは、研究は個人の努力で進めるものと確信しておりました。でも、半年もすると自分の周りの環境が、研究を進めるに当たって非常に素晴らしいことに気づきました。センターには山中孝弥氏がおられ、私が何か新しい実験をと思い立って装置を組立て始めると、必ず彼の秘蔵品の中に必要な機械や回路の一部がありました。彼がセンター業務の合間を縫って作られたものですが、惜しげもなく提供して下さいました。すぐ隣の装置開発室には堀米、岡田氏らがおられ、装置の要となる部品を迅速に試作して頂き、また極端紫外光施設からは不要になった真空チャンバーをお裾分けして頂きました。このような側面支援は、小さなグループで進めるのが困難なクラスターの研究に非常に大きな原動力となりました。昨今の政府の基礎研究の推進計画を鑑みると、このような研究の支援体制が今後益々重要になると思われれます。

最後になりましたが、上記のような研究にも研究費を計上して下さいました井口、伊藤両所長をはじめ、いろいろお世話になりました研究系、事務系の方々に心よりお礼を申し上げます。

外国人研究員の印象記

Ii Naomasa from Brazil

Ornellas, Fernando Rei

To have lived in Okazaki for about eleven months was certainly a live-enriching experience for both myself and my wife, Emilia Haiko, a Brazilian-born second generation Japanese. To better expound our experience, we recall that the period that anticipated our departure to Japan was one of great expectations; our feelings were somehow mixed at that time. How to live in a small city in a cultural and social context quite distinct from that of the megacity of San Paulo we were used to? How would be the interaction with the colleagues at work and the community? What would be the scientific outcome of this trip? These questions and much more were constantly in our minds.

To make a long story short, we can say that step by step the transition was made and after a while we were feeling ourselves very comfortable, both materially and spiritually. The living facilities at Mishima Lodge were quite good; the place very quiet and of easy reach to everything. My wife soon realized that the Japanese language she had learned with her parents when she was very young was surprisingly flourishing again; she could understand and communicate with other people in Japanese. That was very important for her to make new friends and also a motivation to deepen her knowledge of the Japanese language both oral and written. A measure of her efforts to master reading in Japanese is reflected in the 800 children books of increasing difficulty she had read during this period. The oral mastery came naturally as a result of conversations with her new friends. She had a wonderful time. She even had time to learn how to ride a bicycle and to swim, things she never had time even to think about in her busy life as a teacher in an International American School in San Paulo. It is relevant to emphasize these points about my other-half because if she were not feeling really good in her new environment, I would not be able to carry out my research without serious domestic problems.

Very important for our integration in part of the Japanese life were the Okazaki International Association (OIA) and the Mitsuhashi Culture Club. Both were instrumental in involving both of us in social and cultural activities in the city. Through OIA, in particular, I had the opportunity to impersonate Ii Naomasa, in the Iyeasu Gyoretsu, a truly memorable experience, unexpressable in a few words.

My new colleagues in the Theoretical Division were very kind and helpful, and the working atmosphere very relaxed. Without any premeditated plan, Professor S. Iwata's group was becoming quite international; his friendly and helpful attitudes and his intense academic activities were mainly the cause for this new direction his research group activities were heading to. Not only the official language of the weekly group seminar became English but the more frequent conversations and scientific discussions in English gave an opportunity to our Japanese colleagues to put in practice their knowledge of the English language, getting therefore more self-confidence. In consideration to all foreign visitors at IMS, this group practice in the Theoretical Divisions of having the seminars conducted in English (even when given by a Japanese) would be a benefit to the whole institute if also extended to the IMS colloquium.

Scientifically, we started, I hope, a long standing collaboration. Quite a lot of work was carried out and various papers have already resulted and others are in the process of being completed. However, in various occasions I felt the computational resources were below my expectations and some projects had to be interrupted.

Overall, this experience was very good, both scientifically and culturally. I would like to express my gratitude to Professor S. Iwata for giving me the opportunity to join his group, and also to Professor M. Ito for supporting my visit to IMS. I am looking forward to meeting you all again.

私の日本

Kröber, Jonas

「パスポートを。」と入国審査官は言いました。

「はい、どうぞ。」私は赤い小冊子を手渡しながら言いました。

「はい、ああー、ちょっとお待ちください。ビザが無効ですね。」

「何だって。」

「白線まで下がってそこで、お待ちなさい。」

だから私は荷物を持って、さっき自分が通ってきた白線の所まで戻りました。しかし10分たってもそのままでした。空港のロビーで私を待っている未来のボスのことがとても気掛かりでした。しかし、ここに彼が入ってくることはできません。それで私は審査官に丸山教授に状況を説明してくれるよう頼みました。親切なことにそうしてくれました。

その間に次の飛行機が到着して、まるで世界で最も簡単で自然なことのようによすべての人達は税関を通過していきました。なぜ、私にとってはそんなに難しいことなのでしょう。私がなにか特別な犯罪者のように見えるのでしょうか。ついに1時間後にその審査官が私を呼んで言いました。

「これで大丈夫ですよ。日本に入れます。」

私は入国に関して問題が起きるなどということは以前には全く考えもしませんでした。

荷物検査の後、税関を通過して私がプロのスパイなどではないと証明するための招へいの形式的な手紙を見せました。そして一人我慢強く待って残っていた優しそうな人の所へ歩いて進みました。まさに、この人こそ新しいボスでした。私は、飛行機のフライト中、苦心して覚えた、ただ1つの日本語の文章が通じるかどうか不安でした。それで、勇気をふりしぼってお辞儀らしきものをして言いました。

「はじめまして、ジョナス クレーバーです。どうぞよろしくお願いします。」

しかし、その人の顔には不思議そうな表情が浮かび私に聞きました。

「"Sorry, what did you say?"」

ああ、私は自分自身に言いました。この国は自分にとって新しい国だ。日本人のようにうまくいくと期待してはならない。しかしどうか、来て早々トラブルが起きませんように。

さて、私はもう20ヵ月以上も日本にいて、空港での出来事以外は、私が日本に来る前に考えていたより、とても暮らしやすいということを行わなければなりません。起こるとは思えなかった、管理局に対しての問題がまた同じように誰かに起こるかもしれませんけれど、もちろんそれは管理局やこの国のせいではありません。

2週間ほど前に、分子研レターズの執筆依頼を受けたとき、最初は科学の事について何か書こうと思いましたが私の研究に興味のあった幾人かには、特別な専門的な読み物の方が良いけれども、私自身に何か尋ねるかも知れません。それに一般的な作文の方が多くの読者にアピールできると思いました。

私は「郷に入れば郷に従え。」という諺が好きで、ここは日本だから日本語で書こうとしましたが日本語があまりよくできないので良くないと思いながらも奇麗ではない、簡単な日本語を使いました。

4月、ある居酒屋で40歳位の人がビールを飲んでいました。私は入ってカウンターに座って隣の人と一緒のものを注文しました。私の隣の人が何か挨拶したあとで「日本の桜どう思いますか。」と聞きました。簡単な質問だけでも、答えにはいつも「奇麗です。」と言ったらつまらないしその同じ日に10回も同じ質問をされました。「桜は食べられないから、桜に興味全然ないです。さくらんばしか興味ないです。」と言いました。彼は不思議そうな目で私をまっすぐ見ま

したけれども急に笑い出しました。「そうですね、馬鹿な質問ねえ。」と言いました。私も笑って「ごめんなさい。」と言った後でその居酒屋が閉まるまで面白いことを話しました。

そういう答に困る質問がよくあります。例えばこの2つ、春の時に、その桜の質問と「日本はどう思いますか。」という質問です。

一つ目ののは、まだいい答が出来ませんでしたけれども多分そんなに大事ではありません。

二つ目ののは、本当に答に難しいけど多分面白くて大事な質問です。だから自分の答を見つけてみましょう。

「日本はどう思いますか。」

まず日本とは何かということが解らなければなりません。日本に来る前にたくさんの友達が

「どうして日本へ行きたいか全然わからない。人が多すぎるし、働きすぎるし、日本の物しか買わないし。」

と聞きました。

日本のイメージはステレオタイプだけれども、本当の日本と日本人に会わなくてはわからないと思っていました。私にとって日本イコール(=)日本に住んでいる人です。だから「日本をどう思いますか。」という質問は多分「日本人をどう思いますか。」という意味だと思うのです。

自分の国から新しい国へ行ったらなんでも違います。同じ物でも違います。例えば、スーパーの買い物でも違います。24時間、開いていると思ったキャッシュコーナーは5時までです。

初めは子供みたいな気持ちになりました。何でも新しいのです。私の場合は話すことも読むことも出来なかったのです。外国人達は子供みたいな気持ちになるので傷つきやすくなります。だから外国人に会う時には気を付けて扱ってください。でも本当の子供ではないので、勿論、子供みたいな扱い方も駄目です。だから自然な扱い方が一番いいと思います。特に初めに全部わかりたいので何でも分析して前に聞いたステレオタイプと比べてみます。そうするとステレオタイプというよりも沢山の違いがあることに気が付きます。それは本当に良かったです。人が皆ステレオタイプをつくっているように研究者も分子構造をつくっています。しかし、その分子構造はずいぶんシンプルです。現実とその分子構造が違うのは知られています。ステレオタイプもそうです。例えば、日本の社会のイメージは組織的です。交通機関や学校制度など。しかし、日本の町の建築物は計画的ではありません。例えば、建物と道と電線との配置がめちゃくちゃです。そして日本の土地計画は多分良いですけど、住所のシステムが難しいから誰もすぐには場所がわからないでしょう。

学校は大変厳しそうなイメージがあります。制服だし大変そうなスケジュールだし塾もあるし一生懸命勉強しなくてはなりません。個性があまりないです。しかし家庭の教育がヨーロッパほど厳しくありません。学校が厳しすぎるから家で発散させるようです。

ところで、どんな国でも女のひとと男のひとの態度に違いがあります。多分、世界中で日本の男の人は男性優位主義の様な態度で有名です。しかしそれは昔の日本です。今の若い女のひとの働くことと遊ぶことは男のひとと同様です。多分それ以上でしょう。そして若い男の人は今、こんな女のひとを必要としていると思います。

私の経験の中で一番強い印象を受けたことは、お酒はどのように態度に影響するかということです。いくら真面目で静かな人でも一本飲んだ後は賑やかで楽しくなります。

さて外国人に対する態度の違いのせいで私達は困っています。外国人を下に見ているからではなくて反対にとっても良い扱い方をしてくれます。そのおかげで外国人はよく招待されるし、ときどき特別な外国人料金もあります。そのときはいいと思っても、これは差別の一つだということを考えて欲しいと思います。初めはその外国人に親切な気持がとても嬉しいけど、後でだんだん辛くなります。だからいつも日本人と同じ扱いをして欲しいです。

日本人が自然のことが大好きなのはよく知られています。ハイキングやマウンテンバイクより、公園のような手を加えられた自然の方が好きようです。多分土地が狭いので、そんなに自然が好きなのでしょう。そのかわりに大きな物が好きです。大きな家を持つのは大変難しいです。それで大きな車は日本でずいぶん人気があります。ときどき便利ではないですけど、ドイツでも同じ様な現象があります。車が多くてたくさん速度制限があっても、みんな速い車が欲しいのです。

次に時間の関係について、日本人はあまり時間がないことで有名です。どこでも1日は24時間ありますから、時間の使い方が問題になります。例えば、4時間かかって作ったご飯を10分で食べてしまうことは矛盾があります。私にとって、これは食べ物と作った人を大切にしないように思います。同じことはお金を儲ける時間とお金を使う時間にも言えます。

面白い経験は現代と昔のことがミックスされているということです。会社の社長は占い師に会社の成功について聞いたりします。

最新のものと同様のものがあります。例えば、カメラと洗濯機を対比してみましょう。カメラが最新だと皆さん知っていますね。しかし、洗濯機はちょっと遅れているものが多く使われています。最新の洗濯機は水をいれてから中でお湯になって洗います。

最後に、せっかく色々なことがわかってきて日本人と日本にもっと興味がわいてきたのに仕事のためにもうすぐドイツに帰らなければなりません。本当に残念です。しかし今までお世話になった人達や友達、それから楽しかった思い出を忘れないように大切にしたいと思います。分子研の皆様、本当に有難うございました。

つづきはwhenever you want to meet me.

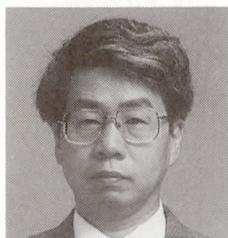
新任者紹介



は が まさ あき
芳賀正明

錯体化学実験施設錯体合成研究部門 教授

昭和52年大阪大学大学院工学研究科博士課程修了。三重大学教育学部助手、助教授、教授、カナダヨーク大博士研究員などを経て、平成8年4月より現職。分子研では、錯体の光、電子機能を固体表面上で発現するために錯形成反応を利用した溶液内エビタキシ法の探索および「Molecular beauty」を求めている表面錯体の配向制御が研究テーマです。どうぞよろしくお願いします。



さくら い たけし
櫻井武

錯体化学実験施設錯体合成研究部門 助教授

大阪大学大学院基礎工学研究科博士課程修了後、学振特別研究員、大阪大学助手、金沢大学助教授を経て8年4月から流動部門でお世話になっています。専門は金属タンパク質、金属酵素の生物無機化学です。大学にいると研究が軽薄短小に流れる傾向があるので、分子研だから出来たというような仕事ができればと思っています。



ふじ わら ひで き
藤原秀紀

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 助手

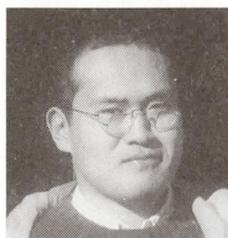
平成8年京都大学大学院工学研究科博士後期課程中退。同年4月より現職に着任致しました。これまでは新規な有機伝導体の開発を主に有機化学の立場から行ってきました。分子研でも引き続き同じ分野で研究を行うことになりましたが、もっと幅広い視点から新規物質に携わる研究を行っていきたいと考えています。しばらくやっていないのですが趣味はラップ吹きです。



おの の ひと し
大野人侍

電子計算機センター 助手

4月に日大理工学部助手からこちらにやってきました。非線形可積分方程式を逆散乱法を用いて解くと言うことを主にやっています。現在は、あまり優雅ではない独身生活を行っており、カレンダーとにらめっこをしては、次はいつ新幹線に乗ろうか計画を立てることに頭が行きがちです(半分嘘)。運動は、スキーやテニスを年1・2回する程度で、どんどん体が重くなるのを止められません。ふー。



おの たけ ひで ゆき
大竹秀幸

機器センター 助手

東京都出身。平成8年東京理科大学大学院博士課程修了。4月から機器センター助手として着任しました。大学院時代は東大物性研究所末元研究室で、時間分解電子ラマン散乱の手法を用いて、半導体中に光励起された電子と正孔の超高速エネルギー緩和過程の研究をしておりました。趣味は山登り。講道館柔道参段で、得意技は払腰と巴投げです。よろしくお願いたします。



げ じょう たつ お
下 條 竜 夫

極端紫外光実験施設 助手

平成6年3月総研大数物科学研究科博士課程を修了し、その後チューリッヒ大学物理化学研究所博士研究員、IMSフェローをへて、平成8年4月にUVSORの助手に着任しました。

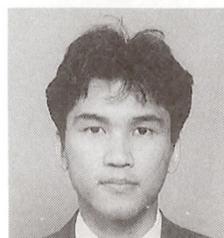
日本が猛暑におそわれた去年とおとし、ずっとスイスで涼しく過ごしていたのですが、今年は岡崎の暑い夏を満喫してしまいました。これからよろしくお祈いします。



もんじゆ しろう ひであき
文 珠 四 郎 秀 昭

錯体化学実験施設錯体合成研究部門 助手

大阪大学理学研究科博士後期課程修了。同助手を経て、この4月から赴任しました。専門は分析化学です。ここでは錯体を表面に並べてその構造を評価するという仕事を進めています。初対面の人には良く名前の由来を聞かれるのですが、先祖は刀鍛冶だったということです(残念ながら本人は不器用)。よろしくお祈いします。



ます や まさ と
升 屋 正 人

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 非常勤研究員

平成8年東京大学大学院農学生命科学研究科博士課程修了。同年4月より現職。これまで、植物生態学、分子生物学、離散空間における3次元形状処理などの研究を行ってきました。今後は計算機科学の生物学への応用と生物学の計算機科学への応用により、両者の境界領域の研究を進めて行きたいと考えています。短い期間ではありますが、よろしくお祈い致します。



あくつ ひろ き
坏 広 樹

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 非常勤研究員

1968年12月24日茨城県古河市出身。この3月に東京理科大学の内田登喜子先生の下で博士課程を修了し、4月から小林速男先生の下でお世話になっています。興味深い物性現象に囲まれて楽しく有機伝導体の研究を行っています。また関東では廃れてしまったアナログオーディオやレコードがこちらでは結構盛んで、休日はあちこちの店をまわっています。よろしくお祈い致します。



しも じま あつ ひこ
下 島 淳 彦

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 非常勤研究員

平成7年3月に早稲田大学大学院理工学研究科博士課程修了後、早稲田大学理工学部助手を経て、平成8年4月より現職。早稲田では分子軌道法とラマン分光法を用いてラジカルや励起状態の分子の構造や基準振動について研究していました。現在は田原グループでピコ秒時間分解ラマン分光により溶液中の光化学反応初期過程の研究を行っています。どうぞよろしくお祈いします。



おか だ かず まさ
岡田和正

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 非常勤研究員

広島出身。広島大学大学院理学研究科博士後期課程を修了し、本年4月より分子研に参りました。大学在学中は気相中での単分子熱反応の機構と動力学的研究を行っていました。こちらでは伊吹紀男先生の下で、UVSORを利用して気体分子の内殻電子を励起して解離過程を調べています。研究設備の充実した環境の中で、少しでも多くのものを身につけたいと思っています。宜しくお願い致します。



しお つか みち と
塩塚理仁

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 非常勤研究員

平成8年九州大学大学院理学研究科博士後期課程修了。九州大学では、錯体化学、主に芳香族リン配位子による金属錯体の分子構造、電子状態に関して結晶構造解析、多核NMR法を用いて研究を行ってきました。こちらでは塩谷光彦先生の下で生物無機化学、核酸-金属複合錯体の機能化に関する研究を行っています。短期間ではありますが、生体機能と錯体に関して多くのことを吸収したいと思っております。宜しくお願いします。



