



# 分子研レターズ

1999・1 No.39



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

小学生のころ、同級生に近くの八幡様の官司の娘で梶というかわいらしい女の子がいて、あるときその家の近くでボヤがでた。悪童どもが『梶んちが火事だ』とはやし立てて泣かせたことがあったが、今回の話はそれとは全く関係がない。

分子研も創立以来四分の一世紀近くなるとさまざまな点で設立当初の様子とは様変わりがしてくる。顔触れは勿論のことだが、運営方針や研究内容にも大きな変化がもたらされてきた。場合によってはその存在理由さえも変ってきたかもしれない。

日本の化学を背負い、わが国の大学には設置できなかったような大型の、あるいは高価な測定装置を置いて、選りすぐった研究者を配置し、十分な研究費をつぎ込んで世界に引けをとらない、いやむしろ世界のトップにたつ研究を遂行しようとする分子研の当初の意図は、これまでノーベル賞授賞者こそでなかったけれども、相当程度達成されてきたのではないかと思う。化学における研究者間では、物理化学者に限らず、IMSといえは世界のだれでも知っている所となっている。

しかし、近年文部省、通産省を始めとする多くの省庁で1チーム数億円程度の大型プロジェクトが発足するようになると、「十分な研究費をつぎ込んで」という点ではややご利益が昔に比べて減ってきた。また研究者間の合意によって自主的に決められた昇任の制限や助手の任期制、60歳停年という停年制が社会の変動にともなうやや息苦しくなってきた、これを手直ししたくなるのも人情かもしれない。しかし、分子研の当初の意気込みはそんなものではなかったと思う。

研究課題にしても、初期のころとは大分か

わってきて、今日ではむしろいわゆるバイオ系や新しい物質や材料などの凝縮系を取り扱う研究が急速に増加しているように見える。このような変化は時代の流れや要求に沿って起こってきたものであろうが、そこでちょっと気になることが心を掠めないではない。それは、そもそも分子研では世界に先駆けた研究をするところではなかったのかという思いである。誰もやっていない研究課題には世間は全く無知である。しかし、それが重要な課題であることがわかれば世間はつい

てくる。分子研が世間についていっては何にもならない。設立当初は人材、機器、研究費と3拍子も4拍子もそろっていたので、やすやすと(というのはいささかいいすぎか)世間あるいは世界をリードすることができたであろうが、研究費が並になると研究も並になってしまうのは仕方がない。ここの一番、初にかえって新たな研究意欲を発揮してほしいものである。

来春は第5代目所長を迎えることになっている。いずれにしてもこれまでの代々の所長と同様に世界に冠たる有能且つ優秀な方が選出されることには疑いが無いが、研究所の財政、運営はより一層厳しくなるものと考えられる。そうなるに新所長の舵取りがこれまで以上に重要になってくるであろう。その手腕を期待したい。新所長には分子研という車の梶棒をしっかりと握っていただき、車が火事になって火の車にならぬよう、大いに頑張っていたいただかなければならないが、所員一同も新しいタイヤに履き変え、新たにハイオクガソリンを注入し、化学という障害物の多い国際ラリーのコースをトップをきって完走されることを熱望してやまない。

舵

立命館大学理工学部教授  
元 錯体化学実験施設長  
大 瀧 仁 志

# 目 次

## 巻 頭

舵.....	大瀧 仁志
--------	-------

## 研究紹介 1

水クラスター、陽イオンアルゴンクラスター、そして高分子エネルギー勾配法.....	岩田 末廣.....1
--	-------------

## 研究紹介 2

軟X線分光と内殻励起.....	小杉 信博.....6
-----------------	-------------

## 研究室紹介 1

分子制御レーザー開発研究センター 特殊波長レーザー開発研究部 (平等グループ).....	平等 拓範.....11
--	--------------

## 研究室紹介 2

分子物質開発研究センター 機能探索研究部 (永田グループ).....	永田 央.....14
------------------------------------	-------------

## 流動部門紹介 1

分子クラスター研究部門 (三好グループ).....	三好 永作.....17
---------------------------	--------------

## 流動部門紹介 2

錯体合成研究部門 (西田グループ).....	西田 雄三.....19
------------------------	--------------

## レターズ

総研大・葉山キャンパスに移って.....	松本 吉泰.....21
----------------------	--------------

Loius Pasteur 大学 Sauvage 研究室での留学報告.....	衣袋 文明.....23
---	--------------

## ニュース

第 8 回分子科学研究所オープンハウス.....	岡本 祐幸.....25
--------------------------	--------------

電子会報「分子科学速報」について.....	藤井 正明.....26
-----------------------	--------------

## 受賞者紹介

岩村 秀 名誉教授に藤原賞.....	井上 克也.....28
--------------------	--------------

猿倉信彦助教授にレーザー学会レーザー研究論文賞.....	大竹 秀幸.....29
------------------------------	--------------

総研大生 劉 振林君にレーザー学会優秀論文発表賞.....	猿倉 信彦.....30
-------------------------------	--------------

## 分子研を去るにあたり

分子研での4年間	神長 暁子	31
分子研の四季	小倉 尚志	32
My Recollections about Okazaki	Ulrich Hans Ewald Hansmann	33

## 外国人研究員の印象記

The Changes in IMS	Sun, Xin	34
My Stay in IMS	Mkhitar Simonyan	36

## 客員外国人研究員の紹介

基礎光化学研究部門 Pettersson, Lars G. M. 助教授	小杉 信博	38
基礎光化学研究部門 Ågren, Hans A. 教授	小杉 信博	39

## 外国人研究者の紹介

## 新任者紹介

## 総合研究大学院大学

平成10年度総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名	47
総合研究大学院大学平成10年度(10月入学)新入生紹介	47

## IMS マシン報告

プログラマブル微小定電流電源	豊田 朋範	48
----------------	-------	----

## 課題研究報告 1

多重機能を有する $d-\pi$ 複合電子系物質の創製	北川 進	50
-----------------------------	------	----

## 課題研究報告 2

化学合成した金属酵素モデルによる酸素分子変換系の研究	成田 吉徳	56
----------------------------	-------	----

## 課題研究報告 3

炭素クラスター科学の新展開	丸山 有成	60
---------------	-------	----

## 研究会報告

若手分子科学者のための物理化学研究会	63
--------------------	----

## 分子研コロキウム (第686回～)

## 共同研究実施一覧 (平成10年度前期)

## 海外渡航

## 人事異動

## 編集後記



# 水クラスター、陽イオンアルゴンクラスター、 そして高分子エネルギー勾配法

分子研 岩 田 末 廣

分子研に在任予定の6年3ヶ月のうち、すでに4年10ヶ月が過ぎ去ろうとしています。研究室は最終段階にすでに入っています。幸い多くの方々の援助によって研究室を急速に立ち上げることができました。ともかくも、2年目からは論文の数だけで見ると「元氣よく」仕事をしているように見えます。この分子研レターズNo. 31号の巻頭言で茅慶大教授には「暴挙」と評していただき、またNo. 32号に紹介したように私の学生であったこともある樋山みやび博士は、「6年間の任期」を分子研における助手の6年任期に比して檄をとばしてくれたのですが、それらに比べられているか正直言って自信がありません。しかし、前の職である慶大理工にこの4年間とどまっていたと仮定した場合と比較すると、少なくとも私個人の研究生活は格段に豊かであったと言えると思います。慶応時代もおおよそ同じように研究室を運営してきたのですが、私の研究室では基本的には一人一人がバラバラに研究をしています。必然的に研究課題は多岐にわたってしまいます。このレターズではその一部のみを紹介します。

水分子が電子を捕捉しているのか？ はたまた電子雲が水分子を束縛しているのか？

水クラスターと金属イオンや有機物の錯体の構造、反応、スペクトルを分子軌道計算によって研究してきましたが、昨年春頃から、水分子だけのクラスターの負イオン $(\text{H}_2\text{O})_n^-$ を鶴沢技官と研究しています。実験的には $n=2, 6, 7$ と $n \geq 10$ の負イオンがよく調べられていますが、 $n=3, 4$ も観測されとも言われています。小さいクラスター負イオンでは、余剰電子は水クラスターが作る双極子場に捕らえられているといわれています。点双極子 $\mu$ の場におかれた電子のシュレディンガー方程式を解くと $\mu$ がある値以上では束縛状態が存在するということが証明されています。その典型例が水分子2量体の負イオンと言われていました。図1の左端は、水3量体の双極子場に捕捉された電子雲を描いています。左下隅に小さく描かれている構造が3量体の鎖です。この図では余剰電子50%を含むように「雲」を描いています。双極子場捕捉電子の特徴は空間的に著しく広がっていることです。私たちはこの型の負イオンとは性質の違う負イオンクラスターが安定に存在することを見つけました。図1の右端の3量体負イオンは $D_{3h}$ の対称性にある三分子の中に

余剰電子が内包されています。この型の負イオンの特徴は余剰電子が無くなると、水分子はバラバラになってしまいます。その意味で余剰電子が水分子を捕らえていると言うこともできそうです。実際には、6個の分極したOH結合が余剰電子を局在化させ、局在した余剰電子の場による引力で水分子はバラバラにな

らないのです。私たちは(OH){e}(HO)結合と呼び始めています。化学結合の新しい型とみることもできます。図1の中央の負イオンでは右端にある水2量体と左端の水分子の間に余剰電子は分布しています。実験で観測されている負イオンは多分双極子束縛型でしょう。水分子間の水素結合のために系全体が安定になっていますから。右端の負イオンには水素結合が一つもありませんので系全体のエネルギーは双極子束縛型より高くなります。しかし、負イオンの構造に関する分光学的な証拠はまだありません。同様な負イオンが4量体でも安定に存在することを確認している最中に、私たちは、突然、富宅神戸大教授の実験を思い出しました。富宅さんとドイツのHartelたちは、 $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})_n$ 、 $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ 、 $\text{Cs}(\text{H}_2\text{O})_n$ のイオン化しきい値が $n \geq 4$ で金属にも $n$ にも依存しない一定値になることを見いだしていました。もっとも簡単な説明は、 $n \geq 4$ でイオン対 $\text{M}^+ \cdots (\text{H}_2\text{O})_n^-$ がで

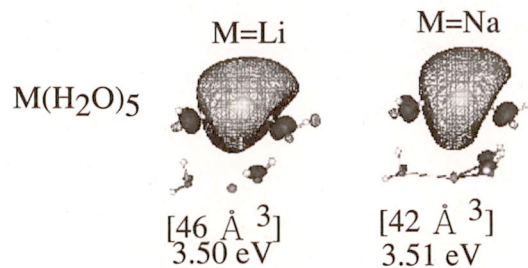


図2  $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})_5$ と $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_5$ の構造。球状の電子雲の中には余剰電子の50%が含まれている。[ ]の数字はその電子雲の体積。エネルギーは垂直電子脱離エネルギー