み たく しげ き
美宅成樹

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員教授

1976年東京大学大学院理学系研究科博士課程物理専攻中退。東京農工大学工学部生命工学科との併任です。タンパク質立体構造予測の問題に連続体の考え方をもち込んで、何とか正攻法で解決したいと考えています。囲碁が好きで(2-3段)、さそわれたらまず断ることはありません。



お び きん いち
小尾欣一

電子構造研究系電子構造研究部門 客員教授

東京工業大学大学院理工学研究科化学専攻博士課程修了。東工大助手、助教授を経て、昭和61年12月より現職。気相から液相まで広範な系を対象に、各種の分光法を用いて励起状態ダイナミクスと反応中間体の分光を中心に研究を行っています。分子研にはいろいろとお世話になってきましたので、少しでもお役に立てればと思っています。



ふく やま ひで とし
福山秀敏

分子集団研究系分子集団研究部門 客員教授

固体物性、とくに量子輸送現象を中心とする電子物性についての理論的研究が主。実験事実から発想することが普通で、理論家よりは実験家と議論する時間の方がずっと長いのが日常。(これは1/4半紀前にベル研究所でpost-docをしていたときの強烈な印象がもと)



すぎもととよなり
杉本豊成

相関領域研究系相関分子科学第二研究部門 客員教授

平成7年4月に京大院工から大府大先端研に赴任しました。今年4月より分子研で客員教授としてお世話になっています。先端研は組織・研究両面で未熟ですので、分子研でいろいろ学びたいと思っています。「新しいパイ電子系化合物の合成とその電子構造および機能性質」のテーマで研究を続けていますが、現在はとくに強磁性や高伝導性を発揮する新規有機物質の開発に興味を持っています。



よしかわゆうぞう
吉川雄三

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 客員教授

昨年度まで同施設錯体合成研究部門(流動)に所属していました。現在は、実家である岡山大学理学部と分子研との両方を拠点に目指す天然無機化学(Cin-agrony)の研究を行っています。当面は(ケイ素化合物こそが生理学的に重要な働きをしていることを信じつつ)、高配位ケイ素(IV)錯体の立体化学にとり組んでいます。



ひらやあつなり
平谷篤也

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員助教授

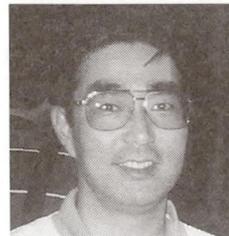
東北大学大学院理学研究科中退(分子研受託学生)後、分子研技官、助手を経て、平成7年10月より広島大学理学部物性学学科助教授、翌年4月より現職併任。専門は「放射光とレーザー」を用いた「内殻励起光化学」という分野を拓こうとしている。「広島大学放射光科学研究センター」(通称: HiSOR)の立ち上げと、UVSORでの「内殻励起イオン性解離」の研究を進めています。



かなもりひでと
金森英人

分子構造研究系分子構造第二研究部門 客員助教授

8年前まで同一部門に在職しておりました。今回の客員のポストはそれ以来大学で暖めてきたアイデアのいくつかを試してみる貴重な機会と思っています。以前からよく知っている人は益々、新しい皆さんにも何かとお世話になることと思いますが、よろしく願いたします。



なかざわひろし
中沢浩

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 客員助教授

昭和56年広島大大学院博士課程修了。東工大資源研、ユタ大学の博士研究員の後、昭和59年広島大学理学部助手、平成2年助教授。平成6年より2年間分子研錯体化学実験施設の流動部門助教授、平成8年4月に広島大に帰任。遷移金属と典型元素の織りなす化学を、どのように理解すべきかが現在の課題。分子研を内と外から見れる機会を与えていただき、感謝しています。お役に立てればと思っています。



Rubtsov, Igor V.

電子構造研究系基礎電子化学研究部門 非常勤研究員

M. S. (1984) Moscow Institute for Physics and Technology, Russia, and Ph. D. (1992) at Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Moscow, working on kinetics of photoexcited molecules and ion-radicals in microheterogeneous organized molecular systems under Prof. Victor A. Nadtochenko. Since 1992 Senior Scientific Researcher in Institute of Chemical Physics in Chernogolovka, Russian Academy of Sciences, with Prof. Victor A. Nadtochenko, working on ultrafast photochemical charge separation, transient grating spectroscopy, photophysics of fullerenes.

My present work in Prof. Keitaro Yoshihara's group is to investigate initial stages (~ 100fs) of ultra-fast electron transfer reaction.



とく し ひとみ 禿 子 瞳

電子計算機センター 事務補佐員

理論研究系の事務補佐員を辞めてから早いもので二年近く経ってしまい、この間主婦業にすっかり浸かってしまい、身も心も重くなりましたが、どうぞまた以前と同じようによろしくお願いします。電子計算機センターの仕事は、なかなか慣れなくて大変なのですが、皆様少人数でとてもお忙しいなかで、和気藹々と毎日頑張っておられますので、私もなんとか早く馴染むようにと思っています。



Hansman, H. U. Ewald

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 助手

Academic record: M. A. in Philosophy, Diplom (1985) and ph. D (1990) in Physics at Freie Universitaet Berlin, Germany. 1991-1994 Postdoc at Florida State University, Tallahassee, USA; 1994-1996 Postdoc at Swiss Federal Institute of Technology (ETH), Zuerich, Switzerland. Since May 1996 I am working at IMS.



にし のぶ ゆき 西 信 之

相關領域研究系分子クラスター研究部門 教授

5年前に11年10カ月半の分子研助教授生活に終止符を打ち、九州大学に赴任したのですが、どういう風の吹き回しか再び岡崎生活となりました。といっても、九大の方も旅費の出ない併任で(辞令ももらっている)、大学院生の指導と学部の講義にも帰っています。大変ですねと言われると、自分でも本当に大変だなと実感しながら、頑張っています。祖父も父もそうだったが、自分で実験するのがなよりの楽しみで、学生と一緒に実験してると最高です。コンピューター制御のニューアクエリアス(新しい液体クラスターマシン)が動きだし、今は大変ごきげんです。



なが た たかし 永 田 敬

相關領域研究系分子クラスター研究部門 助教授

1982年東京大学大学院修了。東京大学理学部助手、講師、助教授、同教養学部・総合文化研究科助教授を経て1996年5月から流動部門に着任(東京大学併任)。研究分野:分子反応動力学、クラスター化学。好きなもの(こと): 鮎、鰻、アイスクリーム、装置作り。嫌いなもの: 背広・ネクタイ、会議。



おお はし かず ひこ
大橋和彦

相關領域研究系分子クラスター研究部門 助手

大阪大学大学院理学研究科博士課程を中退した後、分子科学研究所電子構造研究系助手、九州大学理学部助手を経て、平成8年5月に、4年半ぶりに岡崎にもどってきました。前回分子研にいた時から引き続いて、分子クラスターの分光と励起状態におけるダイナミックスについて研究しています。2年間、流動部門でお世話になりますので、よろしくお願いします。



朱雷

相關領域研究系分子クラスター研究部門 助手

Graduated from Zhongshan University, B. S. (1985); and Ph. D. (1990) in laser physics at Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academy of Science. 1990-1992 Lecturer of Fudan University; 1992- Associate Professor of Physics Department of Fudan University, Shanghai, China.

Research interests:

Ultrafast phenomena

Laser spectroscopy of atoms

Physics and chemistry of clusters

Nanostructured and granular materials

Research program in IMS:

Laser spectroscopy of negatively-charged molecular clusters. --

Prof. T. Nagata's group.



すず き ゆう こ
鈴木優子

電子構造研究系 事務補佐員

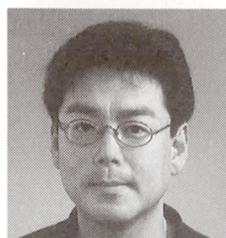
新任の挨拶をと言われて、さて・・・どうしたものか、と考え込んでいる私です。思い起こせば初めて分子研の門をくぐったのは10ウン年前。その後暫く武者修行の旅に出ていましたが、5年前に戻ってきました。この5年間は分子研にしながら新プログラムという隠遁生活をしていました。そして、この度電子構造研究系で働くことになりました。どかが新人なんだよと言わないで宜しくお願いします。



ほそ こし ゆう こ
細越裕子

相關領域研究系相關分子科学第一研究部門 助手

1996年東京大学大学院理学系研究科博士課程修了後、6月より井上グループの助手として着任致しました。大学院の5年間は物価の高い六本木の東大物性研で、有機ラジカルの合成と磁気測定(極低温から加圧下まで)を行っていました。今後は磁性の絡んだ新しい機能物質の開拓をしていきたいと思っています。今後ともよろしくお願い致します。



お こう せい じ
小江誠司

相關領域研究系相關分子科学第二研究部門 助手

平成5年東京理科大学大学院理学研究科化学専攻修士課程修了。平成8年総合研究大学院大学博士後期課程修了。平成8年6月より現職。現在の研究分野は生物無機化学で、テーマは不安定中間体のモデル錯体の研究です。本年8月8日に結婚し、「今が一番幸せ」と、みなさんに言われる今日このごろです。趣味はロックドラマと錯体の合成です。



Tolstikhine, Oleg I.

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 特別協力研究員

I graduated from the Moscow Institute of Physics and Technology (Phys-Tech) in 1987, and got my Ph. D. in Physics in 1991 from the P. N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow. Last three years I spent with the group of Prof. M. Matsuzawa in the University of Electro-Communications, Tokyo, working on different aspects of the hyperspherical method in applications to three-body Coulomb problems. I plan to continue this work in applications to molecular potentials during my stay in IMS with the group of Prof. H. Nakamura.



佐藤 啓文

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 助手

慶應義塾大学理工学部から、今年、京都大学大学院理学研究科博士課程を修了、同研修員を経てやって来ました。専門は量子化学ですが、統計力学的手法と組み合わせて溶液内分子の様々な化学過程の問題に取り組んでいます。どうぞよろしく御願います。



岸 根 順一郎

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 助手

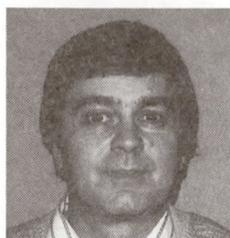
平成8年東京大学理学系研究科博士課程修了。東大理学部研究生を経て同年9月より現職。平成8年8月末より岡崎市民となり現在に至る。専門は強相関電子系およびスピン系の物性理論。現在は特に高温超伝導体の磁気励起、スピン梯子系の有効理論、擬1次元系の繰り込み理論を研究中です。血液型B。よろしく御願いたします。



柴山 日出男

極低温センター 技術補佐員 (研究支援推進員)

名古屋大学理学部極低温実験室を昨年3月定年退職し、平成8年9月よりお世話になっています。これまでは極低温実験室の業務と低温機器の開発を長くやってきましたので、この経験を生かして、お手伝いできたら幸いです。趣味はテニスと囲碁をやっています。よろしく御願います。



Kogan, Iakov L.

分子集団研究系物性化学研究部門 文部省招へい外国人研究員

Graduated from Moscow State University in 1972, Chemical Faculty 1987-Ph. D. in physical chemistry. At present-principal researcher of Institute of Chemical Physics in Chernogolovka.

Main fields of interest:

Chemical and electrochemical synthesis of conducting polymers. Electrophysical, optical and electrochemical properties. Application in electronics: electrooptical devices, capacitors, diodes.



Ahmad, Imitaz K.

分子構造研究系分子構造学第一研究部門 学振外国人招へい研究者

Academic Record:

B. Sc. Chemistry with Biochemistry (1987-1990)

Queen Mary and Westfield College, University of London

M. Sc. in Chemical Research (1990-1991)

Queen Mary and Westfield College, University of London

Supervisor: Dr. Peter Hamilton

Ph. D. "Spectroscopy of phosphorus-containing transient species" (1992-1995)

Queen Mary and Westfield College, University of London

Supervisor: Dr. Peter Hamilton

During my Ph. D. studies, I successfully recorded spectra of PN , PN^+ , P_2 and P_2^+ using the techniques of emission spectroscopy, Fourier transform infrared spectroscopy, and laser induced fluorescence spectroscopy. Collaborative work undertaken at the University of Cambridge with Dr. Paul Davies generated PO , PO_2 and P_2O using infrared diode laser spectroscopy.

Monbusho Research Experience Fellowship for Young Foreign Researchers 1995

This fellowship enabled me to spend 2 months at the IMS in order to learn the microwave spectroscopy technique under the supervision of Professor Shuji Saito

JSPS/The Royal Society of London Postdoctoral Fellowships (1996-1998)

In Professor Saito's group, I aim to investigate novel phosphorus-bearing compounds of astrophysical significance using microwave spectroscopy.



赵 晓 杰

分子構造研究系分子動力学研究部門 学振外国人特別研究員

I received the Ph. D. (1994), M. S. and B. S. degrees in National Laboratory of Laser Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, P. R. China. Now, I am working with Professor Kitagawa as a JSPS research fellow. The current work is to investigate electron coupled proton transfer in photosynthetic reaction centers by means of resonance Raman spectroscopy. I am interested in elucidating the physiological functions of biomolecules by spectroscopic techniques.



Fiedler, Andreas

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 学振外国人特別研究員

Diploma in Chemistry (1992) and Doctor rer. nat. (1995) at the Technical University Berlin under Prof. Dr. Dr. h. c. Helmut Schwarz, carrying out combined experimental (mass-spectrometry) and theoretical studies on structure and reactivity of transition metal compounds. Currently postdoctoral research (JSPS fellow) at IMS in the group of Prof. Iwata working on the application of molecular dynamics and monte carlo methods on transition metal systems.



董 健

分子集団研究系物性化学研究部門 特別協力研究員

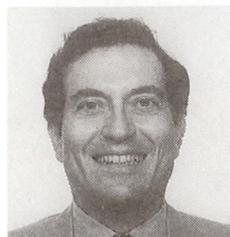
I received my B. S. and M. S. in physics from Jilin University, China, and Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences respectively, and then worked as a research associate at the latter institute before coming to Japan in 1993 to pursue the doctorate study. I finally got my Ph. D. from Graduate University for Advanced Studies in 1996, specializing in Molecular Conductors, which are still my current subject in professor Yakushi's lab of IMS.

I took up a new hobby in Japan: watching baseball in TV, and end up as a Chunichi-Dragon fan, getting familiar with the names of many baseball celebrities. Though I've never played the game at all.



りゅう しん りん
劉 振 林
機器センター 受託研究員

1989年7月中国科学院長春光学精密機械研究所修士課程修了。同年同研究所入所。1993年7月より理化学研究所フォトダイナミクス研究センターにテクニカルスタッフとして今年3月まで勤務しておりました。それから分子研に参りました。赤外及び紫外波長可変固体レーザーとその応用の研究に従事。どうぞよろしく願いたします。

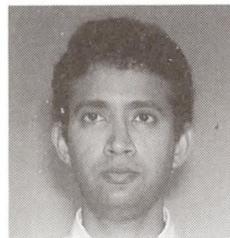


Severino, Patrizio

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 特別協力研究員

B. S. in Chemistry at Università degli Studi di Napoli "Federico II" (1986) under Professor Giuseppe DEL RE working on the ab-initio calculations and their chemical interpretation from an epistemological point of view. M. S. in Glass Engineering at Università di Padova (1991) under Professor Giovanni SCARINCI working on synthesis of glass materials in microgravity conditions.

Currently an European Commission Science and Technology fellow, working with Prof. Iwata on models of the organic conductor polymers such as poly(1-para-n-Nonanoxy-phenyl,2-trans-phenyl, ethylene) ethylene.



Syed Irfan Gheyas

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 特別協力研究員

I received my M. Sc degree (1993) in Electronic Engineering and Ph. D degree (1996) in Energy and Materials Science, both from Saga University, Japan. I then got the opportunity to join the group of Professor Tsuneo Urisu on a JSPS Fellowship for Foreign Researchers (Short Course-29 March -22 June, 1996). Now I am working as a Visiting Scientist in the Institute for Molecular Science with the same group. 'Surface chemistry of adsorbed hydrogen/deuterium on ultrathin Ge deposited over Si (100)' is my current research topic. Outside research, my hobbies extend from sports to 'deep' literature.

新装置紹介

赤外磁気光学測定装置

磁性と伝導の相関は、分子科学をはじめとして、凝縮系の分野では重要な課題であり、現在盛んに研究が行われている。円偏光した赤外光を、外部磁場によって磁気モーメントを揃えた物質に入射した場合、その磁性と伝導の相関を直接観測することが可能である。そこで、UVSORの1つの特徴である赤外光が利用できるビームライン(BL6A1)の放射光の軸外成分の円偏光性を使って、そのような実験を行う装置を開発した。(下図)装置のパラメータは以下の通りである。

超伝導マグネット：オックスフォード社製 SM1000-8S

最大磁場：6T (マグネット温度 4.2K)。8T(2K)。

室温ボア：横向。直径 78mm (内部に超高真空仕様のチャンバーが入る)

クライオスタット：液体ヘリウム連続フロー式 (横置。RuO₂ 温度センサーとヒーター付。自家製。)

温度範囲：10 ~ 300K (液体ヘリウム減圧によりさらに低温まで可)

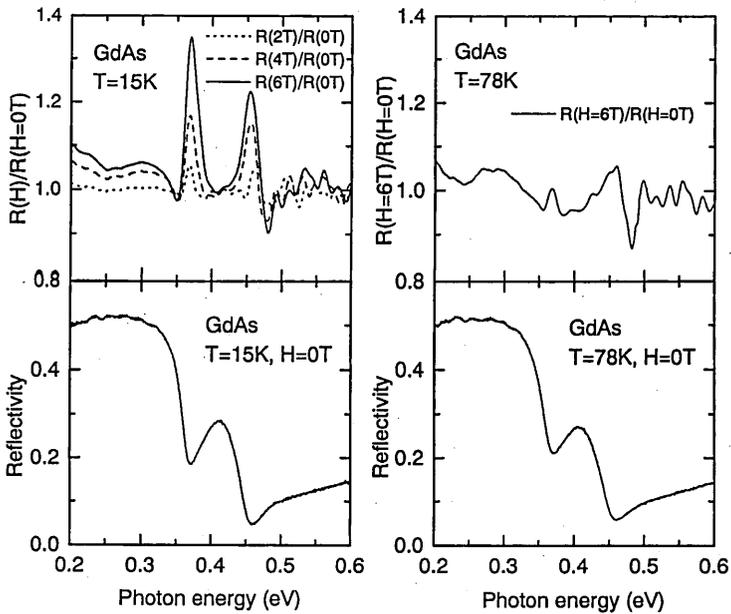
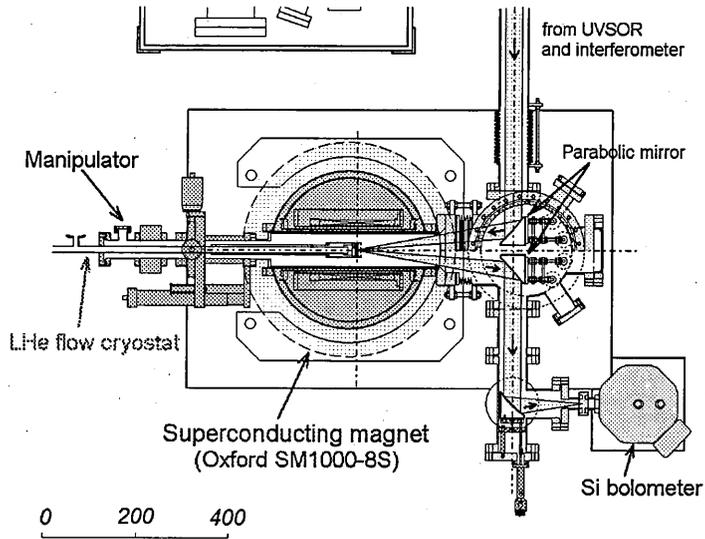
試料サイズ：直径 2, 3, 4mm

測定可能エネルギー範囲：1meV ~ 1eV (BL6A1 の測定可能範囲)

円偏光度：60%以上。(計算値)

この装置は、温度及び磁場の外部摂動を二次元的に変えた光学スペクトルの測定が可能である。測定試料を含む光学系すべてを超高真空に保つため、窓によって測定エネルギー範囲が制限されることはない。このため、赤外だけではなく、真空紫外領域での磁気光学効果の測定も可能である。実測例として、凝縮系の物理の重要なテーマである、重い電子系の GdAs の赤外反射スペクトルの磁場依存性を示す。約 0.4eV 付近に見られる反射率の落ち込みの磁場依存性が、低温になるにつれて大きくなっていることがわかる。このことは、低温における磁気ポーラロンの形成によるものと考えられる。今後、分子科学の研究対象に応用していく予定であるので、是非、活用していただきたい。

(木村真一 記)



高感度蛍光分光光度計

— SPEX Fluorolog-2 —

今回新しく導入された高感度蛍光分光光度計は、3種類の検出器を交換することによって、(1)光電子増倍管による光子計数測光方式により、検出感度が非常に高く、一般汎用型蛍光分光光度計では検出できない微弱蛍光等の測定が可能である。(2)光電子増倍管を交換することによって1.7 μm までの近赤外領域における蛍光測定が可能である。(3)CCDによるマルチチャンネルディテクションが可能であるなどの特徴を持っている。また、りん光の測定も従来どおり可能である。

本分光光度計の構成は、450Wキセノンランプを光源とし、励起側分光器は、焦点距離が22cmのダブル分光器で、励起波長範囲は220nmから650nm、波長分解能は0.2nmである。試料室には、固体あるいは溶液セル用など各種サンプルホルダーが装着可能である他、クライオスタット等を用いた実験など、必要に応じて試料室の一部を着脱することができる。観測側分光器は、CCD検出器に適応するために収差補正されており、回折格子は1200gr/mmでブレース波長が500nm、及び600gr/mmでブレース波長が1 μm の2種類を装備しており、観測波長範囲等に応じて交換することができ、その最高波長分解能は0.1nmである。検出器は、空冷式CCD検出器(UVコート)、電子冷却器付サイドオン型光電子増倍管(Hamamatsu R928)及び液体窒素冷却器付ヘッドオン型光電子増倍管(Hamamatsu R5509)を実験の種類に応じて選択することができる。本分光光度計の制御及びデータ収集は、タワー型スレーブコンピューターとデスクトップ型マスターコンピューターによって集中的に行われており、分光器の初期設定を含めて各種駆動、光電子増倍管の高電圧印加及びCCDの制御、四則演算等が可能である。



本分光光度計は、施設利用者も含め、既に多くの所内外の研究者に使用されている。その多くは、汎用型装置では発光が微弱なために検出不可能であったり、測定波長範囲が1 μm より長波長に至る実験などである。さらに最近、機器センターにおいて、各種分光光度計と各種レーザーを組み合わせた実験をサポートしており、半導体材料など、新材料物質の発光測定にその成果が見いだされている。

(山中孝弥 記)

IMS マシンの成果報告

装置開発室の内部機構、IMS マシン部門はアイデアの重視と所内外との共同開発を基本とした新しい発想の先端の実験装置 (IMS マシン) の提案を所内から募り、その企画・技術調査・設計・試作を行なっている。

前回の報告 (分子研レターズ No.33) 以降の新規課題は、平成 6 年度 IMS マシン「TOF による質量選別を組み合わせた ESDIAD の Detector (提案者: 基礎電子化学 (現名古屋大学) 沢邊恭一)」、 「超高真空・高精度スリット駆動機構 (UVSOR 鎌田雅夫)」、 および平成 7 年度 IMS マシンの「超短パルスピエゾバルブ (電子状態動力学 米倉誠哲)」である。前二者は期間を延長して製作進行中、後者は現在調査中である。以下に ESDIAD についての進捗状況報告を行う。報文は製作担当の鳥居技官による。

「TOF による質量選別を組み合わせた ESDIAD の detector」

提案者: 基礎電子化学 (現名古屋大学) 沢邊恭一

開発担当: 鳥居龍晴, 内山功一

分子が吸着した金属表面に電子線もしくは光を照射すると、イオン化した分子や解離種が脱離することがわかっている。これらの脱離種の角度分布を計測すると吸着構造などの情報が得られる。このような手法は ESDIAD (Electron Stimulated Desorption Ion Angular Distribution) と呼ばれる。本提案は通常の ESDIAD detector の検出部に適当な時間ゲートを設けて、複数の分子が吸着した表面の場合でも、質量選別した角度分布が得られるようにするものである。我々は通常型の時間分解しないタイプの装置を第一段階の目標として、現在、図 1 に示す装置を製作中である。この装置の動作原理を以下に示す。

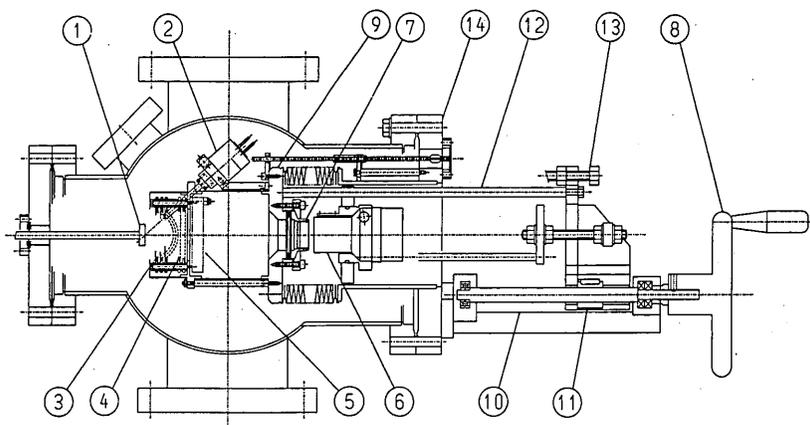


図 1 ESDIAD 装置の概略図

- (1) 試料①に電子銃②から出射した電子線を照射し、表面吸着分子がイオン化して脱離する。
- (2) イオン化した分子は、半球状グリッド（3段）と平面グリッド（2段）により、角度分布を保ち MCP (Microchannel Plates) ⑤まで加速させられる。
- (3) イオン化した分子が MCP ⑤に入射して電子流に変換され、増幅された後、後方に取り付けられた蛍光面に入射して発光する。
- (4) その発光の二次元画像を覗き窓⑦から CCD カメラ⑥によって読みとる。

半球状グリッドは試料からの脱離イオンの角度分布を乱さないために、また平面グリッドは脱離イオンを MCP まで加速させ、かつ不要な電子及び負イオンを除去するために設けてある。このグリッド材質には、超高真空中で使用でき（アウトガスの少ない）、導体で磁性のないものが必要である。今回はモリブデン製メッシュ（線径φ 0.03, 80 メッシュ）を使用した。

蛍光面の発光を読みとる覗き窓の取付部のスペースに制限があるため、窓枠全体のサイズを小さくする必要があった。従来行ってきた方法(1)であるコーンフラットフランジは大きくて使用できないので、KF フランジ（クランプチェーンカップリング）を使用した。真空シールガスケットには軟アルミ合金製のものを使用し、ベーキング温度を 150℃まで上げることができた。

この装置ではグリッド等と試料とが非常に近接しているため、試料交換の際に装置を試料から離すための機構を設けた。試料交換するには、ハンドル⑧を手で回転させる。この回転が角ネジ（オネジ）に伝えられ、メネジ⑪を取り付けた直動テーブル⑩、ESDIAD detector を固定している内側フランジ⑨が移動する。

直動テーブルには LM ガイド（スライドベアリング：THK 社製）を採用し、駆動精度を高めた。直動テーブルとベローズ接合させた内側フランジは 3 本の支柱⑫で固定されている。移動前後での内側フランジの位置の再現性を持たせるためストッパー⑬（長さ調節可能：3 本）を設けた。

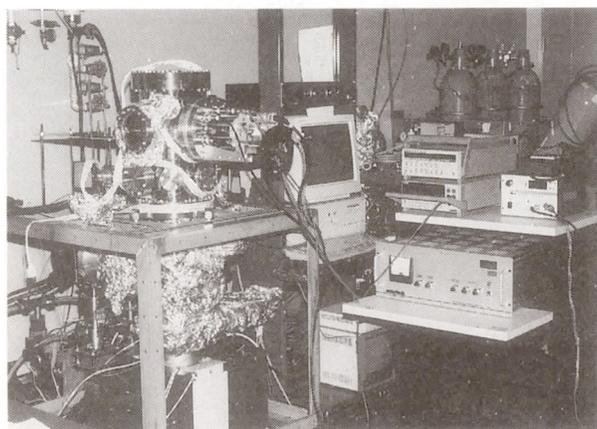


図 2 製作中の ESDIAD 装置外観

装置本体は、真空フランジ(UFC203)に取り付けられ、基本的にはどの真空チャンバーでも使用できるように設計した。

現在、この装置を組立て、装置開発室にある超高真空評価チャンバーに取り付け(図2)、真空リーク試験、移動機構の駆動状態の確認と調整、電子線のデフレクション・プレートの動作試験、電子銃からの電子線エネルギー、スポット径の条件試験などが終了している。

今後、MCPの動作試験を行った後に、実際に試料から脱離したイオンによる蛍光面画像をCCDカメラで写し、コンピューターに取り込む試験を行う予定である。

参考文献

- (1) 浅香, IMS マシンの成果報告:平成5年度 IMS マシン課題「広帯域赤外窓付き超高真空ビューポート」分子研レターズ, No.33 (1995) 42-44.

岡崎コンファレンス報告

第 54 回岡崎コンファレンス

水素原子移動反応の動力学的研究

プログラム

The 54th Okazaki Conference

“Dynamic Studies on Hydrogen Atom Transfer Reactions”

January 23-25, 1996

January 23 (Tuesday)

- 10:00 Opening Address H. Shizuka (Gunma)
 Welcome Address M. Ito (Okazaki)
 H. Shizuka (Gunma) Presiding
- 10:10
- O-1 J. C. (Tito) Scaiano, M. Barra, G. Bucher and D. Weldon (Invited lecture) University of Ottawa, Ottawa, Canada
 Hydrogen atom transfer and addition reactions of atomic species (F, O, Br) in solution.
- 11:00
- O-2 K. Hamanoue
 Kyoto Institute of Technology, Kyoto, Japan
 Photoinduced intra- and inter-molecular hydrogen-atom transfer of planar alkylanthraquinones and sterically strained [6]-1,4-cyclophane-anthraquinone.
- 11:30
- O-3 K. Obi
 Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan
 Hydrogen abstraction reaction in benzophenone clusters.
- 12:00 Lunch
 K. Obi (Tokyo) Presiding
- 13:30
- O-4 S. J. Formosinho (Invited lecture)
 Universidade de Coimbra, Coimbra, Portugal
 Hydrogen atoms transfers in the framework of the intersecting-state model.
- 14:20
- O-5 T. Arai, S. Tobita, and H. Shizuka
 Gunma University, Kiryu, Japan
 Tunnelling effects on sigmatropic hydrogen shifts in the ground state of photorearranged intermediates studied by laser flash photolysis.

- 14:50
O-6 T. Miyazaki
Nagoya University, Nagoya, Japan,
Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Japan
Conclusive evidence for tunneling reaction in hydrogen atom-hydrogen molecule
system at ultralow temperature and application of tunneling reaction to biological
system (mammalian cells) at room temperature.
- 15:20 Coffee Break
K. Kaya (Yokohama) Presiding
- 15:50
O-7 J. A. Syage (Invited lecture)
The Aerospace Corporation, Los Angeles, USA
A tunneling mechanism for excited-state proton transfer in clusters.
- 16:40
O-8 S. Iwata
Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan
Theoretical studies of intra-cluster reactions.
- 17:10
O-9 T. Ichikawa
Hokkaido University, Sapporo, Japan
Hydrogen-atom abstraction from organic molecules by hydrogen atoms in cryoge-
nic solids.

January 24 (Wednesday)

- H. Nakamura (Okazaki) Presiding
- 9:00
O-10 R. K. Frost, F. Hagemeister, D. Schleppenbach, and T. S. Zwier (Invited lecture)
Purdue University, West Lafayette, USA
Fluorescence-dip infrared spectroscopy of tropolone derivatives and their water-
containing clusters.
- 9:50
O-11 H. Sekiya and Y. Nishimura
Kyushu University, Fukuoka, Japan
Vibrational mode-selective proton tunneling in tropolone and 9-hydroxyphene-
nalenone.
- 10:20 Coffee Break
S. Iwata (Okazaki) Presiding
- 10:50
O-12 H. Nakamura
Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan
Semiclassical theories of tunneling and nonadiabatic tunneling.
- 11:20
O-13 F. Hirata
Kyoto University, Kyoto, Japan
A theoretical study for proton affinity in solution.
- 11:50 Lunch
K. Hamanoue (Kyoto) Presiding
- 13:30
O-14 P. B. Bisht, H. Petek, K. Yoshihara, and U. Nagashima
Institute for Molecular Science and The Graduate University for Advanced Stu-

dies, Okazaki, Japan, Ochanomizu Women's University, Tokyo, Japan
Excited State enol-keto tautomerization in salicylic acid: A supersonic free jet study.

14:00

O-15

T. Kobayashi and T. Sekikawa
University of Tokyo, Tokyo, Japan
Proton transfer in the thermochromic salicylideneaniline crystals.

14:30

Coffee Break

15:00-17:00

Poster Presentations

17:30

Banquet

K. Fuke (Kobe) Presiding

January 25 (Thursday)

N. Hirota (Kyoto) Presiding

9:00

O-16

M. T. H. Liu (Invited lecture)
University of Prince Edward Island, Charlottetown, Canada
1,2-Hydrogen migration in carbenes and ylides. Excited state vs. carbene-alkene complex in the decomposition of diazirine.

9:50

O-17

H. Tomioka
Mie University, Tsu, Japan
H atom tunneling in reactions of carbenes.

10:20

Coffee Break

T. Miyazaki (Nagoya) Presiding

10:50

O-18

S. Tero-Kubota, T. Ikoma, and K. Akiyama
Tohoku University, Sendai, Japan
TR-EPR study on the excited triplet states generated from photoinduced intramolecular hydrogen/proton transfer reactions.

11:20

O-19

S. Takeda
Osaka University, Osaka, Japan
Proton tunneling in the hydrogen bonds in crystals and a novel dynamic phenomenon in the H/D mixed system.

11:50

Closing Remarks K. Fuke (Kobe)

Poster Presentations

P-01

K. Tokumura
Kanazawa University, Kanazawa, Japan
The role of triplet states in the high-density laser pulse excitation of molecules undergoing phototautomerization.

P-02

S. Nagaoka
Ehime University, Matsuyama, Japan
Effects of node of wave function upon excited-state-intramolecular-proton-transfer of hydrogen-bonded molecules.

P-03

S. Tobita, N. Kurahayashi, M. Yamamoto, and H. Shizuka
Gunma University, Kiryu, Japan
The ground-state reverse proton transfer of 1-hydroxy-2-acetonaphthone studied by laser photolysis.

P-04

Y. Kimura, M. Yamamoto, S. Tobita, and H. Shizuka

- Gunma University, Kiryu, Japan
Tunnelling effects on 1,2-sigmatropic hydrogen shift in the ground state of photorearranged intermediate of N-acetyl pyrrole.
- P-05** J. C. (Tito) Scaiano, W. M. Nau, and F. L. Cozens
University of Ottawa, Ottawa, Canada
Reactivity and efficiency of singlet- and triplet-excited states in intermolecular hydrogen abstraction reactions.
- P-06** M. Yamaji, K. Okada, and H. Shizuka
Gunma University, Kiryu, Japan
Laser flash photolysis studies on interactions of triplet benzophenone and toluene derivatives.
- P-07** Y. Kajii, K. Shibuya, and K. Obi
University of Tokyo, Tokyo, Japan, Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan
Complex formation of benzophenone ketyl radical and amines.
- P-08** O. Ito
Tohoku University, Sendai, Japan
Reaction rates of hydrogen abstraction of O- and S-centered radicals studied by nanosecond laser flash photolysis.
- P-09** T. Suzuki, U. Okuyama, and T. Ichimura
Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan
Reaction dynamics of hydrogen abstracted intermediates studied by time-resolved thermal lensing technique.
- P-10** T. Ebata and N. Mikami
Tohoku University, Sendai, Japan
Vibrational spectroscopy of the OH stretching vibrations of hydrogen-bonded clusters of phenol in the S_0 and S_1 states.
- P-11** K. Shibuya, S. Suzuki, and I. Koyano
Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan, Tokyo Metropolitan University, Tokyo, Japan, Himeji Institute of Technology, Kamigori, Japan
Dissociation of state selected NO_2^+ ions studied by threshold photoelectron-photoion coincidence techniques.
- P-12** K. Kaya and A. Nakajima
Keio University, Yokohama, Japan
Spectroscopic study of hydrogen bonded 7-azaindole molecular clusters.
- P-13** R. Takasu and K. Fuke
Institute for Molecular Science and The Graduate University for Advanced Studies, Okazaki, Japan
present address: Kobe University, Kobe, Japan
Ultrafast photochemistry of ammonia clusters: Predissociation of NH_3 , and formation and decomposition of clusters containing the NH_4 radical through tunneling.
- P-14** Y. Sakaguchi
The Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), Wako, Japan
Hydrogen abstraction reactions by $\pi \pi^*$ triplet states of aromatic carbonyl compounds.
- P-15** Y. Tanimoto, Y. Fujiwara, M. Yamaoka, and R. Nakagaki
Hiroshima University, Higashi-Hiroshima, Japan, Kanazawa University, Kanazawa, Japan
Effect of high magnetic field on intramolecular hydrogen abstraction reac-

tion of bifunctional chain molecules.