### 3 量体負イオン

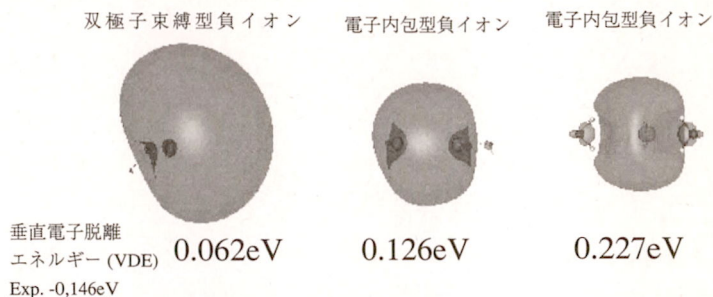


図1 水の3量体負イオンの構造。球状の電子雲の中には余剰電子の50%が含まれている。残りの50%は外側の広い空間に分布している。

きていて、負イオン $(\text{H}_2\text{O})_n^-$ の構造が金属に依存せず、水4量体が余剰電子を捕捉しているとする事です。しかし、このような簡単な見方にはいろいろ矛盾があります。例えば、イオン半径の違いです。この実験事実を説明するために、いくつかのグループが様々な理論的計算をしました。突然気がついたのはイオン対 $\text{M}^+ \cdots (\text{H}_2\text{O})_n^-$ の負イオンは、(OH){e}(HO)結合で安定化した内包型の負イオンではないかということ

す。早速、その観点で $\text{Li}(\text{H}_2\text{O})_n$ と $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ の構造を探し始めました。予想は的中し、図2に示すような構造が見つかりました。金属からイオン化した電子は、OH結合によって挟み込まれています。図の下のは、不對電子を50%含む体積と垂直電子脱離エネルギーです。LiとNaのクラスタの構造は酷似しています。二つの他にも異性体がありますが、ほとんどの場合、LiとNaのクラスタは1対1の対応をしています。私たちの仮説を実証するためには、分光学的測定が不可欠です。もちろんもっと詳しい理論計算も要求されています。

### アルゴンクラスター陽イオン $\text{Ar}_n^+$ の光解離

$\text{Ar}_n^+$ は可視部に吸収帯があって、電子励起後解離していきます。この解離過程を池上助手は非断熱遷移を許す古典軌跡計算によって調べてきました。この解離過程で大切なのは、電子状態（言葉を少し厳密に使うと、断熱状態）を飛び移りながら解離していくことです。主最終生成物は $\text{Ar}_2^+$ です。いいかえると、光エネルギーは原子の蒸

発に使われるのですが、この蒸発は多くの非断熱遷移の後基底状態にたどりついてから主に起きます。電子状態間を飛び移ることがこの過程の重要ステップなので、単純な軌跡計算はできません。この研究ではDIMハミルトニアンという経験的モデルハミルトニアンを各時間ステップごとで解き、粒子に働く力を計算します。DIMハミルトニアン行列は $3n$ 次元で、核の運動の自由度も $3n$ ですので、 $n = 23$ になりますと決して少ない計算量ではありません。図3のa)は、光励起直後の断熱状態にとどまっている確率の時間変化です。いわば、第1回目の非断熱遷移するのにどのくらい時間がかかるかを示したものです。この図で気がつくことは二つあります。励起直後は指数関数的に減衰していません。又、 $n = 11$ 以上ではほとんど同じ曲線で表せることにも気づきます。図3のb)は基底状態にもどってくる時間分布を表しています。ここでも $n = 11$ 以上ではほぼ同じ時間変化をします。このような振る舞いは、非断熱遷移

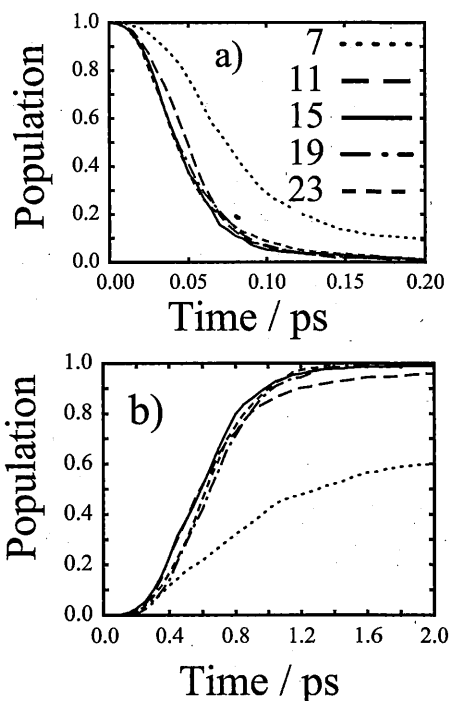


図3

a)  $\text{Ar}_n^+$ が励起された状態にとどまっている確率。

b) 基底状態にもどってくる確率。

をする場所（二つの電子状態が交差している）がほぼ一様に分布していると仮定すると、おおよそ説明ができます。

この研究は、孤立系の無輻射過程（internal conversion）の研究とみることもできます。DIMハミルトニアンは $\text{Ar}_n^+$ 系についてはよいモデルになっていることが知られていますので、実際に近いモデルを使い、非断熱遷移をきちんと取り入れた孤立系の無輻射過程研究の数少ない研究例だと思います。

### 無限1次元高分子の構造と調和振動数の理論計算——エネルギー勾配法の開発

量子化学計算による分子の電子構造研究が化学の広い領域で不可欠になった背景として、解析的エネルギー勾配法の開発という理論的面で breakthrough がありました。無限高分子鎖を ab initio MO 法や密度汎関数（DFT）法で計算するプログラムはいくつか世界にあったのですが、この解析的エネルギー勾配法を組み込んだ実用的なプログラムはありませんでした。昨年春に、東大の田隅先生の研究室から D2 で移ってきた平田聡博士は、1 年半のうちにハートリー・フォック（RHF）法の 1 次および 2 次微分、DFT 法とメラー・プレセット 2 次摂動法（MP2）の 1 次微分のプログラムを完成しました。HF 法の 1 次微分については論文が報告されてはいましたが、他はすべて初めてでしたので多くの理論的・技術的問題を解決しなければなりません。ポリエチレンやポリアセチレンの振動スペクトルにも応用しましたが、水素結合クラスター（ $\text{HF}_n$ ）の分子内 HF 結合と分子間 HF 結合が  $n$  にどのように依存しているかを調べた結果を図 4 に示します。BLYP と B3LYP はともに DFT 法であり、電子相関が取り込まれています。矢印が存在する実験値に対応しています。分子内・分子間の HF 距離が  $n$  に鋭く依存しており、電子相関効果を取り入れていない RHF 法はこの依存性をうまく記述できていないことが読みとれます。

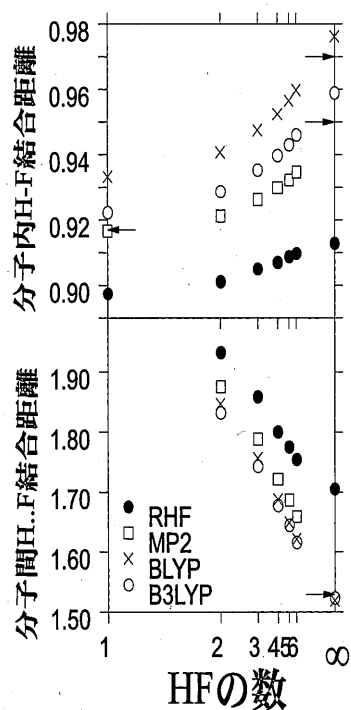


図4  $(\text{HF})_n$  鎖の中の分子内 HF 結合距離と分子間 HF 結合距離の  $n$  依存性。矢印は実験値。

---

又、ここでは紹介できませんでしたが、天能助手は、多電子理論の開発において、海外で注目されているいくつか成果を上げており、海外とも共同研究を進めています。彼は又理論部門内の平田教授グループや谷村助教授との共同研究を進めており、拡大した理論部門内の研究活動の一つの目にもなっています。

岩田グループのこの4年間の研究を語るとき、海外からの長期滞在者の寄与に触れなければなりません。サンパウロ大学のOrnellas客員教授、プラハのヘイロフスキー研のHrusak博士、学術振興会博士研究員として滞在したYumin Li博士とFiedler博士らは、たんに研究成果を上げたと言うことだけでなく研究室作りに関与して頂いたと言えます。彼らとは今でも共同研究を進めています。

岩田グループの研究では実験グループとの共同作業が重要な役割をしています。時には実験グループから学生がある期間派遣されて研究を進めました。富宅（分子研→神戸大）、茅・中嶋（慶応大）、永田（分子研、東大）、三上・江幡（東北大）、藤井（早稲田大→分子研）、宇田川（東北大）、金森（東工大）諸先生のグループなどとの共同研究は実り豊かでした。最近では海外の実験グループとの共同研究も始まり、Ng（アイオワ大）教授とは $N_2$ 、 $CO$ 、 $O_2$ などのイオン状態について研究を進めています。

## 軟X線分光と内殻励起

分子研 小 杉 信 博

### 1. はじめに

私の興味の中心は内殻励起に関わる基礎過程です。連続状態への弱い内殻吸収しか起こさない非共鳴のX線源は軟X線光電子分光（XPSあるいはESCAと呼ばれる）などでよく利用されています。しかし、内殻励起を強く起こす吸収帯を選んでX線を共鳴吸収させるには放射光の利用が不可欠です。放射光を利用すれば、特定の原子に局在している非結合性の内殻電子を次々選んで、X線吸収、共鳴電子放出、共鳴発光、共鳴解離イオン放出など価電子が関与するいろいろな応答を観測することができます。我々のグループでは、方法論的に確立したXPSやEXAFSなどとは異なる内殻現象を利用して、他の方法では得られない物質の電子構造・分子構造に関する知見を探っています。

放射光分子科学と呼べる分野の研究は、レーザーを利用した分子科学とほとんど同じ内容なのですが、研究者人口が少なく、国内の学会では肩身の狭い思いをすることがしばしばあります。ただ、分子研では極端紫外光科学研究系が設置されており、独自の大型施設UVSORもあるので、それほどではありません。このように分子研には放射光分子科学という分野を開拓推進しなければならないという使命が与えられているわけですが、現在、我々のグループはUVSORを生かした研究とUVSORに拘らないで他施設も利用する研究の2本立ての作戦をとっています。研究を

- (1) UVSORでしかやっていないもの、
- (2) UVSORでも他施設でもやっているもの、
- (3) UVSORでは困難で、最新の他施設でやれるようになるもの、