- P-16** H. Hiratsuka, S. Kobayashi, S. Kuroda, T. Okutsu, and S. Murakami
Gunma University, Kiryu, Japan, Toshiba Silicone Co. Ltd., Ohta, Japan
Nanosecond laser flash photolysis study of trimethoxysilyldiphenylmethane.
- P-17** S. Murata, Y. Tsubone, and H. Tomioka
Mie University, Tsu, Japan
Mechanistic studies of intramolecular CH insertion reaction of arylnitrene.
- P-18** M. Hoshino
Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN), Wako, Japan
Photoreduction of nitrosyl metalloporphyrins.
- P-19** T. Nakayama and K. Hamanoue
Kyoto Institute of Technology, Kyoto, Japan
Photophysics and photochemistry of tert-butylanthraquinones (the 1-tert-butyl, 1,2-ditert-butyl, 1,2,3-tri-tert-butyl and 1,2-di-tert-butyl-3-trimethylsilyl Compounds)

第 55 回岡崎コンファレンス

生体機能発現における金属蛋白質の作用機構

プログラム

The 55th Okazaki Conference

“Molecular Mechanisms on the Metalloproteins in Biological Functions”

February 5-7, 1996

Feb. 4 (Sunday)

17:00-19:00 Registration.

Feb. 5 (Monday)

- 9:00-9:10 Opening Address.
M. Ito (the Director General of IMS)
- 9:10-9:40 Calmodulin binding and electron transfer in NOS.
R. Stevens-Truss (Univ. of Michigan)
- 9:40-10:10 Nitric oxide as a ligand with a high affinity for ferrous hemes.
T. Yoshimura (Inst. Life Support Tech.)
- 10:10-10:40 Structure and function of a complex metallo-flavoprotein.
T. Nishino (Nippon Med. Sch.)
- 10:40-11:10 Coffee Break
- 11:10-11:40 Mechanism for the activation of photoreactive nitrile hydratase.
M. Odaka (RIKEN)
- 11:40-12:10 Structure and molecular mechanism of NO reductase cytochrome P450nor.
Y. Shiro (RIKEN)
- 12:10-12:30 Photo Service
- 12:30-13:10 Lunch
- 13:10-13:40 Metal-phosphate interactions as models of signal regulation.
A. Odani (Nagoya Univ.)
- 13:40-14:10 Intelligent carbohydrate complexes on induced-fit model.
S. Yano (Nara Women's Univ.)
- 14:10-14:40 Structural and functional switching of semisynthetic myoglobins.
I. Hamachi (Kyushu Univ.)
- 14:40-15:10 Models of biological signal transduction system via ion channels.
Y. Kobuke (Shizuoka Univ.)
- 15:10-15:30 Coffee Break
- 15:30-16:20 Challenges of biological N₂ fixation: The chemistry of nitrogen, hydrogen and nitrogen hydrides in the coordination sphere of metal sulfur complexes.

- D. Sellmann (Univ. Erlangen-Nürnberg)
- 16:20-16:50 Chemical function of NH--S hydrogen bond in iron-sulfur proteins.
N. Ueyama (Osaka Univ.)
- 16:50-17:20 Regulation of redox properties of ferredoxin by the site-directed mutagenesis.
S. Aono (Jap. Adv. Inst. Sci. Tech.)
- 17:20-17:50 Structure and reaction mechanism of the Mn-cluster in photosynthetic oxygen evolution: Involvement of Ca²⁺ and Cl⁻.
T. Ono (RIKEN)
- 17:50-18:20 Catalase-like activity of dimanganese (II) complexes.
H. Sakiyama and H. Okawa (Yamagata Univ., Kyushu Univ.)
- 18:30-20:30 Banquet

Feb. 6 (Tuesday)

- 9:00-9:50 The importance of RNA backbone functionalities and metal ions in folding and catalysis by group II intron ribozymes.
A. Pyle (Columbia Univ.)
- 9:50-10:20 Selective strand scission of nucleic acids-molecular design of synthetic restrict enzymes.
M. Komiyama (Univ. Tokyo)
- 10:20-10:50 Structure and functional switch mechanism of the Escherichia coli Ada protein.
T. Ohkubo (Jap. Adv. Inst. Sci. Tech.)
- 10:50-11:10 Coffee Break
- 11:10-11:40 Role of Mg²⁺ ions in reactions catalyzed by hammerhead ribozyme.
K. Taira (Natl. Inst. Biosci. Human Tech.)
- 11:40-12:10 Zinc complexes as targeting agents for nucleic acids.
M. Shionoya (IMS)
- 12:10-13:00 Lunch
- 13:00-13:50 Whole structure of resting oxidized bovine heart cytochrome c oxidase at 2.8 Å resolution.
T. Tsukihara, H. Aoyama, E. Yamashita, T. Tomizaki, H. Yamaguchi, K. Shinzawa-Ito, R. Nakashima, R. Yaono, and S. Yoshikawa (Osaka Univ., Himeji Inst. Tech.)
- 13:50-14:20 Resonance Raman characterization of reaction intermediates in cytochrome c oxidase catalysis.
T. Ogura (IMS)
- 14:20-14:50 Modeling reaction of oxygen evolution with manganese porphyrin dimers.
Y. Naruta (Kyushu Univ.)
- 14:50-15:10 Coffee Break
- 15:10-15:40 The roles of threonine252 on the oxygen activation by cytochrome P-450cam.
H. Shimada (Keio Univ.)
- 15:40-16:10 Roles of amino acid residues around heme vicinity on their enzymic activities.
Y. Watanabe (IMS)
- 16:10-17:00 P450 structures and heme enzyme engineering.
T. Poulos (Univ. Cal. Irvin)
- 17:00-19:00 Poster Session
- P-1** Structure and function of module-substituted hemoproteins.
K. Wakasugi, K. Inaba, K. Ishimori, and I. Morishima (Kyoto Univ.)
- P-2** Roles of valine-98 and glutamic acid-72 of putidaredoxin in the electron transfer complexes with putidaredoxin reductase and P450cam.
M. Aoki, K. Ishimori, and I. Morishima (Kyoto Univ.)

- P-3 Preparation and characterization of novel hemoproteins by module substitution in hemoglobin subunits.
K. Inaba, K. Wakasugi, K. Ishimori, and I. Morishima (Kyoto Univ.)
- P-4 Mechanism for the formation of oxo-iron(V) porphyrin complexes
 $O = Fe(V)$.
T. Murakami, Y. Watanabe, and I. Morishima (Kyoto Univ., IMS)
- P-5 Model study on nitrite reductases: Roles of oxo-substituent of heme dl in conversion of nitrite to nitric oxide.
T. Ichikawa, E. Sakamoto, S. Ozawa, Y. Watanabe, and I. Morishima (Kyoto Univ., IMS)
- P-6 Roles of histidine-asparagine hydrogen bond in the heme distal site of peroxidase.
M. Tanaka, S. Nagano, Y. Watanabe, and I. Morishima (Kyoto Univ., IMS)
- P-7 Model studies of thyroxine-carrier protein bindings. Weak interactions in ternary copper(II) complexes involving 3,5-diiodo-L-tyrosinate.
F. Zhang, H. Masuda, A. Odani, and O. Yamauchi (Nagoya Univ., Nagoya Inst. Tech.)
- P-8 Weak interaction involving proximal aromatic rings. Model studies.
A. Odani, T. Takagi, H. Ohara and O. Yamauchi (Nagoya Univ.)
- P-9 Rapid and efficient alkane functionalization catalyzed by diiron complex and detection of the related intermediate.
M. Kodera, W. Shimakoshi, Y. Taniike, K. Kanou (Doshisha Univ.)
- P-10 Molecular mechanism of DNA recognition by C_2H_2 -type zinc finger transcription factor Spl.
M. Nagaoka and Y. Sugiura (Kyoto Univ.)
- P-11 A pronounced axial thiolate ligand effect on the reactivity of the high valent oxo-iron porphyrin intermediate.
T. Higuchi (Univ. Tokyo)
- P-12 Modelling the structure and reactivity of urease.
K. Yamaguchi (Osaka Univ.)
- P-13 ESR studies of oxo iron(IV) porphyrin π -cation radical complexes.
H. Fujii (Inst. Life Support Tech.)
- P-14 Hydrocarbon functionalization catalyzed by ruthenium-polypyridyl complexes with peroxides and molecular oxygen.
T. Kojima (Kyushu Univ.)
- P-15 Synthesis, characterization, and biological activity of metal complexes derived from amino sugar.
S. Inoue, R. Nouchi, K. Mogami, M. Kato, T. Suzuki, and S. Yano (Nara Women's Univ.)
- P-16 Synthesis, characterization, and DNA binding properties of (1,2-diaminoethane)-platinum(II) complexes linked to DNA intercalators.
K. Mogami, Y. Mikata, M. Yokoyama, K. Ikehara, M. Kato, I. Okura and S. Yano (Nara Women's Univ., Tokyo Inst. Tech.)
- P-17 Model complexes of non-heme proteins.
M. Ito and L. Que Jr. (Oita Univ., Univ. Minnesota)
- P-18 Reaction of peroxo-iron(III) porphyrin complexes.
Y. Goto, S. Wada Y. Watanabe, and I. Morishima (IMS, Kyoto Univ.)
- P-19 Molecular design of artificial heme peroxygenase.
S. Ozaki, T. Matsui, and Y. Watanabe (IMS)
- P-20 Investigation of molecular catalysts for activation and effective fixation of

CO₂.

H. Nakajima and K. Tanaka (IMS)

- P-21** Functional model studies for lipoxygenases.
T. Funabiki, A. Suzuki, and S. Yoshida (Kyoto Univ.)
- P-22** Efficient photogeneration of reactive species of reconstituted semisynthetic myoglobin appending ruthenium complex.
S. Tsukiji, S. Tanaka, S. Shinkai, and I. Hamachi (Kyushu Univ.)
- P-23** Structures and properties of P-450 model complexes containing intramolecular single and double NH---S hydrogen bond.
T. Okamura, N. Nishikawa, Y. Yamada, N. Ueyama, and A. Nakamura (Osaka Univ.)
- P-24** In vivo EPR detection and imaging of endogenous nitric oxide using a DTCS-Fe complex as a spin trap reagent.
S. Fujii, H. Yokoyama, T. Yoshimura, K. Oikawa, and H. Kamada (Inst. Life Support Tech.)

Feb. 7 (Wednesday)

- 9:00-9:50 Modeling high valent intermediates in the oxygen activation chemistry of methane monooxygenase and ribonucleotide reductase.
L. Que, Jr. (Univ. Minnesota)
- 9:50-10:20 Synthetic models for reactive intermediates in copper monooxygenases.
K. Fujisawa (Tokyo Inst. Tech.)
- 10:20-10:50 Reactivity of diiron(II) complexes with molecular oxygen.
M. Suzuki (Kanazawa Univ.)
- 10:50-11:10 Coffee Break
- 11:10-12:00 Structure and mechanism of copper-containing oxidases: Enzymes with built-in-cofactors.
P. F. Knowles (Univ. Leeds)
- 12:00-12:30 Functional models of copper monooxygenases.
S. Itoh (Osaka Univ.)
- 12:30-13:00 Design and synthesis of model systems for dioxygen binding in mononuclear copper proteins.
H. Masuda (Nagoya Inst. Tech.)
- 13:00-13:15 Closing Remarks.

第 56 回岡崎コンファレンス

凝縮相中の量子力学：化学系への応用

プログラム

The 56th Okazaki Conference

“Condensed Phase Quantum Dynamics: Application to Chemical Systems”

September 27-29, 1996

September 27 (Friday)

Discussion Leader: Rob D. Coalson

- 9:20-9:30 Welcome address by Director-in-General, Prof. M. Ito
9:30-10:30 Koji Ando “*Solvation dynamics and electronic structure development of an organic probe in polar solvents*”
10:30-11:30 Josse Onuchic “*Pathway tubes controlling electron transfer in proteins*”
11:30-11:40 Taking photograph
11:40-13:00 Lunch

Discussion Leader: Majed Chergui

- 13:00-14:00 Joseph Hupp “*Resonant Vibrational and Electronic Spectroscopy of Strongly Interacting Charge-Transfer Systems*”
14:00-15:00 Shuichi Kinoshita “*Optical Spectroscopy of Molecule in Disordered Condensed Matter*”
15:00-18:30 Poster sessions

September 28 (Saturday)

Discussion Leader: Yasuo Kanematsu

- 9:00-10:00 Norbert Scherer “*Ultrafast and Coherence Studies of Reaction Dynamics*”
10:00-11:00 Keisuke Tominaga “*Off-resonant Higher-order Nonlinear Spectroscopy by Ultrafast Laser*”
11:00-11:15 Break
11:15-12:15 Majed Chergui “*Ultrafast dynamics involving Rydberg states and chemically reactive surfaces of small molecules in rare gas solids*”
12:15-13:45 Lunch

Discussion Leader: Keisuke Tominaga

- 13:45-14:45 Yoshitaka Tanimura “*Nonlinear optical processes of molecular system with anharmonic potential in condensed phase*”
14:45-15:45 Rob. D. Coalson “*Nonequilibrium relaxation and Laser Control of Condensed Phase Electron Transfer Reactions*”

- 15:45-16:00 Break
 16:00-17:00 Yi-Jing Yang "Semiclassical dynamics in control and detection of molecular dynamics in condensed phases"
 17:30-20:30 Reception (at Sanglia)

September 29 (Sunday)

- Discussion Leader: Jose Onuchic
 9:00-10:00 Michitoshi Hayashi "Coherent dynamics of photosynthetic reaction centers"
 10:00-11:00 David Klug "What can quantum dynamical studies tell us about photosynthesis?"
 11:00-11:15 Break
 11:15-12:15 Vladimir Chernyak "Solvation Dynamics and Collective Excitations in Nonlinear Spectroscopy"
 12:15-12:30 Closing Remarks by Yoshitaka Tanimura
 14:00- Excursion (Okazaki castle, guided by Ko Okumura)

POSTER SESSIONS (SEPTEMBER 27, FRIDAY, 15:00-18:30)

1. A. Morita and S. Kato (Dep. of Chemistry, Kyoto University)
 "Analysis of electronic polarization: origin of anomalously slow diffusion of aromatic radicals in solution"
2. K. Okumura and Y. Tanimura (IMS)
 "The $(2n + 1)$ th-order off-resonant spectroscopy from the $(n + 1)$ th-order anharmonicities of molecular vibrational modes in condensed phase"
3. S. Yokojima, T. Meier, S. Mukamel (Department of Chemistry, Univ. of Rochester)
 "Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanocrystals using the time-dependent Hartree-Fock technique"
4. C. Silva, P. K. Walhout, K. Yokoyama⁰, P. F. Barbara (Dep. of Chem., U of Minnesota)
 "Photophysics and photochemistry of the solvated electron in water"
5. Y. Kanematsu, Y. Ichino, N. Hashimoto and T. Kushida (Dep. of Physics, Osaka Univ.)
 "Universality of spectral density function of dye molecules in disordered materials"
6. A. Okada, V. Chernyak, and S. Mukamel (Dep. of Chemistry, University of Rochester)
 "Electron Transfer Rates in Solvents with Complex Spectral Densities"
7. M. Nagaoka, Y. Okuno and T. Yamabe (Institute for Fundamental Chemistry)
 "Theoretical Studies of Reactive Energy Flow: Formamidinium Isomerization in Aqueous Solution"
8. S. Takeuchi and T. Tahara (IMS)
 "Ultrafast Fluorescence Study on the Excited Singlet State Dynamics of all-trans Retinal "
9. Y. Nagasawa, S. A. Passino, T. Joo, and G. R. Fleming (Dep. of Chem. and James Franck Inst., The University of Chicago)
 "Temperature Dependence of Optical Dephasing in Polymer Glass. Three Pulse Photon Echo Peak Shift Measurement"
10. S. Matsuo and T. Tahara (IMS)
 "Phase-stabilized Optical Heterodyne Detection of Impulsive Stimulated Raman Scattering"
11. Y. Ohtsuki, T. Kato, Y. Fujimura, S. H. Lin (Tohoku Univ., Institute of Atomic and Molecular Sciences)
 "Adiabatic theory of laser-induced vibrational predesorption from insulating substrates"
12. Y. Naitoh and K. Yoshihara (IMS)
 "Ultrafast UV-Photoinduced Chemical Reaction in Neat CH_3I "
13. S. NANBU, S. Minamino, M. Aoyagi (IMS)
 "Theoretical Study of the Potential Energy Surfaces and Dynamics of $CaNC/CaCN$ "
14. C. Zhu (IMS)
 "Unified semiclassical theory for the two-state system: Analytical solution for scattering matrices"

15. Y. Masuda (Faculty of science, Ochanomizu university)
"Solvent effect on ultrafast intramolecular electron transfer rate of biferrocen monocation (Fe(II), Fe(III))"
16. Y. Kasai, N. Yonekura, M. Takami (RIKEN)
"The S₀-S₁ transition of naphthalene in superfluid helium"
17. K. Seki (National Institute of Materials and Chemical Research)
"External field induced anisotropy in dielectric relaxation"
18. K. Kamada, M. Ueda, K. Ohta, Y. Wang[#], K. Ushida^{\$}, and Y. Tominaga[#] (Osaka National Research Institute, ^{\$}RIKEN, [#] Department of Physics, Ochanomizu University)
"Coherent and diffusive nuclear motions of aromatic molecular liquids containing chalcogen atoms investigated by femtosecond OHD-RIKES and low frequency Raman spectroscopy"
19. S. Saito and I. Ohmine (Nagoya University)
"Third order nonlinear response of liquid water"
20. K. Ushida and A. Kira (RIKEN)
"Solvation Dynamics in Formation Process of Dimer Radical Ions"
21. Y. Tanimura and Y. Maruyama^o (IMS and ^o The Graduate Univ. for Advanced Studies)
"Gaussian-Markovian multi-state quantum Fokker-Planck equation approach to nonlinear spectroscopy of a displaced Morse oscillators system: photo dissociation"

平成 8 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 [課程博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
藤 井 俊 明	前周期遷移金属の二原子水素化物と二水素化物に関する分子軌道法を用いた理論的研究	理 学	H 8. 9.30
加 藤 浩 之	シリコン表面に吸着した N ₂ O の熱および光誘起反応のダイナミクス	理 学	H 8. 9.30
渡 邊 秀 和	Theoretical Studies of Structures, Reactions, and Spectroscopies of Hydrated Clusters	理 学	H 8. 9.30

[論文博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
大 橋 治 彦	炭素及びケイ素とその化合物の放射光励起エッチング反応の研究	理 学	H 8. 9.30
熊 崎 茂 一	Studies on Primary Energy Transfer and Electron Transfer in Isolated Reaction Centers of Photosystem I and II	理 学	H 8. 9.30
湛 昌 国	Ab Initio Studies on the Structures and Properties of Some Molecular Ions	理 学	H 8. 9.30

機能分子科学専攻 [課程博士]

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
橋 本 伸 久	アセチレン \bar{A}^1Au 状態の緩和過程における量子状態依存性	理 学	H 8. 9.30
樋 山 みやび	二原子分子の超励起状態の特質と動力学	理 学	H 8. 9.30
席 振 峰	Zirconocene Mediated or Catalyzed Novel Carbon-Carbon Bond Forming Reactions of Alkynes	理 学	H 8. 9.30

総合研究大学院大学平成8年度（10月入学）新入生紹介

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	和泉田 真司	機器センター	非線形媒質からのパルスレーザー誘起 THz 電磁波発生
	欧阳 建勇	物性化学	分子性導体の電子構造に関する研究
	劉 振林	機器センター	全固体紫外レーザーからの超短パルスの発生
機能分子科学	今村 穰	分子基礎理論第二	有機物導体の電子状態と物性

研究会報告〈プログラムを掲載〉

「ポリマー・生体系の分子科学」

1996年5月9日(木)～11日(土) 分子科学研究所研究棟101号室

5月9日(木)

1:00 - 1:10 はじめに 岡本祐幸 (分子研)

座長 高須昌子 (金沢大理)

1:10 - 1:40 L1 高分子結晶化初期段階における構造形成
今井正幸 (東大物性研)・梶 慶輔 (京大化研)

1:40 - 2:10 L2 末端架橋型ポリマーネットワークの小角中性子散乱と結晶化
柴山充弘 (京都工繊大)

2:10 - 2:40 L3 ゲル中、外場下での高分子の挙動
増淵雄一・小穴英広・松本充弘・土井正男 (名大工)

休憩

座長 樋渡保秋 (金沢大理)

3:00 - 3:40 L4 Polymer Brushes
土井正男 (名大工)

3:40 - 4:20 L5 高分子鎖ダイナミックスの階層構造
牛木秀治・角森史昭 (東京農工大)

休憩

座長 吉川研一 (名大人間情報)

4:40 - 5:20 L6 高分子可逆ゾル・ゲル転移の分子機構
一分子会合から生体運動へ
田中文彦・石田雅彦 (東京農工大)

5:20 - 5:50 L7 高分子系の緩和モード
高野 宏 (慶大理工)

5:50 - 6:20 L8 高分子/ブロック共重合体の動力学
川勝年洋 (都立大理)

6:30 - 懇親会

5月10日(金)

座長 兼松安夫 (阪大理)

9:00 - 9:40 L 9 粘弾性相分離:新しい相分離様式?

田中 肇 (東大生産研)

9:40 - 10:20 L 10 紐の相転移現象—長鎖DNAの折り畳み—

吉川研一 (名大人間情報)

休憩

座長 今井正幸 (東大物性研)

10:40 - 11:20 L 11 高分子電解質溶液の構造

梶 慶輔 (京大化研)

11:20 - 11:50 L 12 芳香族ビニルポリマーにおける側鎖間の電荷ホッピング過程:ピコ秒過渡二色性の測定による直接的検出

宮坂 博 (京都工繊大)

昼休み

座長 後藤祐児 (阪大理)

1:20 - 1:50 L 13 タンパク質の全電子計算とその統合シミュレーション環境

佐藤文俊・柏木 浩 (九工大・情報工)

1:50 - 2:30 L 14 蛋白質・有機非晶質系のガラス転移と構造変化ダイナミクスのレーザー分光による研究

榎田孝司 (阪大理)

2:30 - 3:00 L 15 低温下でのX線結晶構造解析で観た蛋白質の水和構造

中迫雅由 (理研)

休憩

座長 平田文男 (分子研)

3:20 - 3:50 L 16 Scaled particle 理論による蛋白質の水和自由エネルギーの計算

入佐正幸 (新技団)

3:50 - 4:20 L 17 蛋白質と核酸の定量的なシミュレーションに必要な不可欠な条件

斎藤 稔 (新情報処理開発機構)

4:20 - 4:50 L 18 蛋白質・水系のダイナミクスに見られる特徴的振舞い

北尾彰朗 (京大理)

4:50 - 5:20 L 19 Multicanonical Simulations

木寺詔紀 (京大理) ・中島伸介 (生物分子工研)

夕食

7:00 - 9:30 ポスターセッション

5月11日(土)

座長 笹井理生 (名大人間情報)

9 : 00 - 9 : 30 L 20 拡散方程式の改良による分子のエネルギー最小化
中村周吾・広瀬 仁・池口満徳・清水謙多郎・土井淳多 (東大農)

9 : 30 - 10 : 10 L 21 膜タンパク質の立体構造形成
美宅成樹 (東京農工大)

休憩

座長 岡本祐幸 (分子研)

10 : 30 - 11 : 10 L 22 Experimental Sketch of Landscapes in Protein Sequence Space
四方哲也 (阪大工)

11 : 10 - 11 : 40 L 23 配列の進化的選択とフォールディング
笹井理生 (名大人間情報)

11 : 40 - 12 : 10 L 24 蛋白質折れたたみのスピングラスモデル
時田恵一郎 (阪大理)

昼休み

座長 美宅成樹 (東京農工大)

1 : 30 - 2 : 10 L 25 蛋白質集積体
永山国昭 (東大教養)

2 : 10 - 2 : 50 L 26 蛋白質の折れたたみを助ける蛋白質, シャペロニン
吉田賢右・田口英樹 (東工大資源化学研)

2 : 50 - 3 : 30 L 27 蛋白質のフォールディング中間体の構造と安定性
後藤祐兎 (阪大理)

閉会

ポスター講演

1996年5月10日(金)午後7:00 - 9:30 分子科学研究所研究棟201号室

P 1 Stickerを持つポリマーの慣性半径分布
浦上直人・高須昌子 (金沢大理)

P 2 直鎖高分子希薄溶液における混合エントロピーの格子モデルシミュレーションによる評価
志田和人・木村正行 (北陸先端大情報科学)
大野かおる・川添良幸 (東北大金研)

P 3 硬いポリマーにおける単分子凝縮のシミュレーション
野口博司 (名大人間情報)

P 4 鎖状分子凝集系の秩序構造形成に関する計算機実験
竹内久雄 (三菱化学・横浜総合研究所)

- P 5 ずり流動下における高分子ブロック共重合体ラメラ相の構造変化
樹神弘也・土井正男 (名大工)
- P 6 高分子結晶化の分子動力学シミュレーション
藤原 進 (核融合研)
- P 7 棒状分子—球状分子二成分系のスメクチック A 相
香田智則 (山形大工)
- P 8 2 成分両親媒性分子膜の膜上相分離と膜変形のダイナミクス
谷口貴志 (京大理)
- P 9 高分子膜の分子動力学
伊藤 周・松本充弘・土井正男 (名大工)
- P 10 分子場に基づいたモンテカルロ法による液晶の研究
〈分子の柔らかさの I-N 相転移への影響〉
真田泰平・山田慶治・土井正男 (名大工)
- P 11 アミノキンド系界面活性剤の構造相転移
寺田弥生・前田 悠・小田垣孝 (九大工)
- P 12 非架橋中性高分子溶液中での巨大 DNA のダイナミクス
小穴英廣・増淵雄一・松本充弘・土井正男 (名大工)
上田正則・吉川研一 (名大人間情報)
- P 13 水溶液中長鎖 DNA 分子の高次構造制御
山崎裕一 (名大人間情報)
- P 14 Large Discrete Transition of Single DNA Chain between Coil and Globule
高橋真澄 (名大人間情報)
- P 15 Folding of Long T4DNA Chains Induced by Distearyltrimethylammonium Bromide
and Unfolding of the Complexes by Neutral Liposomes
Sergey M. Mel'nikov (名大人間情報)
- P 16 過渡的ホールバーニングで見る蛋白質の構造揺らぎ
柴田 穰・栗田 厚・櫛田孝司 (阪大理)
- P 17 モルテングロビュール状態におけるタンパク質と膜の相互作用：CAB
田中美千子・江藤彰紀・美宅成樹 (東京農工大)
- P 18 二次元電子密度マップを利用したロドプシンの膜貫通ヘリックス配置予測
諏訪牧子・広川貴次・美宅成樹 (東京農工大)
- P 19 膜タンパク質立体構造予測のためのヘリックス配置・配向・傾き決定法の開発
広川貴次・諏訪牧子・美宅成樹 (東京農工大)
- P 20 分子動力学法による Helix-Coil 転移の熱力学
高野光則・高橋卓也・永山国昭 (東大総合文化)
- P 21 蛋白質複合体の安定性における静電相互作用
高橋卓也 (東大総合文化)

- P 22 蛋白のアミノ酸間の平均距離の統計に基づく有効残基間ポテンシャル
菊地武司 (日本チバガイギー国際科学研)
- P 23 Mathematical Morphology を用いたタンパク質分子の溶媒接触表面と cavity の抽出
升屋正人 (分子研)
- P 24 Variations in the Energy Landscape of Met-enkephalin under Small Changes in the
Force Field
Frank Eisenmenger (Humboldt University Berlin)
Hansmann, Hans Ulrich Ewald (ETH Zurich)
- P 25 Numerical Comparison of Three Recently Proposed Algorithms in the Protein Folding Problem
Ulrich H. E. Hansmann (ETH Zurich) ・岡本祐幸 (分子研)
- P 26 疎水水和を考慮したペプチドの動的立体構造の新モンテカルロ法による研究
入佐正幸 (新技術事業団柳田プロジェクト)
Hansmann, Hans U. E. ・光武亜代理 ・岡本祐幸 ・平田文男 (分子研)

「若手分子科学研究者のための物理化学研究会」

期日 1996年5月24日(金)

会場 分子科学研究所 研究棟201号室

提案代表者 小谷野猪之助 (姫路工大・理)

- | | | |
|-------------|------|--|
| 13:30~13:35 | 開会の辞 | 谷村吉隆 (分子科学研究所) |
| 13:35~14:05 | 講演 | 超励起分子のダイナミクス
鵜飼正敏 (東京農工大工学部) |
| 14:35~15:05 | 講演 | 量子波束法の基礎と応用
山下晃一 (東京大工学部) |
| 15:05~15:35 | 講演 | 気相分子, 分子クラスターの線形, 非線形分光
—光と分子の相互作用と励起分子の緩和過程—
江幡 孝之 (東北大理学部) |
| 15:35~15:50 | 休憩 | |
| 15:50~16:20 | 講演 | 液体・溶液中の流体力学モードに関わる緩和現象
松岡辰郎 (名古屋大工学部) |
| 16:20~17:10 | 講演 | レーザーのスペクトル制御及び波長変換と原子 (イオン) 制御への応用
渡辺昌良 (郵政省通信総合研究所) |
| 17:10~17:15 | 閉会の辞 | 小谷野猪之助 (姫路工大理学部) |
- (講演 20分, 討論 10分)

「大気化学反応の素過程」

提案代表者 川崎昌博 (北大電子科学研)

5月27日

- 13:30-14:10 塩素・臭素の不均一反応が成層圏化学に及ぼす効果
近藤 豊 (名大STE研)
- 14:10-14:30 不均一反応特に吸着係数
幸田清一郎 (東大)
- 14:30-15:10 海塩粒子上の不均一反応過程
秋元 肇 (東大)
- 15:10-15:30 休憩
- 15:30-15:50 NO_x と HNO_x の環状不安定分子
岩田末廣 (分子研)
- 15:50-16:00 ライダーによる成層圏エアロゾルの観測
橋本 訓 (北大)
- 16:00-16:40 対流圏 OH, HO₂ ラジカル濃度制御に係わるラジカル反応
鷺田伸明 (国立環境研)
- 16:40-17:00 大気中の OH ラジカル役割等について
小池 真 (名大)
- 17:00-17:20 フッ化炭化水素と OH ラジカルの反応速度定数の理論計算
青柳 睦 (分子研)
- 17:20-17:30 赤外・紫外二重共鳴法による OH 検出の試み
辻 和秀 (東工大)
- 17:30-17:40 S(3P) + O₂ 反応のメカニズム
三好 明 (東大)

その後 懇親会 (サングリアにて)

5月28日

- 9:00-9:40 シベリアの CH₄ 計測
井上 元 (国立環境研)
- 9:40-10:20 大気化学研究における同位体効果測定的重要性
冬季間における大気・地表面のガス交換
田中教幸 (北大)

- 10:20-10:40 光化学的履歴の推定について
北 和之 (東大)
- 10:40-11:00 休憩
- 5月28日
- 11:20-11:40 低高度オゾンの光分解
川崎昌博 (北大)
- 11:40-11:50 種々の条件 (環境) 下での酸素原子の反応
高柳正夫 (東京農工大)
- 11:50-12:00 準安定窒素原子 $N(^2D)$ の反応素過程
梅本宏信 (北陸先端大)
- 12:00-12:10 原始地球および惑星大気における CN ラジカル反応
關 金一 (横国大)
- 12:10 まとめ
川崎昌博 (北大)
近藤 豊 (名大)

「有機機能材料の基盤となる新規パイ電子系の分子設計と創出」

(場所：分子科学研究所 研究棟 301 号室)

提案代表者 大坪徹夫 (広島大・工)

6月7日(金)

- 13:30 あいさつ
- 13:35 大坪徹夫 (広島大工) 「新規有機 π 電子レドックス系の設計」
- 13:50 山下敬郎 (分子研) 「ドナー- π -アクセプター型複素環化合物の合成と物性」
- 14:05 小林啓二 (東大教養) 「水素結合による超分子結晶の構築と機能化」
- 14:20 深澤義正 (広大理) 「パイ電子相互作用と分子認識」
- 14:35 坂田祥光 (阪大産研) 「電子移動による電荷分離機能を持つパイ電子系の分子設計」
- 14:50 中筋一弘 (阪大理) 「水素結合と配位結合による分子システムの開発」
- 15:05 小田雅司 (阪大理) 「芳香環拡張ヘキサシアノトリメチレンメタン類」
- 15:20 戸部義人 (阪大基礎工) 「大環状フェニルアセチレン分子の合成と自己集合」
- 15:40-16:00 休憩
- 16:00 横山正明 (阪大プロセス工学) 「有機顔料の分子配列と光電物性」
- 16:15 小松紘一 (京大化研) 「強固なシグマ骨格により安定化されたデヒドロアヌレン類の合成と酸化還元特性」
- 16:30 山本浩司 (阪府大総合科学) 「フラレンカプセルの合成と性質」
- 16:45 杉本豊成 (阪府大先端科学研) 「新規 TCNQ/TCNQ-混合塩の特異な磁氣的性質」
- 17:00 小倉克之 (千葉大工) 「窒素と硫黄の特性を活用したパイ電子系の構築とその応用」
- 17:15 西村 淳 (群馬大工) 「パイ電子系間配置による新規機能」
- 18:00-20:00 全体会議と懇親会

6月8日(土)

- 9:00 森 章 (九大機能研) 「非交互パイ電子系を素材とする液晶の設計」
- 9:15 入江正浩 (九大工) 「ジアリールエテン単結晶のフォトクロミズム」
- 9:30 辻 孝 (北大理) 「高度に歪んだパラシクロファンの速度論的安定化」
- 9:45 菅原 正 (東大教養) 「ツインドナーを用いた包接型 CT 錯体およびイオンラジカル塩の構造と物性」

- 10:00 杉原美一 (山口大理) 「新規ヘテロ原子摂動炭素共役系について」
- 10:15 伊与田正彦 (都立大理) 「1,4-ベンゾキノンの結合したフラレーンの合成と物性」
- 10:30 城田靖彦 (阪大工) 「 π 電子系スターバースト分子の合成・物性・応用」
- 11:00-12:30 将来の展望を考える自由討議

「励起子研究…今日の到達点とこれからの課題」

場所 分子科学研究所職員会館 2 階会議室

日時 1996 年 6 月 21 日 - 22 日

提案代表者 林 哲介 (京大・総合人間)

6 月 21 日(金) 8 : 50 - 19 : 05

8 : 50 世話人「はじめに」

9 : 00 長沢信方 (東大理) (40 分)
「励起子分光の置き忘れ」

9 : 40 有本 収 (岡山大) (30 分)
「励起子高次構造とポラリトン緩和 - ZnP₂ 励起子を中心に」

10 : 10 張紀久夫 (阪大基礎工) (40 分)
「アルカリハライド中の励起子の電子正孔交換相互作用における立方異方性」

10 : 50 討論 (20 分)
休憩 (15 分)

11 : 25 枝松圭一 (東北大) (30 分)
「微粒子に閉じ込められた励起子の準位構造 - 二光子および二段階励起による研究」

11 : 55 中山正昭 (阪市大) (30 分)
「量子井戸・超格子の励起子 - 最近の研究と課題」

12 : 25 討論 (20 分)

12 : 45 - 13 : 45 昼休み

13 : 45 辛 埴 (東大物性研) (30 分)
「内殻励起子のスペクトル構造と光散乱」

14 : 15 柳原美宏 (東北大科研) (30 分)
「h-BN_b の B1s 発光における内殻励起子の効果」

14 : 45 討論 (20 分)
休憩 (15 分)

15 : 20 蓮尾昌裕 (東大理) (30 分)
「励起子系の多体効果と励起子分子二光子遷移」

15 : 50 相原正樹 (山口大) (40 分)