に分けると、我々の研究は(1)と(3)を狙ったものになります。(1)さえあればUVSORの将来には何ら不安はないとも考えられますが、同じ研究が10年以上も(1)のままにとどまっているのは"domestic"化の危険信号かも知れません。そこで、放射光分子科学として広い立場で見るように心がけつつ研究を進める必要があります。UVSORに拘らない立場から研究を進めることは、UVSORの将来、特に更新・増強計画を立てる上でも必須のことだ考えています。

現在、私の分子研での研究計画の第1フェイズが終わりつつあり、第2フェイズについて準備を始めているところです。気持ちに余裕がなかった第1フェイズ初期に対応できなかった外国人

研究者の長期滞在希望にも最近は応じられるようになってきました。以下では、第1フェイズとして伊藤所長の下でどういう成果を挙げているかに限って、簡単に紹介したいと思います。

## 2. 軟X線固体分光における成果

これは上述の(1)を狙った研究成果です。現在、助手の高田恭孝君と学生の初井宇記君が参加しています。分子研レターズNo.31(1994.9)の研究室紹介欄とNo.33(1995.9)の新装置紹介欄に書いたように、軟X線の二結晶分光器が我々のグループの専用装置です。他施設では得にくかったエネルギー領域(900 eV領域)を使って研究を始めました。分光結晶の放射線損傷による分解能の劣化を防ぐために結晶を毎週のように研磨して使うなど、他施設に対して競争力を保つ工夫をいろいろしてきました。私は以前、二価銅の1s吸収における終状態効果をテーマのひとつとして研究し、硬X線による1s→4p励起(9000 eV領域)でも3d<sup>9</sup>電子配置が配位子からの電荷移動による安定化を大きく受け、原子価結合的には3d<sup>10</sup>配置成分が混合するような大きな終状態効果を実験的に見だしていました。これはその後、銅酸化物超伝導体の硬X線分光による電子構造研究においてかなり引用される成果になっています。UVSORの放射光では2p→3d励起が可能になりますので、終状態効果を示さなくなる二価銅ではなく、3d<sup>9</sup>と3d<sup>10</sup>の間で終状態効果が期待できる二価ニッケルをまず取り上げることにしました。

さて、内殻分光の実験データから光物性の情報を得るには、モデルハミルトニアンを使った理論解析が常套手段となっています。これまで2p内殻励起で対象になっている遷移金属化合物では、遷移金属のまわりを配位原子が三次元的に結合したものが多く、分子性配位子が平面的に配位しているようなものはほとんどありません。また、分子性配位子の寄与を定量的に見積もることはこれまでの理論解析の枠内では困難です。我々の研究目的は、理論解析にあまり頼らず、放射光の直線偏光性を利用した偏光スペクトルから電子構造情報を得ようとするものですので、異方性の強い平面形錯体は非常に好都合です。しかも、平面配位の電荷移動型錯体は、多様な物性を示す点で分子科学の分野で興味を持たれています。銅化合物での経験から、八面体配位構造でも歪めば偏光依存性が出てくるので、まずは典型的な平面系で基礎的なデータを測定するところから始めました。幸い以下のようにいくつか新しい芽となる成果を挙げることができました。

- ・シアノ錯体 K<sub>2</sub>Ni(CN)<sub>4</sub>の2p→3d吸収スペクトルで、これまでに報告のないほど異常に強いサテライト帯を発見しました。単結晶配向試料の偏光特性の測定から、低スピン3d<sup>8</sup>系のニッケル化合物では通常考えられない遷移方向(面外π方向)であることがわかりました。結局、これは当初期待した終状態効果などではなく、Ni 2pから配位子π\*軌道へのMLCT遷移によるも

のであると帰属できました。この実験で我々は、 $2p \rightarrow 3d$ 主ピークとサテライト帯の強度と偏光特性を解析すれば基底状態における $\sigma$ 供与と $\pi$ 逆供与を対称性分離して半定量的に評価できるという新しい方法を提案できたことになります。現在、いろいろな分子固体系に応用するとともに、理論面では分子研客員教授のLars Pettersson博士（ストックホルム大学）の協力を得て、量子化学に基づいた解析を始めています。また、モデルハミルトニアンの方の立場の国内外の研究者も我々の実験結果に興味を持っており、それぞれが解析手法の拡張に取り組んでいます。

・形式二価ニッケルのジチオレン系mnt錯体とホールをドーピングした形式三価ニッケルのmnt錯体で、 $2p \rightarrow 3d$ 主ピークの偏光特性を比較した結果、形式三価のニッケルにおいて二つの3dホールの対称性を分離することができました。また、その強度比が1:2にならないことから、3d軌道と配位子軌道の混合の程度、言い換えるとホールの成分が対称性によって異なることがはっきり示されました。配位イオウの1s吸収の偏光測定からも矛盾ない結果が得られています。価数を評価する際、内殻吸収はフェムト秒オーダーのタイムスケールでの情報を与えるところが、他にない大きな特徴です。従来、内殻吸収から金属の価数の評価する際には、 $2p \rightarrow 3d$ 主遷移のピークシフトあるいはピーク強度を解析するのが一般的でした。また、同じピークシフトを、研究者によっては価数ではなく配位構造に帰属させたり、配位子の結合距離に帰属させたりもしています。そのように状況証拠だけから、最も知りたい物理量に対応付けするという解析方法は得てして自分に都合の良い結論を導きがちで、妥当なものではありません。この実験で我々は、価数の概念に対して物理的に根拠のある結果を示すことに成功しましたので、現在、さらにNi-Ni結合を持つ多核錯体など未知の電子構造研究に応用しているところです。

・グリオキシム錯体 $Ni(Hdmg)_2$ などの系に対して、Ni 2p内殻励起状態に励起光のエネルギーを合わせて、Ni 3d, 3p, 3s電子領域の高分解能光電子スペクトルを測定しました。そして、励起光エネルギーを増加させると放出電子の運動エネルギーが低下してくる、すなわち負の励起エネルギー依存性という奇妙な共鳴電子放出の挙動を見いだすことに成功しました。基底状態からの直接イオン化では生成できない多数の禁制イオン化状態をはっきりと観測できたことは、全く新しい実験事実です。さらに分子間相互作用が強い系では励起エネルギー依存性が弱くなり、極限の金属状態では全く励起光のエネルギーに依存しなくなることも見つけています。最近、他施設でも分解能を上げることでいろいろな励起エネルギー依存性を示す禁制帯が酸化物で見つかっており、新しい研究分野が開けつつあります。また、同じ2p共鳴で



の軟X線発光（ラマン散乱になる）の高分解能実験も興味深いのですが、国内では光源の制約でかなり困難になっています。幸い、その分野のパイオニアである Joseph Nordgren 教授（ウプサラ大学）のグループが我々の系に興味を持って下さったので、現在、国外で実験を始めているところです。

なお、私が分子研に赴任したときには、(1) を狙って上記の研究を始めたつもりでしたが、4、5 年経った現在、その研究は (2) の状態になりつつあります。さらに数年後には、(3) の状態まで発展してくると予想しています。UVSOR 建設後 20 年に近づいた今、建設後数年以内の新施設である高輝度光源施設とは勝負にならない部分があることは否めません。今後、"international" にその研究分野の先頭を走りながら (3) の方向に進むか、宗旨変えて再度 (1) ねらいのテーマを探すか、研究を数年間ストップして UVSOR の更新・増強計画に突き進むか、特に最後は個人の決断でできるものではありませんが、悩むところです。

### 3. 軟X線気体分光における成果

これは (3) の分類になります。研究技官の足立純一君が参加しています。高工研、カナダ、ドイツ、スウェーデンなどのグループと共同研究をしています。高輝度光源を擁する最新の施設では実効的に光量が増えており、固体と同様に、気体分子の炭素、窒素、酸素の  $1s$  電子領域での共鳴電子放出、共鳴解離イオン放出、共鳴発光などの実験に研究者が群がっている状況です。残念ながら UVSOR ではその流れに全く乗ることができませんが、共鳴過程の中間状態である内殻励起状態の電子構造、分子構造、振電構造をあまり明らかにしないでそれらの研究が進んでいるのも事実です。共鳴過程を詳細に見ると、同じ内殻励起状態に励起していてもエネルギーによって微妙な違いが観測されます。その違いについては内殻励起状態の振電構造の詳細を知った上で議論する必要があります。

現在、我々のグループは流行を追わず、内殻励起状態の振電構造の解明に集中しています。放射光を使えば、最低励起状態からイオン化しきいを越えたところまで一挙に観測できます。内殻電子励起では主に励起先だけ考えればよいという利点があり、分子の電子構造、分子構造の理解が比較的容易です。もちろん、開殻系では内殻電子のスピンも大きく関与します。また、イオウなどの  $2p$  励起では内殻電子のスピン軌道相互作用も重要です。我々は分解能の向上などによって、内殻電子のスピンの影響や、Rydberg 状態、Rydberg-valence 混合状態、2 電子励起状態などの振動構造や種々の振電結合 (Renner-Teller、Jahn-Teller、擬 Jahn-Teller 効果など) をはっきり見いだすことに成功しています。これらのほとんどは価電子領域で知られている現象なのですが、中には内

---

殻電子の局在性が関係するものなど内殻特有の興味深い現象も含まれています。

最近、共鳴過程の研究に群がっている研究者達も、我々が地道に積み重ねてきた研究成果を参考にして議論してくれるようになってきました。そこで、もうしばらく内殻励起状態における分子振動の研究を続けていくつもりです。これらの実験結果については、現在、分子研招へい研究者として滞在している理論化学者のHans Ågren教授（リンチェピン大学から王立工科大学KTHに転任予定）が興味を持ってくれています。

## 分子制御レーザー開発研究センター 特殊波長レーザー開発研究部（平等グループ）

分子研 平 等 拓 範

分子制御レーザー開発研究センター（Laser Research Center for Molecular Science）、特殊波長レーザー開発部（Advanced UV and IR Tunable Lasers）の発足にともない、平成10年2月に福井大学工学部電子工学科から赴任致しました。赴任にあたり、分子研の伊藤所長をはじめとする諸先生方並びに職員の皆様に、また、福井大学の諸先生方、事務の皆さまに大変お世話になりました。この場を借りてお礼申し上げたいと思います。

まず、分子研に来てからの感想を述べさせていただきます。第一に素晴らしいと思うのは分子研の研究レベルもそうですが、支援施設や技術課の皆さんを始めとした研究のバックアップ体制が整っていることでしょう。また、図書館や機械工場が24時間体制で使えることも大きいと思います。その他の環境も、かなり良く、このような体制が分子研の高い研究レベルを支えているのでしょう。ただ、学生が少ないのは寂しいですが。