- 「励起子多体効果に関する理論的研究の現状と今後の課題」
- 16:30 飯田 武 (阪市大理) (30分)
「光強励起半導体における電子正孔 BCS 状態の近接効果」
- 17:00 討論 (20分)
休憩 (15分)
- 17:35 南不二雄 (東工大理) (40分)
「励起子共鳴非線形光応答によってわかること」
- 18:15 三品具文 (筑波大物) (30分)
「励起子ポラリトンと超高速光学応答」
- 18:45 討論 (20分)
- 6月22日(土) 8:50 - 17:10
- 8:50 加藤利三 (京大理) (40分)
「分子性イオン結晶における励起状態の励起子性」
- 9:30 谷村克己 (名大理) (40分)
「励起己の自己束縛と光誘起構造変化—研究の到達点と今後の課題」
- 10:10 中川英之 (福井大工) (30分)
「電子励起状態による緩和構造の予見性——金属ハロゲン化物の励起子緩和をめぐる」
- 10:40 休憩 (15分)
- 10:55 住 齊 (筑波大物質) (30分)
「光合成初期過程における光誘起電子移動の不思議」
- 11:25 那須奎一郎 (高エネ研) (40分)
「電子・格子相互作用と電子相関の共存する価電子系での光励起と緩和」
- 12:05 討論 (40分)
- 12:45-13:45 昼休み (希望者には UVSOR 見学 13:20 - 13:40)
- 13:45 A. Lushchik (分子研) (30分)
「Formation of secondary excitons by synchrotron radiation in ionic crystals」
- 14:15 中川和道 (神戸大発達) (30分)
「紫外線から軟 x 線領域でのアントラセン単結晶における励起己生成効率」
- 14:45 田中慎一郎 (分子研) (30分)
「アルカリハライドの表面内殻励起子」

- 15 : 15 休憩 (15 分)
- 15 : 30 伊藤 稔 (信州大工) (30 分)
「オージェ・フリー発光研究の現状と課題」
- 16 : 00 萱沼洋輔 (阪府大工) (30 分)
「内殻励起状態の格子緩和」
- 16 : 30 討論および Concluding remarks (40 分)
- 17 : 10 解散

国際研究協力事業報告

日英協力「物質化学に関する日英N + N会議」

1. 主旨

分子性物質は分子エレクトロニクス等未来の電子デバイスへの応用の可能性が検討されている。今回は分子性物質の基礎科学と応用科学との接点を探り、互いの理解を深める目的で開催された。

2. 開催場所および期日：

英国王立研究所 1996年2月26日(月)

3. 参加者

戸嶋直樹 (東大工) 橋本和仁 (東大工) 原 正彦 (理研)
平本昌宏 (阪大工) 丸山有成 (法政工) 薬師久弥 (分子研)
山下敬郎 (分子研)

A. E. Underhill (Univ. of Wales, Bangor) P. Day (Royal Institution)
J. D. Kilburn (Univ. of Southampton) T. Richardson (Univ. of Sheffield)
J. H. Maud (Univ. of Wales, Swansea) D. M. Taylor (Univ. of Wales, Bangor)
D. D. C. Bradley (Univ. of Sheffield) M. R. Willis (Univ. of Nottingham)
P. Hodge (Univ. of Manchester)

4. 会議の概要

英国側キーパーソンのアンダーヒル教授 (ウェールズ大) より挨拶と今回の会議の趣旨説明があった後、薬師 (分子研) がフタロシアニン導体における π -d 相互作用について様々の物性データを比較して紹介した。つづいて Kilburn (サウザンプトン大) が TTF 骨格を取り込んだ有機分子、金属錯体、LB 膜、アミノ酸の螺旋鎖にペンダントのように組み込んだ高分子、など TTF の化学について紹介した。山下 (分子研) はチアジアゾール環を含む一連の導電性有機物の合成と狭いバンドギャップをもつ合成高分子について紹介した。Richardson (シェフィールド大) は Dy のような希土類原子を含む分子の LB 膜の 2 次の非線形光学効果、カリックスアレン焦電性薄膜の熱センサー、ポリフィリンを用いる塩素ガスセンサー、イオン伝導性 LB 膜などおもに分子デバイスについて紹介した。さらに戸嶋 (東大工) はフタロシアニン共蒸着膜におけるエレ

クトロクロミズムと電界発光効果について紹介した。Maud (ウェールズ大) はチオフェンオリゴマー・金属界面の理論的研究を紹介した。原 (理研) は STM/AFM による金 (111) 面に蒸着した有機分子や液晶の観察について紹介した。Taylor (ウェールズ大) は $M(dmit)_2$ をもちいた導電性 LB 膜と狭いバンドギャップの半導体性高分子について紹介した。橋本 (東大工) はフェロシアン化鉄の磁性の電気化学と光による制御について紹介した。丸山 (法政大工) はフタロシアニン薄膜の 3 次非線形スペクトルについて紹介した。Bradley (シェフィールド大) が出席できなくなったので、代わりに P. Day (王立研究所) が BEDT-TTF 塩の磁性, 伝導性, 構造と電荷分離について紹介した。最後に平本 (阪大工) が有機色素薄膜を用いた光増幅デバイスとその増幅機構について紹介した。最後に英国側から数人の短いコメントが出され, 会議を終了した。

5. プログラム

ANGLO-JAPANESE MEETING UNDER THE PROGRAMME
"MOLECULAR MATERIALS FOR ELECTRONICS"
"MOLECULAR MATERIALS FOR NLO DEVICES AND THIN FILMS"

Royal Institution 21 Albermarle Street London W1X 4BS

Monday, 26th February, 1996

- 9.15 am Opening Remarks
 Chairman: A E Underhill, University of Wales, Bangor
- 9.30 am Professor K Yakushi, Institute of Molecular Science
 "π-d Interaction in Phthalocyanine Conductor"
- 10.00 am Dr J D Kilburn, University of Southampton
 "Synthesis and Properties of Multi-TTF Compounds and TTF Derived Metal Complexes"
- 10.30 am Professor Y Yamashita, Institute of Molecular Science
 "Preparation and Properties of Novel Donors and Donor-π-Acceptor Systems Containing Fused 1,2,5-Thiadiazole Units"
- 11.00 am COFFEE
- 11.15 am Dr T Richardson, University of Sheffield
 "Pyroelectricity in LB Films"
- 11.45 am Professor N Toshima, University of Tokyo
 "Electronic Properties of Phthalocyanine Composite Thin Films"
- 12.15 pm Dr J H Maud, University of Wales, Swansea
 "Heteroaromatic Oligomers and Electronic Devices"
- 12.45 pm LUNCH
- 2.00 pm Dr M Hara, Riken
 "STM/AFM Studies of Organic Thin Films"
- 2.30 pm Professor D M Taylor, University of Wales, Bangor
 "Characterisation of Organic Films for Molecular Electronics"
- 3.00 pm Prof K Hashimoto, University of Tokyo
 "Photochemically and Electrochemically Induced Magnetization with Metal Cyanide Complex Films"

- 3.30 pm TEA
- 3.45 pm Professor Y Maruyama, Hosei University
 “Third Order Optical Nonlinearity of VOPc Thin Film with 2-Dimensional C4v Symmetry”
- 4.15 pm Professor D D Bradley, University of sheffield
 “Optical Applications of Conjugated Polymers”
- 4.45 pm Dr M Hiramoto, Osaka University
 “Light Amplification and Photocurrent Amplification Devices Using Organic Thin Films”
- 5.15 pm BREAK
- 5.30 pm SHORT PRESENTATIONS (5 minutes)
- Professor P Day, Royal Institution
 “Superconducting and Magnetic Molecular Layers”
- Dr M R Willis, University of Nottingham
 “Phthalocyanines for Device Applications”
- Professor P Hodge, University of Manchester
 “Synthesis of Electroactive Materials”
- Professor R H Friend, University of Cambridge
 “Magnetic States in Conjugated Molecules and Polymers Coupled with Metals”
- Professor A E Underhill, University of Wales, Bangor
 “Third Order NLO Molecular Materials”
- 6.00 pm General Discussion-identify possible collaborative links Time for informal discussion
- 7.30 pm DINNER FOR PARTICIPANTS

(齋藤修二 記)

重点研究国際協力「光誘起電荷移動」

1996年2月26日に上記国際協力事業の一環として米国ロチェスター大学においてセミナーを開催した。

Monday, February 26, 1996

Interfaith Chapel (Lower Level)

プログラム

- 8:30-9:00 Professor Anne Myers (Director, Center for Photoinduced Charge Transfer) and Professor Mitsuo Ito (Director-General, Institute for Molecular Science), Welcome and Announcements
- 9:00-9:50 Iam Gpild - Homogeneous Media
- 9:50-10:10 Keitaro Yoshihara - "Some Characteristics of Ultrafast Intermolecular Electron Transfer"
- 10:10-10:30 Tahei Tahara - "Time-Resolved Raman Studies on the Structural Change Induced by Charge Transfer in the Excited States"
- 10:30-11:00 BREAK
- 11:00-11:50 David Whitten - Organized Media
- 11:50-12:10 Tatsuhisa Kato - "ESR Study on Structures and Dynamics of Metallofullerenes in Solution"
- 12:10-12:30 Yoshitaka Tanimura - "Effects of Anharmonicity in Femtosecond Pump-Probe Spectroscopy of Molecular Systems in Condensed Phases"
- 12:30-1:30 Lunch (red carpet lounge)
- 1:30-2:20 Annabel Muenter/Al Marchetti - Restricted Geometries
- 2:20-2:40 Yoshihito Watanabe - "Molecular Mechanisms on the Oxygen Activation by Heme Enzymes"
- 2:40-3:00 Mitsuhiro Shionoya - "Zinc Complexes as Targeting Agents for Nucleic Acids"
- 3:00-3:20 BREAK
- 3:20-3:40 Fumio Hirata - "A RISM-SCF Study of the Electronic Structure of Solvated Mole-

- cules and Chemical Reaction”
- 3:40-4:30 Esther Conwell/Marty Abkowitz/Sam Jenekhe - Conducting Polymers
- 4:30-4:50 Hayao Kobayashi - “Structures and Physical Properties of Molecular Metals Based on BETS and $M(dx)_2$ ($M = Ni, Pd; x = S, Se$)”
- 4:50-5:10 Mitsuo Ito - “An Unforgettable Experience”
- 5:10-5:45 Reception (red carpet lounge-Hutchison Hall)
- 6:00 Dinner - Holidome (all IMS Scientists and Abkowitz, Borsenberger, Gao, Myers, Okumura, Perlstein, Yokojima, and Young)

(渡辺芳人 記)

分子研コロキウム

- 第 651 回 1996年 3 月 6 日 STM による表面構造・電子状態の研究 (長谷川幸雄)
- 第 652 回 3 月 14 日 表面光化学における励起機構とダイナミクス (松本 吉泰)
- 第 653 回 4 月 10 日 Wave Packets for Photodissociation and Reactive Scattering.
(Gabriel G. Balint-Kurti)
- 第 654 回 4 月 17 日 3 次の非線形分光法による溶液中でのエネルギーと分子のダイナミクス (寺嶋 正秀)
- 第 655 回 5 月 15 日 相転移・ガラス転移と熱測定 (松尾 隆祐)
- 第 656 回 5 月 22 日 溶液中でのクラスター構造の発生：混ざるといふことの実体を考える (西 信之)
- 第 657 回 5 月 27 日 Photodissociation dynamics of free radicals.
(Dan Neumark)
- 第 658 回 6 月 5 日 Photodissociating small polyatomic molecules in their highly excited states. (山内 薫)
- 第 659 回 6 月 19 日 分子のフェムト秒動的な分極と振動位相緩和, 化学反応 (濱口 宏夫)
- 第 660 回 6 月 26 日 A new time-dependent approach to the radiationless transition rate of polyatomic systems. (加藤 重樹)
- 第 661 回 7 月 3 日 固液界面での原子・分子の吸着構造 (板屋 謹悟)
- 第 662 回 7 月 17 日 Prediction of Protein Tertiary Structures by New Monte Carlo Algorithms. (岡本 祐幸)
- 第 663 回 8 月 1 日 Spectroscopy of Transient Organic Radicals and Transition States.
(W. C. Lineberger)

共同研究実施一覧

平成8年度（前期）共同研究

課題研究

化学合成した金属酵素モデルによる酵素分子変換系の研究	九大有機化学基礎研セ	成田 吉徳
炭素クラスター科学の新展開	法政大工	丸山 有成

協力研究

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
二成分クラスターの幾何構造と電子状態	慶應大大学院理工学	岸 令子
マルチカノニカル法による疎水水和を考慮したペプチドの動的立体構造の研究	新技術事業団柳田生体運動子プログラム	人佐 正幸
非断熱遷移過程における量子散逸効果	筑波大	有光 敏彦
金属原子を含むフリーラジカルの高分解能分子分光	長岡技大	伊藤 治彦
シトクロム P450 IAZ の構造と反応機構：共鳴ラマン法による解析	東北大反応化学研	佐藤 秀明
ブルー銅タンパク質の紫外共鳴ラマンスペクトル	茨城大理	高妻 孝光
時間分解共鳴ラマン分光法によるミオグロビン—過酸化水素複合体の研究	慶應大医	江川 毅
アミノ酸の電子状態と酸・塩基共存影響	熊本大理	市村 憲司
合成ダイヤモンドのカラーセンターにおける励起・緩和過程の解明	大阪大基礎工	半沢 弘昌
分子分光法による液晶配向の光制御メカニズムの研究	北里大理	片山 詔久
表面吸着種の多光子光電子分光による励起状態の研究	横浜市大理	木下 郁雄
s-テトラジンの光解離機構の解明	東農工大学院生物システム応用科学	高柳 正夫
光感受性触媒による非線形化学反応のダイナミックス	奈良教育大	松村 竹子
画像分光法による分子衝突過程の研究	東京都大理	田沼 肇
光誘起結合開裂反応における磁場効果・磁気同位体効果	金沢大薬	中垣 良一
層間場における金属錯体の物性	国際基督教大教養	佐野 瑞香
有機伝導体の加圧下 NMR	お茶の水女大理	河本 充司
d- π 電子結合型錯体システムの構築	北陸先端大	北川 宏

高原子価非ヘム鉄錯体の設計・構築	名工大	増田 秀樹
変異ヘム蛋白質における不安定中間体のキャラクタリゼーション	京大大学院工学	石森浩一郎
ヘテロ原子を含む分子力場の精密化	横浜国立大工	榊原 和久
高スピナルベンネットワークを目指した高次集積化	九大有機化学基礎研セ	松田 建児
Ni 内殻吸収スペクトル (XAFS) の解析	京大工	吉田 朋子
イオン照射固体材料のフェムト秒蛍光測定	金属材料技術研	石岡 邦江
振電動起したヨウ化メチルの光イオンダイナミクス	九大大学院総合理工学	渡慶次 学
フタロシアニン 2 量体および光学活性フタロシアニン 1 次元導電体の構築とキャラクタリゼーション	東北大学院理学	小林 長夫
反応制御を目指したクラスター反応の研究	神戸大理	富宅喜代一
EXAFS 法による短寿命反応中間体の構造解析	立命館大理工	小提 和彦
複核金属錯体の構造研究	三重大工	佐藤 博保
超臨界状態における各種溶媒並びに電解質水溶液の構造化学的研究	立命館大理工	大瀧 仁志
種々のカルボン酸架橋クロム(Ⅲ)三核錯体の磁氣的性質	埼玉大理	藤原 隆司
シス-ジアンミンテトラニトロコバルト(Ⅲ)酸錯体の性質	岡山大理	小島 正明
化学修飾ヘム蛋白質の電子移動反応の研究	奈良女大理	塚原 敬一
配位不飽和ルテニウム化合物の触媒作用	大阪大基礎工	真島 和志
RISM 方程式を解くための高速アルゴリズムの開発	京大エネルギー理工学研	木下 正弘

研 究 会

大気化学反応の素過程	北大電子科学研	川崎 昌博
励起子研究…今日の到達点とこれからの課題	京大総合人間	林 哲介
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	姫路工大理	小谷野猪之助
有機機能材料の基礎となる新規パイ電子系の分子設計と創出	広島大工	大坪 徹夫
ポリマー・生体系の分子科学	分子研	岡本 祐幸

施設利用 (I)

希土類マンガナイトの相転移とその物性の研究	豊橋技大	亀頭 直樹
ゾルゲル法を使った酸化物材料のキャラクタリゼーション	豊橋技大	角田 範義
半導体薄膜の作製及び評価	豊橋技大	吉田 明

アモルファス磁性薄膜の構造と電子状態および磁気特性	名工大	山田 正明
ポリエチレン, ポリテトラフルオロエチレンの表面に成長したポリメチルメタクリレート共重合鎖の構造と分子運動に関する研究	名工大	嶋田 繁隆
希土類金属化合物 RGa_2 (R: 希土類) の磁性	名工大	大原 繁男
錯体の構造と反応, および溶液内挙動	愛知教育大	中島 清彦
フォトクロミック分子の蛍光寿命測定	山口大工	笠谷 和夫
固体パラ水素中の CH_5^+ の分光学的研究	京大大学院理学	志田 忠正
エキシマランプを用いたマテリアルプロセッシング	宮崎大工	黒澤 宏
レーザーアブレーション法により作製した CIS 薄膜の XPS による評価	福井高専	山本 幸男
蛍光プローブ法を用いる両親媒性高分子の水溶液挙動に関する研究	豊橋技大	川口 正剛
2,2'-ピピジン類の発光特性	横浜国大工	八木 幹雄
化合物半導体薄膜の物性評価	佐賀大理工	西尾 光弘
SOR 及びプラズマを用いて作製した高機能性薄膜の評価	名大工	堀 勝
高分子固体表面から成長した共重合鎖末端ラジカルの分子運動性	市邨学園短大	坂口 真人
多光子光電子放出による有機固体の表面励起状態の挙動	学習院大大学院自然科学	小野 正樹
超微粒子の磁性	三重大教育	佐光三四郎
担体付金属および金属酸化物粉体触媒による CO_2 の水素化と NO_x の分解反応の動力学的研究	愛知学泉大	梅田 昭司
金属錯体の磁気的性質と反応場の関わり	山形県テクノポリス財団生物ラジカル研	藤井 浩
タンパク質の安定性及びフォールディング過程の構造解析	生理研	今野 卓
X線回折による銀薄膜の構造評価	同志社大工	伊藤 正行
準結晶の磁性の実験的研究	名大情報文化	松尾 進
キラル高分子の不斉合成	豊橋技大	伊津野真一
ダイヤモンドアンビル用ガスケットの開発	名大理	増田 忠志
シリコン超微粒子の常磁性欠陥に関する研究	静岡理工大	土肥 稔

施設利用 (II)

電子計算機センターレポートを参照してください。

UVSOR 課題研究

BL2B2 用斜射入分光器の開発建設	分子研	見附孝一郎
放射光励起光化学反応用高効率分光器の開発	分子研	宇理須恒雄
BL7B の整備と新分光システムの性能試験	福井大工	中川 英之

UVSOR 協力研究

極端紫外光によるニトリル化合物の光解離過程の研究	いわき明星大理工	神田 一浩
VuV 光分解で生成するイオン, 光同時計測	東工大	疋田 巧
スズ (IV) 化合物の吸収スペクトルと光化学過程	新潟大理	徳江 郁雄
アミノ誘導体の真空紫外光励起状態と光誘起過程	広島大理	田林 清彦
放射光励起反応によるナノ構造形成の研究	東大大学院工学系	尾嶋 正治
極端紫外光実験施設における STM の立上げと調整	豊橋技大	英 貢
Si (III) - $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ - (Au, Cu) の角度分解光電子分光	名大工	曾田 一雄
ペロブスカイト型 Mn 酸化物の光電子分光	東北大大学院理学	高橋 隆
フラーレン類の光電子分光	千葉大工	日野 照純
放射光を用いた角度分解光電子スペクトルによる BTQBT/MoS ₂ 単分子薄膜の 2 次元構造と電子状態	千葉大工	上野 信雄
光電子分光法による有機電界発光素子のモデル界面の電子構造	分子研	石井 久夫

UVSOR 招へい協力研究

UVSOR BL-7A 再構築計画の検討	鳴門教育大	松川 徳雄
----------------------	-------	-------

UVSOR 施設利用

層状イオン結晶の励起子緩和機構	山形大理	大西 彰正
Ce ドープフッ化物および酸化物結晶のレーザー材料としての光学的性質の研究	東北大工	鈴木 吉朗
元素添加およびイオン打ち込み非晶質シリカの発光および吸収のメカニズムの解明	早稲田大理工	大木 義路
Pb ハライド結晶および混晶系の励起子発光	福井大工	中川 英之
非晶質 CdI ₂ の結晶化過程 (IV)	福井大工	福井 一俊
オージェ・フリー発光のスペクトル形状の温度変化	信州大工	伊藤 稔
フッ素-炭素系の真空紫外分光	名大理	関 一彦

グリセリン筋の低温時分割蛍光分光	名大理	谷口美恵子
フッ化フラーレン単結晶の反射スペクトル	京大理	神野 賢一
非晶質フッ化物中の Ce^{3+} イオンの発光の密度依存性	工技院大阪工業技術研	西井 準治
内殻励起子の 2 光子分光	大阪歯大	辻林 徹
電界分極石英ガラスの光学特性	宮崎大工	黒澤 宏
アルカリ土類弗化物の VUV 励起発光	琉球大教育	江尻 有郷
酸化物単結晶の紫外光反射測定・ルミネッセンス測定	分子研	細野 秀雄
BIS 用バンドパス検出器の波長感度校正	分子研	植田 尚之
窒化物半導体の軟 X 線吸収	福井大工	山本 暁勇
高分子およびフラーレン類の軟 X 線吸収分光	名大大学院理学	大内 幸雄
Si (III) 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	大阪府大工	田口 幸広
PEPICO 法により検出した固体表面反応と固体内部での色中心生成反応の関連	神戸大発達科学	中川 和道
表面吸着分子の光化学反応の研究	広島大理	関谷 徹司
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
放射光励起による薄膜成長機構の解析	豊橋技大	吉田 明
固体パラ水素中の CH_5^+ の分光学的研究	京大大学院理学	志田 忠正
アモルファス半導体の光誘起現象に関する研究	岐阜大地域共同研究セ	林 浩司
SR 光放射による K ハライドからの基底 K 原子脱離の時間応答性	分子研	鎌田 雅夫
ダイヤモンドの放射光励起エッチング	分子研	大橋 治彦
1-3 価分子陽イオンの生成と解離過程	大阪市大工	増岡 俊夫
有機金属分子の内殻準位からの光イオン化によって起こる解離過程の研究	愛媛大理	長岡 伸一
遷移金属カルボニル錯体のイオン化解離過程の研究	姫路工大理	小谷野猪之助
紫外レーザーと放射光を組み合わせた極端紫外分子分光	分子研	見附孝一郎
Intraband Luminescence on the Excitation of Solids by 12-40-eV-Photons	分子研	Lushchik, Aleksandr
X 線多層膜望遠鏡の較正	東大理	常田 佐久
火星探査機プラネット B 搭載極端紫外光センサーの性能評価	東大大学院理学系	中村 正人

希ガス固体表面から光励起脱離する励起中性原子の絶対収率の測定	学習院大理	荒川 一郎
原子層成長によって作製した軟X線用多層膜の評価	理化研	青柳 克信
放射光による光電子顕微分光実験	分子研	木下 豊彦
希土類化合物の内殻吸収	分子研	木村 真一
BL5B の整備	分子研	木村 真一
CePbSb と Ce PbAs の光学伝導度の異方性の研究	東北大科学計測研	池沢 幹彦
超イオン導電ガラスの遠赤外・ミリ波分光	東北学院大工	淡野 照義
遠赤外領域における高圧下反射測定法の開発	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
NiS の赤外領域反射スペクトル	神戸大理	岡村 英一
酸化物単結晶の遠赤外透過測定	分子研	細野 秀雄
時間分解赤外分光	分子研	木村 真一
強相関伝導系物質の磁場中赤外分光	分子研	木村 真一
アルカリ金属を添加した ZrO_2 の XAFS による構造解析	東京学芸大	長谷川 貞夫
タリウム の 1 価・3 価混合原子価物質系の軟X線領域での光電子収量スペクトル	名大情報文化	森 昌弘
ナトリウムイオン交換型ゼオライトにおけるナトリウムの局所構造	名大工	服部 忠
担持ルテニウム触媒における担体効果の XAFS による解析	名大工	吉田 寿雄
Cu/TiO ₂ 触媒の Cu-L 殻 XANES による構解析	京大工	吉田 郷弘
Mo L 殻 XANES による Mo ⁶⁺ 局所構造の検討	京大工	田中 庸裕
珪酸塩ガラスの Na, Mg, Al, Si の K-XANES	京都教育大	村田 隆紀
アルカリシリケートガラスの高密度化機構の研究	工技院大阪工業技術研	北村 直之
porous Ge, Si 内殻励起発光実験	鳴門教育大	松川 徳雄
BL-7A の整備	分子研	木下 豊彦
SOR 一貫プロセスによるテフロン の 微細構造形成	名大工	後藤 俊夫
共有結合性絶縁材料の放射光励起脱離過程	名大工	正嶋 宏祐
SOR 光のリソグラフィプロセスへの応用に関する研究 (1)	名工大	梅野 正義
ダイヤモンドの放射光励起エッチング	琉球大教育	石黒 英治
紫外光領域のフォトンエコー II	香川大教育	伊藤 寛
シンクロトロン放射光励起による ZnTe のホモエピタキシャル成長	佐賀大理工	小川 博司

BL8A の整備	分子研	木下 豊彦
半導体／絶縁体多層膜の内殻吸収	東北大科学計測研	渡辺 誠
軟X線領域における冷却 CCD 素子の量子効率測定	関西医科大	木原 裕
エステル類の C-K, O-K 励起による光解離過程の研究	広島大理	平谷 篤也
芳舌旗ポリエステル薄膜の内殻吸収スペクトル	鳥取大工	大内 伊助
内殻励起分子から放出された解離イオンの角度分解イオン 収量スペクトルの測定	分子研	小杉 信博
BL8BI 気体計測装置の調整	分子研	伊吹 紀男
ダイヤモンド表面からの解離イオンの測定	分子研	伊吹 紀男
低濃度担持ガリウム触媒の XAFS による構造解析	名大工	服部 忠

施設利用実施一覧

平成7年度（前期）施設利用（I）

遷移金属クラスター錯体の磁気化学	岐阜大工	川村 尚
合成ダイヤモンドの格子欠陥における光反応 ESR	大阪大基礎工	西田 良男
希土類-遷移金属-ボロン系アモルファス合金の磁気的性質と電子構造	名工大	山田 正明
混合原子価リン酸ルテニウムにおけるルテニウムイオンの平均酸化数の測定及びその磁気化学的挙動の観測	東大大学院理学	福岡 宏
2, 2'-ビピリジン類の配座異性体の励起状態	横浜国大工	八木 幹雄
SOR 及びプラズマを用いて作製した機能性薄膜の評価	名大工	堀 勝
フォトクロミック分子の蛍光寿命測定	山口大工	笠谷 和男
小分子の活性化を目指した新規遷移金属錯体の構築及び反応制御	名工大	増田 秀樹
半導体薄膜作製および特性評価	豊橋技大	吉田 明
錯体の構造と反応, 及び溶液内挙動	愛教大	中島 清彦
RF スパッタ法による $\text{CuIn}(\text{S}, \text{Se})_2$ 薄膜の作製と評価	福井高専	山本 幸男
蛍光プローブ法を用いる両親媒性高分子の溶液挙動に関する研究	豊橋技大	川口 正剛
C_{60} 誘導体の電子・磁気物性に関する研究	京大大学院工学	松浦 幸仁
レーザーアブレーションによる透明電極材料の製作	宮崎大工	黒澤 宏
ヘム酵素反応中間体の磁性に関する研究	山形県テクノポリス財団生物ラジカル研	藤井 浩
超微粒子の磁気的性質	三重大教育	佐光三四郎
高分子固体表面から成長した高分子鎖末端の分子運動性	市邨短生活文化	坂口 真人
d-f 元素系異核錯体における金属イオン間の磁気的相互作用	山形大理学	坂本 政臣
カルコゲニド錯体の構造決定	名大理学	川口 博之
金属-半導体複合ナノ粒子の作成とその光物性	京大原子エネルギー	東野 達
アモルファスカーボンの電子・磁気物性に関する研究	京大大学院工	吾郷 浩樹
DCNQI-金属化合物の電子状態	東北大学院理学	高橋 隆
通電型ワイヤー触媒の表面特性に関する研究	静岡大工	上野 晃史
ゾルーゲル法を使った酸化物の特性化	豊橋技大	角田 範義

遷移金属イオンを用いたプロトン-電子連動系物質の構築	大阪市大理	田所 誠
希土類金属化合物 RGa_2 (R: 希土類) の磁性	名工大	大原 繁男
オキソ架橋多核金属錯体の構造	金沢大理	林 宜仁
化合物半導体薄膜の物性評価	佐賀大理工	西尾 光弘
種々の新規アイオノマーの開発とそのマイクロ相分離構造の検討	岐阜大工	杓水 祥一
希土類マンガナイトの相転移と物性の研究	豊橋技大	亀頭 直樹
熱音響振動における時空カオス	愛教大	矢崎 太一
有機伝導体の電子・磁気物性に関する研究	京大大学院工学	藤原 秀紀
Si 基板上的 LiF/Si 多層膜の原子構造	東北大科学計測研	江島 丈雄

平成7年度（後期）施設利用（I）

重水素置換 DCNQI 金属化合物の XPS	東北大学院理学	高橋 隆
多光子光電子放出による有機固体の表面励起状態の挙動	学習院大学院自然科学	小野 正樹
2, 2'-ビピリジン類の配座異性体の励起状態	横浜国大工	八木 幹雄
オキソ架橋多核金属錯体の構造	金沢大理	林 宜仁
RF スパッタ法による CuIn (S, Se) ₂ 薄膜の作製と評価	福井高専	山本 幸男
ゾルーゲル法を使った酸化物の特性化	豊橋技大	角田 範義
SOR 及びプラズマを用いて作製した機能性薄膜の評価	名大工	堀 勝
錯体の構造と反応および溶液内挙動	愛教大	中島 清彦
合成ダイヤモンドの格子欠陥の光反応 ESR	大阪大基礎工	西田 良男
フォトクロミック分子の蛍光寿命測定	山口大工	笠谷 和男
化合物半導体薄膜の物性評価	佐賀大理工	西尾 光弘
レーザーアブレーションで作成した透明電極薄膜の特性	宮崎大工	黒澤 宏
有機伝導体の電子・磁気物性に関する研究	京大大学院工学	藤原 秀紀
金属-半導体複合ナノ粒子の作成と光物性	京大原子エネルギー研	東野 達
希土類マンガナイトの相転移と物性の研究	豊橋技大	亀頭 直樹
ナノスケール炭素材料の安定性と精製法に関する研究	三重大工	齋藤 弥八
NiO 反強磁性超微粒子の研究	三重大教育	佐光三四郎
高分子固体表面から成長した高分子鎖末端の分子運動性	市邨短大	坂口 真人
熱音響振動における時空カオス	愛教大	矢崎 太一
通電型ワイヤー接触の開発	静岡大工	上野 晃史
磁性アモルファス合金の構造と電子状態および磁気特性	名工大	山田 正明
金属ポルフィリンラジカル錯体の磁性	山形県テクノポリス財団生物ラジカル研	藤井 浩
イオン結晶表面の格子欠陥とその表面での水の吸着構造	愛教大	三浦 浩治

国際交流

海外からの研究者

1. 文部省外国人研究員 (客員部門)

Ornellas, Fernando Rei (ブラジル サンパウロ大学化学研究所教授)	7. 9. 1 - 8. 6.30
Heaven, Michael C. (アメリカ エモリー大学化学科教授)	8. 1.11 - 8. 8.31
Luštšik, Aleksandr (エストニア タルトゥ大学準教授)	7.10. 4 - 8. 9.30
Szichman, Enrique (イスラエル ソルク原子力研究所 物理・応用数学部門研究員)	7.10. 1 - 8. 9.30

2. 文部省外国人研究員

Kim, Yong Rok (韓国 ヨンセイ大学化学科助教授)	{ 8. 6.25 - 8. 8.24 8.12.24 - 9. 2.22
Ahn, Kwang-Hyun (韓国 キョンヘー大学助教授)	{ 8. 7. 3 - 8. 8.26 8.12.17 - 9. 2.21
Kang, Tai Jong (韓国 タエグ大学化学科助教授)	{ 8. 7. 4 - 8. 8.31 8.12.23 - 9. 2.22
Kogan, Iakov L. (ロシア チェルノゴロブカ化学物理研究所 主任研究員)	8. 9. 3 - 9. 7. 2
Ocherov, Vladimir I. (ロシア 科学アカデミー 化学物理研究所教授(理論部長))	7.12. 5 - 8. 6. 4

3. 学術振興会外国人研究者招へい

李 宇敏 (Yumin Li) (中国 上海薬物研究所研究員)	7. 5.25 - 9. 5.24
Yang Shi (中国 中国科学院 分子動力学研究所助手)	8. 1.16 - 8.11.15
Stephan Roy Meech (イギリス イーストアングリア大学講師)	8. 3.27 - 8. 4.30
Abdei Wahed Fl zaizi (フランス フランス国立中央科学研究所 博士課程学生)	8. 3.25 - 8. 6.22
Stephana Daniele (フランス ニースソフィアアンティボリス大学 博士研究員)	8. 3.25 - 8. 6.22
Nilmori Sarkar (インド インド科学研究所研究員)	8. 3.21 - 8. 5.31
Gehyas Syed Irfan (バングラデシュ バングラデシュ農業大学講師)	8. 3.29 - 8. 6.21
Kwon Yong Seung (韓国 成均館大学助教授) (楨 容聖)	8. 3.28 - 8. 4.12

4. 特別協力研究員

Jong Keun Park (韓国 浦項科学技術大学化学科博士研究員)	7. 5. 1 - 8. 4.30
宮前孝行	7. 4. 1 - 9. 3.31
Elimclech M. Naphcha (イスラエル ヘブライ大学博士研究員)	8. 3.25 - 8. 5.25

海外渡航 (8 . 4 . 1 ~ 8 . 9 . 30)

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 授 教	8. 4. 7 ~ 8. 4. 15	ア メ リ カ	第2回理論化学物理国際会議出席・講演
森 田 紀 夫	分 子 構 造 研 究 系 授 助 教	8. 4. 10 ~ 8. 5. 9	ス イ ス	国際学術研究「異常長寿命ハドロン原子の研究」 に関する反陽子ヘリウム原子のレーザー分光実験 実施
熊 倉 光 孝	技 術 課 官 技	8. 5. 1 ~ 8. 6. 10	ス イ ス フ ラ ン ス	反陽子ヘリウム原子のレーザー分光実験実施
岩 田 末 廣	理 論 研 究 系 授 教	8. 5. 4 ~ 8. 5. 13	イ タ リ ア	ゴードン研究会議出席・講演
加 藤 立 久	分 子 構 造 研 究 系 授 助 教	8. 5. 5 ~ 8. 5. 14	ア メ リ カ	アメリカ電気化学会出席・招待講演
北 川 禎 三	分 子 構 造 研 究 系 授 教	8. 5. 20 ~ 8. 5. 26	韓 国	KAIST 及び Kyung pook 大学にてセミナー出席及 び韓国化学会創立 50 周年記念シンポジウム招待 講演
松 本 吉 泰	電 子 構 造 研 究 系 授 助 教	8. 5. 21 ~ 8. 6. 5	ド イ ツ オーストリア	フリッツハーバー研究所セミナー及び国際真空科 学連合 (IUVSTA) 主催ワークショップ出席・講演
吉 原 經 太 郎	電 子 構 造 研 究 系 授 教	8. 5. 22 ~ 8. 6. 3	ア メ リ カ	第 10 回超高速現象国際会議出席・講演及びジョ ージア工科大学にて情報交換・討論
内 藤 幸 人	電 子 構 造 研 究 系 手 助	8. 5. 26 ~ 8. 6. 5	ア メ リ カ	Ultrafast Phenomena 国際会議出席・発表
猿 倉 信 彦	機 器 セ ン タ ー 授 助 教	8. 5. 26 ~ 8. 6. 13	ア メ リ カ	Ultrafast Phenomena 国 際 会 議 及 び CLEO/QELS'96 出席・発表並びにレーザーに関 する研究打合せ
森 田 紀 夫	分 子 構 造 研 究 系 授 助 教	8. 5. 30 ~ 8. 6. 10	ス イ ス	国際学術研究「異常長寿命ハドロン原子の研究」 に関する反陽子ヘリウム原子のレーザー分光実験 実施
宇 理 須 恒 雄	極 端 紫 外 光 科 学 研 究 系 授 教	8. 6. 3 ~ 8. 6. 12	フ ラ ン ス イ ギ リ ス ド イ ツ	E-MRS 会議出席及び共同研究に関する打合せ
細 野 秀 雄	極 端 紫 外 光 科 学 研 究 系 授 助 教	8. 6. 21 ~ 8. 6. 30	ア メ リ カ	ゴードン研究会議出席・講演