次に、これまでの研究について紹介させていただきます。さて、今日の便利な高度情報化社会はコンピューターや通信の発展によるものであり、真空管からトランジスタ、集積回路と電子素子の小型化、集積化、高速化追及の結果であることは言うまでも有りません。ある見方をすれば、電子素子の固体化です。振り返ってレーザーですが、遅ればせながらこちらも“固体化の時代”に突入したと言えます。固体レーザーの研究はMaimanの実験以来40年近くの歴史を持ちますが、従来の装置では、励起光源に放電管を用いていたため、気体レーザー同様に大型で大電力を消費し、寿命、コヒーレンス長も短く、応用も限られていました。一方、もう1つの固体レーザーであるLD（半導体レーザー）は小型、高効率、長寿命で高出力化も著しいが、輝度が低く、ビーム品質が悪いなど種々の問題を残していました。そこで、近年、これを励起源として利用する固体レーザーの研究開発に対する関心が非常に高まってきました。この技術動向は、スタンフォード大学のByer教授により、“固体レーザーのルネッサンス”と称され、現在でもその動きが益々活発化しています。最近では、重力波検出を目指した高コヒーレントなレーザーや、また、種々の波

長変換技術と組み合わせた広帯域波長可変光源ができつつあります。

これまで、本研究グループは、LD励起固体レーザー (DPSSL, Diode-Pumped Solid-State Laser) 分野において、レーザーの単一周波数化に用いるエタロンそのものをレーザー共振器としたLD励起Nd:YVO<sub>4</sub>マイクロチップレーザーの提案や次世代の高出力、多機能レーザーと目されるYb:YAGレーザーの可能性の検証やモデル化などを行ってきました。LD励起固体レーザーは、大量のLD出力光を束ねることのできる特殊光学系であり、同時に空間的、スペクトル的特性を改善するコヒーレンシーコンバーターでもあると言えます。さらに、波長変換技術と組み合わせる事により発振波長や時間的特性も加工が可能な多機能輝度変換器と成りえます。LDの優れた特長を引き継いだ小型、多機能の特殊波長レーザーは、基礎科学から通信・情報処理、環境計測など幅広い分野での応用が可能なため、その研究開発が期待されています。例えば、マイクロチップレーザーですが、高コヒーレントな発振が可能だけでなく、周波数変調も容易なため高精度干渉計や各種周波数標準器とすることができます。さらに、光注入同期を行うことにより高出力レーザーの高安定化が可能になります。このような高コヒーレントレーザーでは非線形波長変換も容易に行えるためその用途は広がります。福井大学では、この様な新型固体レーザーを光源とした地球環境計測ライダー (レーザーライダー) を研究しました。エアロゾルの空間分布を測定するミー散乱ライダーや大気温度を計測する回転ラマンライダーなどです。ところで、強力なレーザー光は肉眼に危険であり使用場所や使用時間帯に制限が生じます。しかし、1.5  $\mu\text{m}$  より長い波長域では、1  $\mu\text{m}$  帯の10<sup>5</sup>倍以上の強度まで安全であることが知られています。そこで、光パラメトリック発振によりLD励起Nd:YAGレーザー光を1.55  $\mu\text{m}$  に変換することで、小型可搬なミー散乱ライダーを構築し、フィールドで評価を行いました。また、光注入同期を行った高出力レーザーは、線幅がフーリエリミットに達しており、高分解能のフィルターで大気構成分子やエアロゾルからの散乱光を分光することにより光のドップラーシフト量を検出できるため、風向風速が計測できるようになります。LD励起固体レーザーでは、これらの新しい環境計測を可能にするだけでなく、小型で高効率、長寿命なため人工衛星に搭載することが可能になります。現在、NASDAでは、LD励起固体レーザーを用いた衛星搭載ライダーによる地球規模観測に本格的に取り組んでいます。すなわち、LD励起固体レーザーが宇宙開発や地球環境計測に1つのブレークスルーを与えようとしています。

本研究グループでは、今後も、理化学分野から産業分野に新展開をもたらすような新しい光源開発を目指しており、分子研においては特に広帯域の赤外光発生を考えています。具体的には、

---

Yb:YAGマイクロチップレーザーの多機能化、高出力化とともに、YAGセラミックなどの新材料の研究開発も検討し、また、多機能な非線形波長変換素子として疑似位相整合を用いた新しい素子を研究してゆく予定です。すなわち、多機能非線形波長変換を含んだ広義の全固体新型レーザーを探求し、レーザーの可能な波長領域を拡大して行きたいと思っています。

最後になりましたが、この4月からは福井大学から斎川次郎君が総研大に進学し、当開発部に参加してくれました。まだ、学生1名、教官1名の小さなグループですが分子科学に貢献できるような新しいレーザーの開発を目指して研究を進めてゆく予定です。宜しくお願いいたします。

## 分子物質開発研究センター 機能探索研究部（永田グループ）

分子研 永 田 央

平成10年3月に分子物質開発研究センター・機能探索研究部の助教授として着任しました。読者の皆様はすでにご承知かと思いますが、この部門はレーザーと物質の2つの開発研究センターが発足したときに新設された5部門のうちの1つです。新設部門でありますために、実験室や研究室のスペースを確保するため所内の多くの皆様にご協力いただき、また実験棟の5階に物質合成の実験室を立ち上げるにあたって伊藤所長・小林センター長をはじめ多くの方にご尽力いただきました。皆様にあつくお礼を申し上げたいと思います。おかげさまで10月にはドラフトチャンバーを備えた新しい実験室が完成し、実験環境も整ってきたところです。

私は京都大学理学部の丸山和博先生（現京大名誉教授）の研究室で研究生活をスタートしました。専門分野は一応有機化学、ということになります。折しも、直接の指導教官だった大須賀篤弘先生が当時分子研機器センターにおられた山崎巖先生（現北大）と共同研究をされることになり、確か修士2年の年に蛍光寿命測定の手伝いのために大須賀先生のカバンを持ってのこのこやってきたのが分子研の門をくぐった最初の時です。当時助手をされていた玉井尚登先生（現関学大）に光子計数法の原理をていねいに説明していただいたり大型計算機の使い方を教えていただいたりして、数日間楽しい思いをしました。その後、博士1年の冬に丸山先生から「君、分子研に行ってX線結晶解析の勉強をしてきたまえ」と言われまして、関連領域研究系に3ヶ月間お邪魔することになりました。結晶解析は鳥海幸四郎先生（現姫工大）にみっちり教えていただいたわけですが、その間相關や錯体の皆さんとおつきあいいただき、また施設利用で来られる方ともお話しさせていただいて、非常に刺激を受けるところが大きかったものです。その後何度か施設利用でX線回折装置を使わせていただきましたが、よもや自分が常勤のスタッフとして分子研に籍を置くことになるとは想像もしていませんでした。ほとんど毎日有機合成ばかりやっていて分光測定も物性測定も「腰かけ」程度にしかやっていない私のような人間を三度にもわたって受け入れてくれたこの研究所に何か不思議な縁を感じています。

研究内容については、まだ始めたばかりなので「抱負」を述べるほかありません。京大時代はポルフィリンを利用した光合成モデル化合物の合成と物理化学的性質の研究、それからマンガン錯体を使った酸素発生反応の研究をやっていました。平成7年から8年にかけて1年半アメリカのコロラド州立大学に留学しましたが (R. G. Finke 教授)、ここでは有機金属結合ポリオキソアニオンの研究を行いました。対象にしてきた物質がさまざまで一見脈絡がないようですが、節目節目でテーマを変えていくときに意識していたことがあります。それは、「異なる機能を有する分子部品を1つの分子の中に組み込むことで、多段階の化学過程を合理的に制御する分子機構を作りたい」ということです。光合成モデル化合物の研究では、ポルフィリンに電子受容体 (キノンなど) を結合して光誘起電子移動のプロセスを調べていたわけですが、これは2つの機能性分子部品 — 光を吸収するポルフィリンと電子を受容するキノン — を組み合わせたものであり、上記の分子機構の最も単純なケースと言えます。電子移動するだけでは最終的に電荷再結合で始状態に戻ってしまい、光を熱エネルギーとして散逸させるに過ぎませんが、これで化学反応を駆動できれば光吸収と化学変換の2つの過程を組み合わせることができます。また、2つ以上の化学反応を組み合わせることで、通常なら熱として散逸してしまう余分の化学ポテンシャルを有効利用することができるかもしれません。

分子部品を組み合わせる、という立場では最近物理的な手法もずいぶん発展していますが、1 nm 程度のサイズの部品を  $10^{20}$  個も一度に組み立てられる古典的な化学合成は今でも十分な威力を持っています。分子が大きく複雑になるにつれて扱いは困難になりますが、分子量数千程度までの大きさなら普通の有機化学の手法で取り扱うことが十分可能です。共有結合でつないでしまえば溶液中でもばらばらにならない、という利点もあります。ただ、化学合成の場合どうしても作れないものがよく出て来ますので、そういう時は部品を取り替えて別のやつで試す、ということになります。

これまでいろいろと取り組む物質を変えて来たのは、なるべく多種類の分子部品を自分の手で扱えるようにしたい、という目的があったわけです。そういう私にとって、開発研究センターでの新しい試みである開発研究課題 (研究系の教授グループと共同で研究する課題) は実に好都合なものです。現在錯体化学実験施設の田中晃二先生と共同でルテニウム錯体の化学に取り組んでおり、そう遠くない将来に共同研究ならではの成果が出せるものと期待しています。田中グループ助手の柘植さんや他のメンバーとの議論はいつも白熱し、実験室で深夜まで話し込むこともしばしばです。

---

現在グループには京大からの受託院生の学生さんが2人います。この文章が皆様のお目に触れる頃には助手の人も着任している予定です。大学などくらべれば決して大きなグループではありませんが、分子研独特のオープンで飾らない気風を生かして、所内所外の多くの研究者と生きのいい議論を重ねながら独自性の強い研究を作り上げていきたいと考えています。どうぞよろしくお願いします。



## 分子クラスター研究部門 (三好グループ)

分子研 三 好 永 作

平成10年4月より2年間の予定で分子クラスター部門に在籍中の本グループの構成は、私とT. K. Ghosh (IMS Fellow), 墨智成 (D3, 九大) の3名である。これまでの私たちのグループの研究テーマは、原子や分子の電子状態の理論計算、表面電子状態や固体中の不純物単位をクラスターモデル計算で調べることである。特に、モデル内殻ポテンシャル法を典型元素、遷移金属、ランタノイド元素などに対して開発し、それらの応用として様々な系に対する計算を行なってきた。今回、分子クラスター部門に流動として在籍し、近くに、芳香族分子の多量体カチオンやファン・デル・ワールス分子についての分光学的実験をされている優れた研究グループがあるので、これらの分子クラスターの計算も視野にいれて研究を行なっていきたいと思っている。以下に本グループの主なテーマを紹介する。

### 1. 高精度のモデル内殻ポテンシャルの開発

全電子を対象とする *ab initio* MO 計算では内殻電子をもあらわに考慮して計算を行なうが、しかし、これらの電子は化学的に不活性で普通の化学反応中にはほとんど変化しない。これらの内殻電子の取り扱いを簡単化するために有効内殻ポテンシャル法があるが、私たちのモデル内殻ポテンシャル法もその1つである。すべての元素に対して高精度のモデル内殻ポテンシャルを酒井グループ (九大) とともに開発している。多くの有効内殻ポテンシャル法では、取り扱う原子価軌道は本来持つべき節を持たず、このことが電子反発積分を大きめに見積るなどの欠点の原因となる。しかし、私たちの方法では、内殻軌道空間に対するシフト演算子を用いることで原子価軌道は節を持つことができる。そのため高次の電子相関エネルギーまでを必要とするファン・デル・ワールス分子のポテンシャル曲面の計算などで高精度の結果を得るものと期待される。また、原子の相対論的 (または非相対論的) Hartree-Fock 解を再現するようにモデルポテンシャルを決めるために、全電子計算に比較して少ない労力で高精度のものが得られ、また、相対論的效果を容易に取り入れることが出来る。

### 2. ファン・デル・ワールス分子のポテンシャル曲面

ArI<sub>2</sub>, HgN<sub>2</sub>, ArHCN, ArHF などの基底状態や励起状態のポテンシャル曲面を精度良く求めることは、現在でも難しいことのひとつである。一つには重原子を含む系では相対論効果を取り入れな

ければならないし、また、電子相関を十分に取り込むために一電子軌道空間や全電子関数空間の取り方に気を配る必要があるからである。相対論的なモデル内殻ポテンシャルを使い、電子相関を記述するために適した軌道を用いて多参照配置からの多電子励起の効果を含めた計算を行なうことで、これらのファン・デル・ワールス分子のポテンシャル曲面を計算している。なお、ArHCNについては、分子クラスター部門田中グループが精度の良い実験を行っており、比較しながら研究を進めている。また、木村克美先生のグループがアントラセンとアルゴンでつくる様々なファン・デル・ワールス分子のイオン化エネルギーの正確な測定を行っており、これらについての計算も計画している。

### 3. 芳香族分子 2 量体カチオンの電子状態

電子構造研究系西グループはベンゼン 2 量体カチオンの安定構造に関して精力的な実験的研究を行ない、サンドウィッチ型構造であることを示唆し、観測された  $\pi$ - $\pi^*$  状態の分裂はこの対称性の破れに起因すると考えた。しかしその理論的裏付けがなかった。われわれは、ベンゼン 2 量体カチオンの様々な構造に対して *ab initio* 計算を行ない、サンドウィッチ型構造が最も安定な構造であることを示した。西グループは、ベンゼン 2 量体カチオンの他にもフェノール 2 量体カチオンやベンゼンとフェノールの混合 2 量体カチオンさらにはベンゼンとナフタレンの混合 2 量体カチオンなどの振動状態や電子状態に対する実験を行っており、これらの 2 量体カチオンの最安定構造と低い励起状態に対する *ab initio* 計算を行ない実験で得られたデータと比較しながら研究を行なう予定である。

### 4. 液体水銀に対する分子動力学計算

水銀は融点が極めて低く常温で液体であり、極めて特異的な金属である。一方、水銀の 2 原子分子は希ガスの 2 原子分子と同様に結合エネルギーの極めて小さい、ファン・デル・ワールス分子である。精度の高い分子軌道計算による、水銀の 2 原子分子に対するポテンシャル曲線を使って分子動力学計算を行なった。この計算で液体金属特有の集団運動をシミュレート出来ることを示した。希ガスなどレナード・ジョーンズ型のものとは異なり、水銀原子間には遠くまで引力が働き、このことが液体金属特有の集団運動を可能にしている。さらに種々の熱力学量の計算を行なっている。

### 5. その他

表面電子状態や固体中の不純物準位のクラスターモデル計算や金属錯体の電子状態にも興味を持ち研究を行なっている。

## 錯体合成研究部門（西田グループ）

分子研 西 田 雄 三

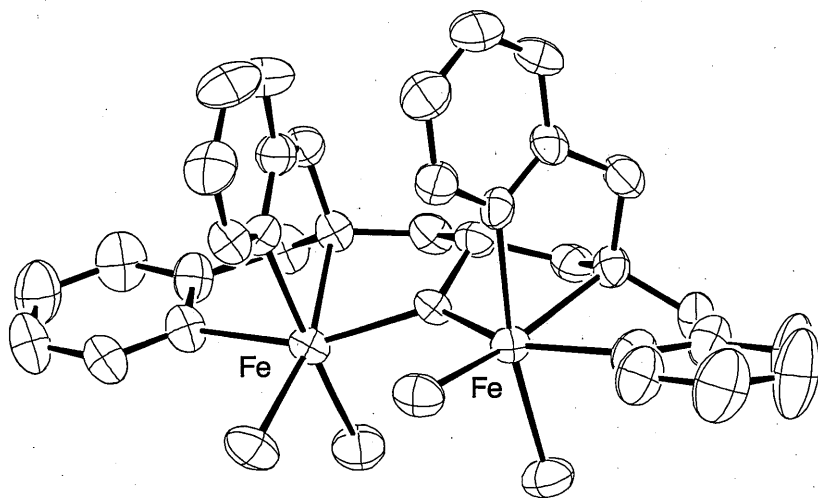
酸素分子は地球上に住んでいる生命体にとって非常に重要な化合物である。我々は運動をするときにエネルギーを必要とするが、それは酸素分子の還元反応を利用して得られる。我々の体内の多くの反応で酸素分子が要求されている。例えば、食物は胃のなかでアミノ酸に分解されるが、それらは酸素分子との反応をとうして代謝され、生体に必要な化合物へと変換される。一方、現在社会においてはいわゆる有害な化合物が体内に取り込まれることが頻繁に起きる。このような毒物の代謝にも酸素分子が活躍する。上で述べたことは生命体にとって都合の良いことであるが、いつもはこのようにはならない。良く知られているように、ベンズピレンは強烈な発ガン剤であるが、それ自身が発ガン性をもつのでなくて、体内の酸素分子による代謝作用の結果生成する化合物が発ガン性を持っているのである。最近のいわゆる神経性疾患、アルツハイマー、パーキンソン氏病、狂牛病なども、いわゆる酸素分子が関連する病気であることが明らかにされている。このように化学的な見地からも、医学的な観点からも、酸素分子の挙動を新しい観点から見直す必要性が高じてきているが、その基礎的な研究は非常に遅れているのが現状である。

一般的に言って酸素分子が生体反応に関連している有機物と直接的に反応することは非常に稀である。そこには遷移金属（例えば、鉄イオンや銅イオンなど）の関与が必要で、それがあってはじめて反応が進行する。では、このとき金属イオンはどんな作用を行うのであろうか。ここが現在でももっとも曖昧にされている点である。もともと酸素分子の反応を統一的に説明する考えがあるのか、あることが本当なのか、そんなものは存在しないのか。これは現在でも解っていない。ただ、従来の反応機構では、説明できない事実が多く有ることだけははっきりしている。新しい機構の提案はそれだけに、統一的に成らざるを得ないが、もうひとつ、これまでにない哲学の出現を必要とするだろう。

酸素分子が有機物と反応して酸素原子が有機物に取り込まれる反応において、これまでの研究では、金属イオンと酸素分子との反応でいわゆる活性酸素種が生成し、それが有機物と反応すると考えられ、活性酸素種の生成機構、およびその同定に力が注がれてきていた。私はこの考えを捨て、活性酸素種の形成にいわゆる基質（有機物と考えてよい）が、重要な関与をしていると考えると多くの実験事実が矛盾無く説明され、かつ理論的にみてより合理的と思われる新しい提案

を行ってきた。もちろん、これを実験的に証明するにはかなりの難しさを伴っていることを自覚している。今回の分子科学研究所への流動に際しては、この新提案と関連するより多くの実験を行いたいと思っている。

酸素分子の反応性を取り扱うこの分野は、最近では環境と密接に関連していることが指摘されている。ご承知のように、タンカーが海で座礁して、オイルが海岸に流れ、生態系に悪い影響を与える事がしばしば生じ、由々しき事態がおきている。現在、このオイルの除去にバクテリアが使用されている。何故か解らないが、バクテリアは、有機物を分解する酵素を持っていることが多い。メタンガスをメタノールに変化する酵素を持つメタンモノオキシゲナーゼは、このほかにトリクロロエチレンを分解をするので、地下水の浄化に役だっている。さて、オイルであるが、最近の研究からバクテリアの持つ酵素は、長鎖アルカン類（オイルの本体）を、酸素分子の活性化にともなってそれをhydroperoxideに変換し、それがまた分解していくことが明らかにされた。実は、我々が合成してきた二核鉄(III)錯体（下図、参照）も、過酸化水素の存在下でこの作用を行うことが明らかになった。将来の利用に関してはいまのところ、めどはないが、我々の研究成果はいずれ、人類に役立つことを夢見て、学生と新しい機能性錯体の合成を行っている毎日です。



二核鉄(III)錯体  $\text{Fe}_2(\text{HPTP})\text{Cl}_4^+$  の結晶構造

## 総研大・葉山キャンパスに移って

総合研究大学院大学先導科学研究科 光科学専攻

松 本 吉 泰

昨年度、分子研から総研大の教育研究交流センターへ、そして、今年度から先導科学研究科光科学専攻へ移ったものの、まだ、岡崎と葉山を毎週往復する日々を送っている。よくたいへんだねと言われるが（確かにたいへんなのだが）一週間で二週間分の生活をしているようで意外と楽しく感じる時もある。葉山キャンパスではようやく先導研研究棟の工事も本格化し、建設の槌音を聞くにつれていよいよ専攻のスタートを実感する今日この頃である。分子研レターズに寄稿することになって、改めて手元にあったバックナンバーを見てみると総研大関連では毎号入学者と修了者に関するリストは載っているが、それ以外にほとんど総研大関連の話題が載っていないのに気がついた。この一年あまり葉山の本部と分子研を等距離で見ていて感じたことなどここに書いてみたい。

葉山に移って最も強く思ったことは、今更ながら総研大にはなぜ総合という名が冠せられているのか、ということである。総合という名を冠すると何となく格好がつくと感じるのか、世間ではこの言葉が乱用され気味でもある。大学の要覧には、大学共同利用機関の間の緊密な連係・協力のもとに教育研究を行ない、新しい学問分野を開拓するとともに、それぞれの専門分野において学術研究の新しい流れに先導的に対応することができる幅広い視野を持つ、創造性豊かな研究者を養成することを目的とする、というような大学設置の趣旨が書かれている。たいへんもっともな気がするが、なぜ、このようなことを総研大はうたっているのか、またこれと総合という意味はどのように関わるのだろうか。以下は、私見である。