氏名	所属・職	期間	目的国	目的
渡辺 芳人	相関領域研究系 教 授	8. 6.22 ～8. 6.29	ア メ リ カ	酸素活性化に関する非ヘム金属酵素の生化学に関する国際会議出席
小江 誠司	相関領域研究系 助 手	8. 6.22 ～8. 6.29	ア メ リ カ	酸素活性化に関する非ヘム金属酵素の生化学に関する国際会議出席
Hansmann, Ulrich	理 論 研 究 系 助 手	8. 6.28 ～8. 7.17	ア メ リ カ ド イ ツ	タンパク質の立体構造予測シミュレーションに関する研究打合せ
西 信之	相関領域研究系 教 授	8. 6.29 ～8. 7. 8	ア メ リ カ	第8回共鳴イオン化分光学とその応用に関する国際会議出席・講演
小崎 紳一	相関領域研究系 助 手	8. 7. 6 ～8. 7.11	オーストリア	植物ペルオキシダーゼに関する学会出席・発表
加藤 立久	分子構造研究系 助 教 授	8. 7. 7 ～8. 7.16	イ ギ リ ス ア メ リ カ	International Interdisciplinary Colloquium on the science and Technology of the Fullerenes 出席・発表及びカリフォルニア工科大学にて研究打合せ
水谷 泰久	分子構造研究系 助 手	8. 7.10 ～8. 7.22	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」に関する共同研究実施
富永 圭介	電子構造研究系 助 手	8. 7.13 ～8. 7.22	ア メ リ カ	ゴードン研究会議出席・講演及び高次非線形分光法に関する研究打合せ
渡辺 芳人	相関領域研究系 教 授	8. 7.20 ～8. 7.26	ア メ リ カ	Microsomes and Drug Oxidations 国際会議にて研究成果報告及び情報・資料収集
吉原 経太郎	電子構造研究系 教 授	8. 7.20 ～8. 7.28	ア メ リ カ	ゴードン研究会議出席・講演
石井 久夫	極端紫外光科学研究系 助 手	8. 7.20 ～8. 8. 8	ア メ リ カ	ゴードン研究会議及び合成金属の科学と技術に関する国際会議(ICSM'96)出席・発表並びにルイジアナ大学CAMDにて研究打合せ
小林 速男	分子集団研究系 教 授	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議(ICSM'96)出席・発表
鹿野田 一司	分子集団研究系 助 教 授	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議(ICSM'96)出席・発表
山下 敬郎	化学試料室 助 教 授	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議(ICSM'96)出席・発表

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
中 澤 康 浩	分子集団研究系 助 手	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議 (ICSM'96)出席
藤 原 秀 紀	分子集団研究系 助 手	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議 (ICSM'96)出席・発表
持 田 智 行	分子集団研究系 助 手	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議 (ICSM'96)出席・発表
田 中 彰 治	化 学 試 料 室 助 手	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議 (ICSM'96)出席・発表
戸 村 正 章	技 術 課 技 官	8. 7.28 ～8. 8. 4	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議 (ICSM'96)出席し複素環材料に関する情報交換・ 収集
米 満 賢 治	理 論 研 究 系 助 教 授	8. 7.28 ～8. 8.11	ア メ リ カ	合成金属の科学と技術に関する国際会議 (ICSM'96)出席・発表及びロスアラモス国立研究 所にて研究協力打合せ
北 川 禎 三	分子構造研究系 教 授	8. 8. 9 ～8. 8.19	ア メ リ カ	第 15 回ラマン分光国際会議出席・発表
伊 藤 光 男	所 長	8. 8.11 ～8. 8.21	ア メ リ カ	第 15 回ラマン分光国際会議出席・発表及び分子 分光学研究
芳 賀 正 明	錯体化学実験施設 教 授	8. 8.11 ～8. 8.26	ア メ リ カ カ ナ ダ	ペンシルバニア州立大学にて超分子層状化合物の 構築に関する研究打合せ及び第 31 回錯体化学国 際会議出席・発表
木 村 真 一	極端紫外光実験施設 助 手	8. 8.16 ～8. 8.26	ス イ ス	強相関伝導系に関する国際会議出席・講演
田 中 晃 二	錯体化学実験施設 教 授	8. 8.17 ～8. 8.27	カ ナ ダ	第 31 回錯体化学国際会議出席・発表
岡 本 祐 幸	理 論 研 究 系 助 教 授	8. 8.22 ～8. 9. 2	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」に関する共同研究実施
Hansmann, Ulrich	理 論 研 究 系 助 手	8. 8.22 ～8. 9. 2	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」に関する共同研究実施
高 田 恭 孝	極端紫外光科学研究系 助 手	8. 8.22 ～8. 9.15	フ ラ ン ス ド イ ツ	第 9 回 X 線吸収構造国際会議、非弾性軟 X 線散乱 国際会議、第 17 回 X 線及び内殻励起過程国際会 議出席・講演

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目 的 国	目 的
濱 広 幸	極端紫外光実験施設 助 教 授	8. 8.23 ～8. 9. 7	フ ラ ン ス イ タ リ ア	第 18 回国際自由電子レーザー会議出席・発表及 びパリ南大学 LURE 研究所にて放射光研究に関 する打合せ
小 杉 信 博	極端紫外光科学研究系 教 授	8. 8.24 ～8. 9.14	フ ラ ン ス ド イ ツ	第 9 回 X 線吸収構造国際会議、非弾性軟 X 線散乱 国際会議、第 17 回 X 線及び内殻励起過程国際会 議出席・講演
富 永 圭 介	電子構造研究系 助 手	8. 8.25 ～8. 9. 2	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」に関する共同研究実施
鈴 木 俊 法	電子構造研究系 助 教 授	8. 8.30 ～8. 9. 8	デ ン マ ー ク	ヨーロッパ原子分子衝突会議出席・発表
木 下 豊 彦	極端紫外光実験施設 助 教 授	8. 8.31 ～8. 9.15	デ ン マ ー ク ド イ ツ	第 17 回 X 線と内殻励起過程国際会議出席及び高 分解能光電子分光・放射光利用光電子顕微分光研 究に関する打合せ
石 井 久 夫	極端紫外光科学研究系 助 手	8. 9. 1 ～8. 9.13	ベ ル ギ ー ド イ ツ	分子エレクトロニクスに関する国際会議出席・発 表及び共同研究打合せ
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 教 授	8. 9. 3 ～8. 9.13	カ ナ ダ	ウォータールー大学及びステーション研究所にて 研究討議
南 部 伸 孝	電子計算機センター 助 手	8. 9. 3 ～8. 9.30	カ ナ ダ	ウォータールー大学 F. O. Goodman 教授との共同 研究実施
朱 超 原	理 論 研 究 系 助 手	8. 9. 4 ～8. 9.21	イ ギ リ ス	チャールスコールソンサマースクール出席
吉 原 經 太 郎	電子構造研究系 教 授	8. 9. 7 ～8. 9.16	ス ウ ェ ー デ ン チ ェ コ	ノーベルシンポジウム出席及び国際学術研究「日 本-チェコ分子科学共同研究推進」に関する打合 せ
間 瀬 一 彦	極端紫外光科学研究系 助 手	8. 9. 7 ～8. 9.16	イ タ リ ア	第 16 回ヨーロッパ表面科学会議出席・発表
塩 谷 光 彦	錯体化学実験施設 教 授	8. 9.24 ～8. 9.27	中 国	基盤研究(B)(2)「遺伝子発現制御を指向した核酸認 識・変換能をもつ金属錯体の創製」に関する研究 成果発表・討論
Hansmann, Ulrich	理 論 研 究 系 助 手	8. 9.27 ～8.10.11	ア メ リ カ ド イ ツ	ビーレフェルト大学にてコンファレンス出席・発 表及びセントラルフロリダ大学にて情報収集・研 究打合せ

人事異動 (8. 2.16 ~ 8. 9.30)

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
8. 2.29	中 井 利 仁	辞 職	筑波大学 先端学際領域研究センター 講師	分子集団研究系 分子集団動力学研究部門 非常勤研究員	
8. 3.31	首 藤 啓	辞 職	関西学院大学 理学部 助教授	理論研究系 分子基礎理論第一研究部門 助手	
8. 3.31	岡 田 朗	退 職	日本学術振興会 海外特別研究員	理論研究系 分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員	
8. 3.31	穴 澤 俊 久	退 職	日本学術振興会 特別研究員(分子科学研究所)	電子構造研究系 基礎電子化学研究部門 非常勤研究員	
8. 3.31	米 蔵 誠 哲	退 職	理化学研究所 基礎科学研究員	電子構造研究系 電子状態動力学研究部門 非常勤研究員	
8. 3.31	中 村 元 彦	退 職	奈良教育大学 教育学部 助手	極端紫外光科学研究所 基礎光化学研究部門 非常勤研究員	
8. 3.31	八 木 伸 也	退 職	広島大学 理学部 助手	極端紫外光実験施設 非常勤研究員	
8. 3.31	三 好 永 作	併任終了		理論研究系 分子基礎理論第三研究部門 教授	九州大・工
8. 3.31	佐 藤 博 保	併任終了		電子構造研究系 電子構造研究部門 教授	三重大・工
8. 3.31	正 島 宏 祐	併任終了		分子集団研究系 分子集団研究部門 教授	名大・工
8. 3.31	福 田 豊	併任終了		錯体化学実験施設 錯体触媒研究部門 教授	お茶の水大・理
8. 3.31	笹 井 理 生	併任終了		理論研究系 分子基礎理論第三研究部門 助教授	名大・人間情報
8. 3.31	北 野 正 雄	併任終了		分子構造研究系 分子構造学第二研究部門 助教授	京都大・工
8. 3.31	瀬 恒 潤一郎	併任終了		錯体化学実験施設 錯体触媒研究部門 助教授	神戸大・理
8. 4. 1	芳 賀 正 明	転 入	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 教授	三重大学 教育学部 教授	
8. 4. 1	櫻 井 武	転 入	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 助教授	金沢大学 薬学部 助教授	
8. 4. 1	藤 原 秀 紀	採 用	分子集団研究系 分子集団動力学研究部門 助手		
8. 4. 1	大 野 人 侍	採 用	電子計算機センター(情報ネットワーク管理室) 助手	日本大学 理工学部 助手	
8. 4. 1	大 竹 秀 幸	採 用	機器センター 助手		
8. 4. 1	下 條 竜 夫	採 用	極端紫外光実験施設 助手	電子構造研究系 電子状態動力学研究部門 非常勤研究員	
8. 4. 1	武 田 定	転 入	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 助手	大阪大学 理学部 助手	
8. 4. 1	文珠四郎 秀昭	転 入	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 助手	大阪大学 理学部 助手	

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
8.4.1	升屋正人	採用	理論研究系 分子基礎理論第一研究部門 非常勤研究員		
8.4.1	坪 広 樹	採用	分子集団研究系 分子集団動力学研究部門 非常勤研究員		
8.4.1	下 島 淳 彦	採用	極端紫外光科学研究系 基礎光化学研究部門 非常勤研究員		
8.4.1	岡 田 和 正	採用	極端紫外光科学研究系 界面分子科学研究部門 非常勤研究員		
8.4.1	渡 邊 正 満	採用	極端紫外光実験施設 非常勤研究員		
8.4.1	塩 塚 理 仁	採用	錯体化学実験施設 錯体触媒研究部門 非常勤研究員		
8.4.1	蓮 本 正 美	昇任	技術課 極端紫外光実験技術係長	技術課 極端紫外光実験技術係 技官	
8.4.1	吉 川 雄 三	転出	岡山大学 理学部 教授	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 教授	
8.4.1	中 沢 浩	転出	広島大学 理学部 助教授	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 助教授	
8.4.1	沢 邊 恭 一	転出	名古屋大学 工学部 講師	電子構造研究系 基礎電子化学研究部門 助手	
8.4.1	阿 部 正 明	転出	北海道大学 大学院理学研究科 助手	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 助手	
8.4.1	黒 田 泰 重	転出	岡山大学 理学部 助手	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 助手	
8.4.1	水 田 勉	転出	広島大学 理学部 助手	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 助手	
8.4.1	加 藤 眞 治	転出	核融合科学研究所 技術部 制御技術課 技官	技術課 装置開発技術係 技官	
8.4.1	原 隆 一 郎	転出	北海道大学 触媒化学研究センター 助手	技術課 錯体化学実験技術係 技官	
8.4.1	美 宅 成 樹	併任	理論研究系 分子基礎理論第三研究部門 教授	東京農工大学 工学部 教授	新規
8.4.1	小 尾 欣 一	併任	電子構造研究系 電子構造研究部門 教授	東京工業大学 理学部 教授	新規
8.4.1	福 山 秀 敏	併任	分子集団研究系 分子集団研究部門 教授	東京大学 大学院理学系研究科 教授	新規
8.4.1	杉 本 豊 成	併任	相関領域研究系 相関分子科学第二研究部門 教授	大阪府立大学 先端科学研究所 教授	新規
8.4.1	吉 川 雄 三	併任	錯体化学実験施設 錯体触媒研究部門 教授	岡山大学 理学部 教授	新規
8.4.1	平 谷 篤 也	併任	理論研究系 分子基礎理論第三研究部門 助教授	広島大学 理学部 助教授	新規
8.4.1	金 森 英 人	併任	分子構造研究系 分子構造学第二研究部門 助教授	東京工業大学 理学部 助教授	新規
8.4.1	中 沢 浩	併任	錯体化学実験施設 錯体触媒研究部門 助教授	広島大学 理学部 助教授	新規
8.4.1	細 野 秀 雄	併任	東京工業大学 工業材料研究所 助教授	極端紫外光科学研究系 界面分子科学研究部門 助教授	9.3.31 まで

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
8. 4. 1	平 田 文 男	併 任	数物科学研究科 機能分子科学専攻 教授		
8. 4. 1	高 田 恭 孝	併 任	数物科学研究科 構造分子科学専攻 助手		
8. 4. 4	Rubtsov, Igor Vladimirovich	採 用	電子構造研究系 基礎電子化学研究部門 非常勤研究員	チエルノゴロフカ化学物理研究所 高速現象研究グループリーダー	
8. 4.23	齋 藤 敦 子	辞 職		電子計算機センター 事務補佐員	
8. 4.24	禿 子 瞳	採 用	電子計算機センター 事務補佐員		
8. 4.30	鈴 木 教 之	辞 職	理化学研究所 有機金属化学研究室 研究員	錯体化学実験施設 錯体物性研究部門 助手	
8. 5. 2	Hansmann, Hans Ulrich Ewald	採 用	理論研究系 分子基礎理論第一研究部門 助手	スイス連邦工科大学 博士研究員	
8. 5. 3	朱 雷	採 用	相関領域研究系 助手(5/11付分子クラスター研究部門助手)	中華人民共和国 復旦大学 助教授	
8. 5.11	西 信 之	転 入	相関領域研究系 分子クラスター研究部門 教授	九州大学 理学部 教授	
8. 5.11	永 田 敬	転 入	相関領域研究系 分子クラスター研究部門 助教授	東京大学 大学院総合文化研究科 助教授	
8. 5.11	西 信 之	併 任	九州大学 理学部 教授	相関領域研究系 分子クラスター研究部門 教授	9.3.31 まで
8. 5.11	永 田 敬	併 任	東京大学 大学院総合文化研究科 助教授	相関領域研究系 分子クラスター研究部門 助教授	9.3.31 まで
8. 5.11	大 橋 和 彦	転 入	相関領域研究系 分子クラスター研究部門 助手	九州大学 理学部 助手	
8. 5.15	山 下 智 春	辞 職		電子構造研究系 事務補佐員	
8. 5.16	鈴 木 優 子	採 用	電子構造研究系 事務補佐員		
8. 6. 1	細 越 裕 子	採 用	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 助手	分子科学研究所 特別協力研究員	
8. 6. 1	小 江 誠 司	採 用	相関領域研究系 相関分子科学第二研究部門 助手	分子科学研究所 特別協力研究員	
8. 6.30	麻 田 俊 雄	辞 職	大阪府立大学 総合科学科 助手	理論研究系 分子基礎理論第一研究部門 非常勤研究員	
8. 6.30	中 本 忠 宏	退 職	分子科学研究所 特別協力研究員	錯体化学実験施設 錯体合成研究部門 非常勤研究員	
8. 7.15	Tolstikhin, Oleg Isaakovich	採 用	理論研究系 分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員	電気通信大学 電気通信学部 助手	
8. 8. 1	佐 藤 啓 文	採 用	理論研究系 分子基礎理論第四研究部門 助手	京都大学 大学院理学研究科 研修員	
8. 9. 1	岸 根 順 一 郎	採 用	理論研究系 分子基礎理論第四研究部門 助手	東京大学 大学院理学系研究科 研究生	
8. 9. 1	平 尾 強 司	採 用	分子構造研究系 分子構造学第一研究部門 リサーチ・アシスタント		
8. 9. 1	齋 藤 健 一	採 用	電子構造研究系 基礎電子化学研究部門 リサーチ・アシスタント		

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
8.9.1	今泉吉明	採用	極端紫外光科学研究系 反応動力学 研究部門 リサーチ・アシスタント		
8.9.1	木村一彦	採用	極端紫外光実験施設 リサーチ・ アシスタント		
8.9.1	柴山日出男	採用	技術課 極低温技術係 技術 補佐員 (研究支援推進員)		
8.9.15	渡邊正満	辞職	高エネルギー物理学研究所 放射光実験施設 助手	極端紫外光実験施設 非常勤 研究員	
8.9.30	津坂佳幸	辞職	姫路工業大学 理学部 助手	極端紫外光科学研究系 反応 動力学研究部門 助手	
8.9.30	高野秀路	辞職	ドイツ ケルン大学 研究員	分子構造研究系 分子構造学 第一研究部門 助手	
8.9.30	伊藤恭代	辞職		電子構造研究系 事務補佐員	

編 集 後 記

分子研レターズの35号も無事発刊の運びとなりました。なお、これまで3月と9月に発行されていた分子研レターズは、本号より1月と7月の発行となります。よりタイムリーな情報を皆様にお届けするための変更です。

御多忙にもかかわらず、快く執筆を引き受けてくださいました皆様方に編集委員一同、心よりお礼申し上げます。

分子研レターズ編集委員

塩谷光彦 (委員長)

田原太平 (本号編集担当)

岡本祐幸

小林速男

松本吉泰

森田紀夫

分子研レターズNo.35

発行年月	平成9年1月
印刷年月	平成9年1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