一つの学問分野の流れを考えてみよう。学問分野の進展にはいろんなフェーズがあるとよく言われている。まず、新たな分野を開拓するパイオニアがあらわれる。その分野の誕生である。次に、これをより深く広く系統的に研究していく一群の研究者が続く。問題点は明確化され、新規参入者や投入される資金も増大し、分野はよりリッチになる。分野の成長期である。次に、問題は細分化され、研究はより精緻になる。分野の成熟期である。そして、遂に大きな問題点はあらかた解決され（あるいは、そのように感じられ）る時点に至る。残されたのは類題を解いていくようなフェーズに至る。この時点になってその分野の研究者の間には閉塞感が蔓延し、新しい研

究者の参入者も減り、活きのいい学生も育たなくなり、その分野は退嬰化する。分野の衰退期である。この分野の研究者の内、異分野に関して無関心である研究者は、この分野と心中することになる。

私は分子科学全体が衰退期に入っているとは決して思わないが、この分野の研究者の間にまったく閉塞感が無いとはいえないと思う。先日分子科学を考えるための研究会が開催されたのもこの感覚と無関係ではないだろう。この閉塞感を破り、新たな分野を切り開くのは最終的には個々の研究者の能力に帰する。しかし、そのような研究者が自発的に育つのを待つしかないのだろうか。

今までの科学の発展には異分野への参入、あるいは、異分野との交流が歴史的に重要な役割を果たしたという意味で、一つの分野だけに閉じこもらないということの重要性が経験的にわかっている。総合という言葉の中によく異分野交流の意味合いが込められるのはこのためだと思う。異分野交流はもちろん一つの方策なのだろうが、総合化への教育とはつまるところ、このような閉塞感のある状況の中でも自分の道をたくましく切り開くことのできる若い人を育てるという意志表示の代名詞なのではないかと私は思う。もしそうなら、このような教育を異分野に無関心な教官ができるはずはない。すなわち、総合化への教育というのは、学生のためだけのものではなく、教官側、研究者自身の革新をも含むことであり、結局新分野開拓の実践ということに行きつくのではないか。

こう考える時、総研大に属している教官はどれほどこのような自覚を持って学生に対処しているだろうか、研究のための単なる労働力として学生を見ていないだろうか、また、このような取り組みを行うに足る十分な体制と機能を大学は持っているだろうか、などといろんな疑問が湧いてくる。

分子研の2専攻が学生の獲得、教育を熱心に行っていること、所として新しい分野を開拓しようと模索していることを私は十分承知している。しかし、総研大としての活動、総合化教育のあり方などについて所から建設的な意見があまり出てこないのも事実のように思える。今までの分子研になかった分野の研究者を採用することも所の新しい方向性を見出す一つの方法かもしれないが、新しい分野を開拓する方法にはいろいろあろう。少し遊び心も交えて現在いる教官の研究活動の中に総研大の機構を活かすことにより新たな方向を模索することを試みてもいいのではないだろうか。

分子研の教官は流動性が高く、開学後に総研大の併任教官となった人がほとんどである。着任した教官は自分の研究室を立上げ、一刻も早く成果をあげることに忙しい。私もそうだった。総

合研究の意味など考えたこともなく併任教官として学生に対処している方も多いかもしれない。創立10周年を迎え、大学では点検評価の真っ最中である。今こそもう一度これらの点を考え、教官の間で議論をし、分子研の総研大への関わり方を考えるよい機会であると思う。

最後に、先導研光科学専攻の立上げに際して、全面的なバックアップをしていただいた伊藤所長をはじめ分子研関係者にこの紙面を借りて深く感謝の意を表したい。

## Loius Pasteur 大学 Sauvage 研究室での留学報告

総合研究大学院大学 構造分子科学専攻  
D2 衣 袋 文 明

Bonjour! 晴れたあがった日には真っ青に澄んだ空がたいへん気持ちよく、時々、町のシンボルとなっているカテドラル（大聖堂）を眺めながら研究に取り組んでおります。（あまり外ばかり見ているとホームシックかと心配されそうですが）

私は今、フランス、アルザス地方のストラスブール（Strasbourg）という町にいます。すぐ近く（歩いて30分ぐらい）をドイツとの国境にあたるライン川が流れています。そんな位置関係と過去にドイツ領でもあったため、同じフランスでもバリとはまた違った独特の雰囲気を見ることが出来ます。

そんな町の中にあるルイ・パスツール大学の Jean-Pierre Sauvage 教授の研究室へ、6月始めから11月一杯までの予定で、留学させていただいています。こちらに着いた始めの頃は書類による様々な手続きやアパート探しなどで何かと面倒をかけてしまいましたが、研究室の皆様から親切な対応をいただいております、非常に感謝しております。

Sauvage 研では、幾つかの遷移金属に付いて研究が行われておりますが、とくに Cu(I) 錯体を用いた合成戦略に基づいて様々な特徴的な構造を持つ化合物を合成し、さらにその化合物の物性に注目して研究が進められております。その中で私が所属する研究室（錯体実験施設・藤田研究室）とは、カテナン合成を行っていることが共通点となっており、双方の合成戦略上の利点を足し合わせることで様々なカテナン合成を戦略的かつ簡便に行うことが可能となります。（カテナンは、環状の化合物が知恵の輪のようにつながった化合物のことです。）

---

私のこの留学の目的は、新しい合成戦略によってカテナンを合成すること、そして合成したカテナン化合物の持つ物理的性質を調べることにあります。

Sauvage 先生はじっくりと丁寧にディスカッションをして下さります。研究をこちらで始める際にも研究の狙い等をこまめに話していただきました。また分からないことが出てくると非常に詳しく説明してもらえます。また実験に対する適確なアドバイスを頂くことが出来るので、実験結果を持ってこまめにお部屋へ足を運ぶ様にしております。

研究室の方々も、非常によい方達ばかりで実験のしやすい雰囲気があります。それは毎日のお茶の時間のみんなの楽しそうなおしゃべりによく表れていると思います。(これを聞いているとフランス語が分かったらなあと思います。)

おかげ様で実験も順調に進んでおります。残りの期間を、ストラルブールでの生活を満喫しつつ、実験も最大限の成果が得られるように頑張りたいと思います。

最後ではありますが今回の留学に関して、いろいろとお世話頂いた方々に感謝いたします。



## 第8回分子科学研究所オープンハウス

1998年5月16日(土)、第8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り、各教官が自分の研究内容を外部の人に分かりやすく説明する数少ない行事のひとつである。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、博士後期課程の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分子研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、日本物理学会、及び日本生物物理学会の学会誌に広告を掲載させていただくとともに、電子メールで分子科学関連分野の研究室や掲示板に案内を送って、参加者を募集した。その結果、参加者は44名であった。その内訳は、学部学生17人、修士課程大学院生21人、博士課程大学院生2人、大学教員2人、会社員2人であった。参加者の所属・出身大学の内訳は年によってばらつきがあるが、本年は、北から、筑波大学、東京大学、東京工業大学、電気通信大学、東京理科大学、学習院大学、法政大学、東京電機大学、静岡大学、名古屋大学、愛知淑徳大学、三重大学、京都大学、奈良女子大学、神戸大学、及び九州大学であった。旅費や宿泊費を援助しないことを考えると、参加者の熱意が感じられた。

当日は、映画「分子科学」と「ザ・ユニバース」を上映ののち、伊藤光男所長には分子科学研究所の説明を、田中晃二教授には総合研究大学院大学の概要を話していただいた。その後、3時間40分の間、参加者は研究室と研究施設を自由に見学した。最後に所員と所内の総合研究大学院大学の学生達を交えて、大変賑やかな懇親会を行って終了した。

本年も実り多いオープンハウスを無事終えることができた。所内の皆さん及び各大学の方々の御協力・御理解に感謝したい。

(岡本祐幸 記)

# 電子会報「分子科学速報」について

分子科学研究会・事務局  
分子研 藤 井 正 明

分子科学研究会は電子メールによる情報誌「分子科学速報」を発行致しました。昨年9月の発足以来、研究会や人事情報を25報の速報として配信し（11月13日現在）、分子科学情報の新たな広報手段としてご利用頂いております。ここでは利用方法を中心に簡単にご紹介いたします。

## 1. 分子科学研究会とは

運営を行っている分子科学研究会は分子研の設立推進母体であり、分子研の学会等連絡会議に推薦枠を有して運営にも深く関わっております。現在の執行部は梶本興重委員長（京大院理）、阿知波洋次（都立大理）、加藤重樹（京大院理）両副委員長であり、前執行部（関一彦委員長、岩田末廣・西信之副委員長）から始まった活動活性化の一環として、会報の電子化を行いました。なお、分子科学研究会については前号（分子研レターズ38号）に前委員長の関一彦先生（名大物質科学センター）が詳しい記事を掲載しておりますのでそちらをご覧ください。

## 2. 分子科学速報の特徴

電子メールによる会報（いわゆるメーリングリスト）は速報性の高い広報手段であり、学術方面だけでなく業者の広告手段としても急速に普及しております。物理化学関係ではCPML（Chemical Physics Mailing List）、YCP（Young Chemical Physicists）が既に活動しており、また赤外ラマン研究会もニュースをメーリングリストとして会員へ広報しております。これら既存のメーリングリストに対し、分子科学研究会の電子メール会報「分子科学速報」は1）会員層が幅広く学長・所長クラスから若手研究者まで含んでいる、2）グループリーダーが多い、3）多数の分子科学者（473名の会員中317名に配信）に広報している事が特徴です。このため講演会や人事公募を効果的に広報する事ができます。

## 3. 分子科学速報を受信するには

分子科学研究会にご入会下さい。bunshi@ims.ac.jpに電子メールを送ると入会案内と記入例付き

---

の名簿書式が自動返信されます。名簿ファイルに記入（上書き）して事務局：m-bunshi@ims.ac.jp に送ると入会申し込み完了です。年会費は今のところ無料です。

#### 4. 記事を投稿するには

掲載希望の記事を事務局（m-bunshi@ims.ac.jp）にお送りください。掲載基準を満たしている物は迅速に配信します。

#### 5. 掲載基準

複数の大学・研究所に広報する種類の情報を掲載しています。例としては、人事公募、研究会やシンポジウムの案内で、特別な事情が無い限り掲載・配信しております。研究室が主催する講演会は他大学からの参加を期待する物をお送りください。

#### 6. その他

情報交換はコミュニティーを成立させる必要条件です。その意味では研究会・人事と言った情報に加えて「情報求む」、「便利な製品、方法」といった内容も掲載して良いのではないかと考えております。メーリングリストに加えてホームページを立ち上げる計画もありますので、分子科学の新しい情報交換チャンネルとしてお役に立てば幸いです。

#### [謝辞]

サーバーは岩田末廣先生のご厚意で研究室のワークステーションに間借りさせて頂いております。さらに岩田研鈴木賢剛君に電子メール設定、また、名簿入力を岩田先生の秘書・川口律子さんに、未着メールの追跡管理は吉田圭吾君にお願いしております。ここに感謝申し上げます。

## 岩村 秀 名誉教授に藤原賞

平成10年6月に第39回藤原賞が岩村秀・分子科学研究所名誉教授に授与された。受賞対象となった業績は、岩村先生が分子科学研究所・関連領域研究系教授時代に研究をスタートされた「有機フリーラジカルの集積組織化による分子性磁性体の構築の研究」である。この賞は理学、医学、工学、農学、薬学の分野で優れた開拓的な研究を行った研究者の毎年原則として2名に対して与えられる。岩村先生は分子科学研究所教授時代に“新しい開拓的な研究”として「分子磁性体の構築研究」を始められ、その後の東大―九大での研究を通して、この分野において独創的、先導的な役割を果たしてこられた。以下に先生の受賞対象研究を紹介する。



先生は、まず、フリーラジカルあるいはカルベン（二価炭素）を分子内に2個持つ数多くの $\pi$ 電子系を系統的に研究し、スピン分極の起こり方を体系化した。ついでこの基礎的知見を、1分子内に多数のラジカルを含む化合物に発展させた。すなわち、8個のスピンを平行に揃え九重項を基底状態とするテトラカルベンの合成と磁化・磁化率の測定・解析を行い、有機炭化水素分子が常磁性金属イオンを遙かに凌駕する大きな磁気モーメントを持ち得ることを初めて立証した。現在18個のスピンを平行に揃えた十九重項ノナカルベンが得られており、均一高スピン有機分子として最高のスピン多重度の記録となっている。また10種に及ぶ空气中室温で安定な四重項トリニトロキシドラジカルを合成し、ヘテロ原子を含むポリラジカルにおいても強い交換相互作用によって分子内でスピンを整列させることに成功した。

上記のポリラジカル、ポリカルベンは、磁気モーメントが大きな常磁性体であるに止まっていた。自発磁化をもつ磁石とするのに適したBethe格子型または網目状のつながりをもつポリラジカルの構築を試みたが、有機合成、高分子合成の手法では限界があることにいち早く気づき、先生は、ポリニトロキシドラジカルを架橋配位子として用い、磁性金属イオンを介して自己組織化を行わせる戦略を確立し、2次元・3次元にわたってスピンを揃えたメゾないしマクロスコピック

な分子構造体を多数結晶として得ることに成功した。こうして得られた三次元錯体の中には、フリーラジカルの2p スピンが関与した安定磁性体の中で、今日磁気相転移温度の最も高い46 Kをもつものがある。さらに、ジ(4-ピリジル)ジアゾメタンなどのカルベン前駆体をマンガン(II)、銅(II)イオンと錯形成させることにより錯体高分子の合成を行った。これらは、希薄常磁性体にすぎないが、光照射により三重項カルベンを生成させることにより、それぞれを鎖状フェリ磁性体またはフェロ磁性体へ変換させることに成功した。

以上のように、先生は磁性という有機化合物に付与する物性として最も難しいと考えられていた領域に挑戦し、その実現を可能とした。この独創的な業績は国内外に高く評価されている。

(井上克也 記)

## 猿倉信彦助教授にレーザー学会レーザー研究論文賞

平成10年度レーザー学会レーザー研究論文賞が分子制御レーザー開発研究センターの猿倉信彦助教授と昭和オプトロニクス(株)の伊沢博士らに授与された。受賞題名は「波長可変レーザー用広帯域・低損失ミラー」である。受賞者らは独自に開発した広帯域・低損失新型ミラーを用いることによって、ミラー交換なしでCWチタンサファイアレーザーの全波長チューニングを達成した。従来の波長可変CWチタンサファイアレーザーでは、高性能(広帯域・低損失)な共振器ミラーが実現されていなかったためにチタンサファイア結晶の発振可能な全波長領域(650-1100 nm)を可変にするためには、3~4組もの共振器ミラーを交換する必要があり、利用者側にとって実用上大きな負担であった。受賞者らは新型ミラーに成膜プロセス全体(電子ビーム蒸着)の最適化を図るとともに膜内部での電界強度を抑制した新しい膜設計を採用した。この結果、680-1060 nmの波長域で99.85%~99.95%の高反射効率が得られている。この新型ミラー組を用いたチタンサファイアレーザーから663-1095 nmの波長可変幅が得られた。この開発によって、波長可変レーザーシステムは実用上もっと便利になっている。

(大竹秀幸 記)

---

## 総研大生 劉 振林君にレーザー学会優秀論文発表賞

平成10年度レーザー学会優秀論文発表賞が分子制御レーザー開発研究センター猿倉研究室の総研大生劉振林君に授与された。受賞題名は「All solid state tunable ultraviolet picosecond Ce:LuLiF<sub>4</sub> laser」である。この研究により、従来エキシマレーザーでのみ励起可能であったCe:LuLiF<sub>4</sub>もNd:YAGレーザーの第5高調波で励起することが可能となり、紫外波長可変のピコ秒パルス発生が実現されたことにより、紫外レーザー光源の簡便化・小型化が現実のものとなった。レーザー学会では、レーザー科学の発展に貢献しうる優秀な一般講演を行った若手会員に対し「優秀論文発表賞」を授与している。

(猿倉信彦 記)

## 分子研での4年間

鹿児島大学理学部 神 長 暁 子

「分子研!? あんなところに行って大丈夫か!？」

分子研に採用が決まったと報告しに行った時、ある先生に、こう言われました。「あそこ、夜中に叫び声とか聞こえるぞ。」

かくして、不安な気持ちを抱きつつ、私は分子研に赴任したのです。外国人の研究者も多く、初めてコピーを取りに行き、コピー機の表示までが英語だった時には、本当にこんなところでやっていけるのだろうかと思暗い気持ちになりました。実は、もう1台のコピー機は日本語表示だったのですが。さすがに叫び声を聞くことはありませんでしたが、夜中に実験棟の階段の上の方から口笛が聞こえてきた時は怖かったです。しかし、そのうちにすっかりなじんでしまい、休日も研究所にいて、「下宿、要らないんじゃない？」と冗談を言われたこともありました。

4年を振り返ると思い出は尽きないのですが、何よりも、分子研という非常に恵まれた環境で実験三昧(?)の研究生生活を送れたことが、私にとっては貴重な経験でした。アクティビティーの高い研究者と、優秀なスタッフが揃う研究所の雰囲気、強く刺激されたように思います。赴任当初は振動反応も知らず、ハンダ付けも出来なかった私ですが、花崎先生をはじめ、グループの方々の丁寧なご指導のもと、ようやく学位論文をまとめるところまで漕ぎつけ、「出所」することができました。旧装置開発、機器センター、化学試料室の方々にも、色々と助けていただきました。そして、電子構造の方々、秘書の方々、都築さん、杉山さんをはじめとする受付の方々には、公私にわたり、お世話になりました。この場を借りてお礼を申し上げたいと思います。本当に有難うございました。

## 分子研の四季

東京大学大学院総合文化研究科 小 倉 尚 志

正門の桜は、いつも岡崎で一番早く咲いた。早くてしかも立派な桜だった。研究棟裏手から計算機センターと図書館裏への小道には大きな桜が咲いた。そこで花見をしたこともある。桜の頃になると毎年、二度三度と城へ出かけた。夜桜見物はまだまだ寒いことの方が多かった。

初夏の東公園の菖蒲園は見事だった。自生するホタルが見られるのも岡崎ならではの。小豆坂近くの池ではテナガエビが繁殖していた。真夏、少し早起きして日の出前後、竜美ヶ丘公園の池のスイレンの開花を見る。わずかな涼しい時間。

秋には額田の梁に何度か出かけた。分子研の池のほとりで月見をしたのもいい思い出。秋が深まると東公園の池のまわりの紅葉がきれい。研究棟と南実験棟のあいだに鮮やかに紅葉する木があり、渡り廊下を渡りながら毎年楽しみだった。

冬になると空気が澄んで遠くまで見通せる日がふえる。遠く、中央アルプス、恵那山、木曽御嶽山が雪を戴いているのが見られる。鈴鹿の山まで見えることは稀だった。名古屋を越えて見ることになるからか。豊田の北方に猿投山（さなげやま）という山が見える。猿がつく山名は珍しい。

八丁味噌は好物だ。味噌汁はもちろん、味噌煮込みうどんやモツ煮込みにも最適だ。ほかの種類の味噌とちがって八丁味噌だけはさっと溶いてよし、煮込んでまたよしだ。ひらたい盃にぬった味噌を網で焼くとかはんのおかずによし、清酒によし。焼き味噌は戦国以来の携行食だ。生の味噌を握り飯の中に入れるのもいい。

このようなすぐれた環境に恵まれ、分子研の方々、特に北川禎三先生のお世話になって分子研での研究生生活を楽しむことができました。ありがとうございました。



---

# My Recollections about Okazaki

University of Florida    Ulrich Hans Ewald Hansmann

I spent almost two years at the Institute for Molecular Sciences (IMS), Okazaki, Japan, working as a "Joshu." I collaborated with Prof. Okamoto in the area of protein folding. My time at IMS was very fruitful. Over the tenure of my stay I wrote 12 refereed papers, a review and various proceeding contributions. IMS allows for intense research and I have to give due tribute to the excellent computing facilities and efficient library. No library is absolutely complete, but in IMS the broad selection on site is complemented by rapid delivery of necessary books and magazines via interlibrary exchange. Both the library and the computing facilities were a major factor that the collaboration with Prof. Okamoto proved to be that fruitful. Another important factor was the continuous flow of well-known scientists who visit IMS for shorter or longer time.

I am indebted to many of them for pleasant and valuable discussions. On personal front, I have enjoyed this visit to IMS. The atmosphere at IMS was always very friendly and a chat while taking coffee in the lounge of IMS was always very refreshing. I remember many such coffee sessions in days as well as evenings. There have been very informal parties inside IMS, too, where I learned much about people and life in Japan in general. Language was never a problem at IMS. It is truly an international place with people from all over the world coming here for research.

My visit to IMS also helped me to be exposed to the life at Japan. Living with my fellow workers in one of the institute apartments was certainly an experience. What I enjoyed very much was Okazaki fireworks in the beginning of August. In this context, I should mention Okazaki International Association which organized a good many pleasant parties helping me to have a good time. Then there was the beauty of nature to be appreciated during the cherry blossom which was deeply moving. And the coloring of the leaves in the mountains around Okazaki in fall. Or the bright winter skies. (My memories of the summer heat and rainy season are less fond).

Concluding I can say that I have very good recollections about Japan as a whole and IMS in particular. I am especially grateful for the friends I have met here. Thanks to all of them.

## The Changes in IMS

Sun, Xin (孫 鑫)

It was my great pleasure to visit the Institute for Molecular Science (IMS) once again in July of 1997. Seven years have passed since I visited IMS last time. So when I arrived at Okazaki, I had a strong curiosity to see what changes had taken place in IMS within these years. It was not very long before I found two distinct changes:

I. " Okazaki Conference Center " is erected before the Mishima Lodge, where is my living place. Last time when I lived in Mishima lodge, that place was a playing field. Now a magnificent building stands up there. Inside the building, there are bright entry hall, various kinds of conference rooms, lounge and exhibition corridors with advanced equipment, which make the conference center possess complete functions. The schedule arranged in this conference center is full with various conferences, symposiums, workshops and seminars in different fields. The academic activities in the conference center make the Okazaki National Research Institutes become a scientific research center not only in Japan but also over the world.

II. Many more young scientists are working in IMS. It shows that a new generation of scientists are growing up. Seven years ago, in the south laboratory building, some rooms were empty. Now the space in this building is very tight. Some new research groups have been built up, and more young professors, research assistants, postdoctors came to IMS. Also the University of Advanced Studies accepted more Ph.D. students studying here. It makes IMS much younger. I thought this change is even more significant than the first one. The building and equipment are some sort of hard ware, more important is the intelligence. IMS is ready to march to the 21 Century, the young scientists will provide new ideas and develop new fields to meet the challenge of the new century.

My host, Professor Kenji Yonemitsu, is a young physicist. He is working hard with several young assistant and postdoctors in the field of strong correlated electron systems, which is a frontier in the condensed matter physics today. So his group is a young group. During my visit in IMS, I cooperated with him and his colleagues to study " the electron correlation and physical properties of polymer and organic molecules",

---

especially the photoinduced phenomena in organic materials.

Although our background is physics, the research programs are closely related with the chemistry. In recent years, there emerged many new materials. In order to understand their properties and explore their application potentials, physics or chemistry alone could hardly accomplish the whole task. The goal can be reached only by the joint efforts of chemists, physicists and material scientists. This interdisciplinary field needs close collaborations of scientists in different fields. One prominent feature in IMS is the spirited collaborations between the chemists and physicists, the experimentalists and theoreticians, Japanese and foreign scientists. Particularly I am deeply impressed by that all the people in IMS are always enthusiastic to offer thoughtful help to the foreign scientists. It is their constant help that make our research cooperation fruitful and my living in Okazaki enjoyable. Here, I would take this chance to express my heartfelt gratitude to all colleagues in IMS. I am sure we can meet again, especially, you are most welcome to visit Fudan University in Shanghai. When you have the time to go to China, please contact me in following address:

Department of Physics

Fudan University

Shanghai 200433, China

Tel: 86-21-65641718; Fax: 86-21-65104949; email: xinsun@fudan.ac.cn

The IMS is continuously changing, I am sure that, two years later, when the 21 Century comes, the IMS will become greater.

---

## My stay in IMS

Institute for Physical Research  
Armenian National Academy of Sciences, Ashtarak, Armenia  
Mkhitar Simonyan

I am visiting for one year the IMS. This is my second visit to this all over the world famous Institute which has carried very interesting fundamental research in various area on the front lines of Physics and Physical Chemistry. First time I was in IMS between January 13th and September 13th 1996. Taking this opportunity I am deeply indebted to Prof. Kyuya Yakushi for considering me to work in his very fine and friendly working group where I am integrated with the people quickly. Many thanks to all of them. Thank, also, to Bunshiken Letters for opportunity to express my feeling to its sensible readers.

My work in IMS gives me possibility to work with modern experimental facilities, devices, chance to realize new research ideas and enlarge my understandings in science through the interactions with my host professor and my colleagues here. Liked also very much, the libraries of the Research centre, where one can know latest news and find everything, if he knows what he needs and how to search. It is a my pleasure to see, that all the main Soviet physical magazines are available in the library. The scientific life is really tensed in IMS. One must be careful for not to miss a seminar which are usually done by famous guests, who are very often here.

Here in Okazaki I find myself surrounded with kind, polite and tactful temper of Japanese and many interactions give me some impressions not only about scientific life in IMS but also about the life of a foreigner in Japan in general. I came to know many interesting things about science and about Japan through different activities of Okazaki International Association and Japan-Eurasia Association. Their fruitful efforts make the lifestyle of a foreigner in Okazaki unforgettable comfortable, even quite unfamiliar food became very tasty and desired. In this time my wife and two children accompanied me, and I am strongly sure that my children will have very much to learn Japanese customs, traditions, lifestyle and may be language for their future life. And speaking in generally I should emphasise that IMS made great efforts for providing the excellent conditions for scientific activity of foreigners. As a results, there are not difficulties for scientist from former Soviet Union, in spite of fact that behaviour of people and organisation of scientific work here

---

are sharply differ from that in former Soviet Union.

In conclusion, I should note that in IMS there are many opportunities for increasing scientific activity of foreigner which are not used yet. Main problem it is language barrier, which makes a difficult to use all the advantage in full scale and there are a lot of things which usually doesn't come down to the language barrier. It will be extremely helpful if some user guide of common using experimental facilities will be in English. It will be helpful, also, if seminars will be announced in English independently who is a speaker and what language will held in the seminar.

Finally, I am truly wish to all personal of IMS more enthusiasm for research, which seems to be a little less than was two years ago. IMS is a very famous research Institute and I strongly hope that IMS should continue go ahead of science.

## 基礎光化学研究部門

(所属：極端紫外光研究部門)

### Pettersson, Lars G. M. 助教授

まず Lars Pettersson というお名前ですが、同姓同名の人がスウェーデンには大勢いるので、L. G. M. Pettersson (tt, ss とダブルところにも注意) と名乗ることが必須とのことです。さて、Pettersson さんはストックホルム大学物理学教室で10年近く講師をされていますが、出身はストックホルム大学で、アメリカで2年間ポスドク生活を送った以外はずっとストックホルム大学で研究を続けておられます。ご家族一緒に来られると聞いていましたが、まだ、来る気配がありません。ご夫人はイタリア人で1歳と6歳のお子さんがいて、日本に呼び寄せるべく、日々努力しているようですが、今、ご家族はストックホルムから離れてイタリアで暮らしているとのこと。ご夫人も研究者でアメリカにポスドクで行くかも知れず、その場合は自分が二人の子供の面倒を見ることになると言っていますが、6歳の長男は特にかわいがっておられます。英語は当然として、イタリア語、ドイツ語、フランス語、ロシア語など実に堪能です。分子研に滞在中の外国人達ともいろいろな言葉で話しています。日本は全く初めてなのですが、日本語の上達も早そうです。若い頃、合気道を少し習ったことがあり、また、水球の選手だったとのこと、スポーツ万能の印象もあります。最近、ジョギングを始めています。グルメでもあり、料理作りのためにいろいろな材料を探し回っています。日本にない材料や道具はスウェーデンから持参してきています。日本食は大変気に入っているようです。

専門は量子化学で、Wahlgren 教授や Siegbahn 教授を擁するストックホルム大学物理学教室の伝統か、金属を含んだいろいろな系について幅広く研究しておられます。実験家と絶えず議論しながら研究を進めてきており、現実の大きな系をそのまま扱うように心がけているようです。最近では密度汎関数法に入れ込んでおり、deMon プログラムの開発グループの主要メンバーとしても活躍中です。主な滞在目的は UVSOR で測定した遷移金属錯体の内殻励起などの理論解析ですが、理論系の岩田教授や流動部門の三好教授の研究分野とも重なっている部分がありますので、月に平均一度のセミナーを開いていただき、交流を図っています。客員教官としての滞在期間は1月末までの半年間ですが、さらに研究員として1、2カ月滞在を延ばす予定になっています。

(小杉信博 記)

## 基礎光化学研究部門

### Ågren, Hans A. 教授

Ågrenさんはスウェーデン第5の都市であるリンチェピンの大学の計算物理の看板教授のひとりですが、来所される直前に、ストックホルムの王立工科大学（KTH）に移られることが決まりました。これは来所の予定を立てているときにはなかった話でたまたまなのですが、大学内でもいろいろ引き留め工作があるときにちょうど避難できたと言って、喜んでおられます。出身はE S C A創始者のウプサラ大学Kai Siegbahn教授の研究室で、実験から研究生活を始めましたが、途中から理論家に転向し、ウプサラ大学に職を得た後、2年半ルント大学、フロリダ大学を経て、再びウプサラ大学に戻られ、その後、7年ほど前にリンチェピン大学教授に招へいされ、現在に至っています。その間、ヨーロッパ、アメリカ、カナダ各地で客員研究員を経験されています。

専門は理論化学で、簡単な分子やポリマーを対象として内殻励起の光電子スペクトルや共鳴ラマン過程を説明するためのモデルを提唱したり、量子化学計算を行ったりしています。DALTONプログラムの開発グループの主要メンバーとしても活躍中です。最近、世界の放射光施設では内殻電子領域の共鳴過程の研究に研究者が群がっていますが、データが測定できてでも解釈に困ることが多く、理論家の助けが求められています。Ågrenさんはその中でも一番、引っ張りだこの理論家です。文部省の招へい研究員としての滞在期間は3カ月で、1月末で帰国します。朝は7時頃から研究室でワークステーションを使って研究されており、旧知のPetterssonさんも驚くくらいのハードワーカーです。今、自動車を借りる話を進めていますので、毎週末、ご夫人とご一緒に日本の秋と初冬を堪能されることでしょう。Ågrenさんは日本食が大変気に入っておられますが、ご夫人は昨年の短期来日以来、苦手意識が抜けていません。現在、Petterssonさんがお二人をいろいろな日本食に誘って訓練中ですので、帰国されるときには苦手意識も抜けていることでしょう。

(小杉信博 記)

Narymbetov, Bakhyt Zh.

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 学振外国人特別研究員

Graduated in physics in 1987 from Moscow State University, Russia.

Ph.D. (in Solid State Physics) in 1996 (under Prof. V. Sh. Shekhtman), Institute of Solid State Physics in Chernogolovka, Russia.

**Research Interests:** Powder and single crystal X-Ray diffraction, crystal structure analysis, organic conductors and superconductors: structure, physical properties.

At IMS, I am working in Prof. H. Kobayashi's group (JSPS Postdoctoral Fellowship) on the synthesis and study of organic conducting materials.



Bu, Xian-He (卜 顯和)

錯体化学実験施設錯体触媒研究部門 文部省外国人研究員

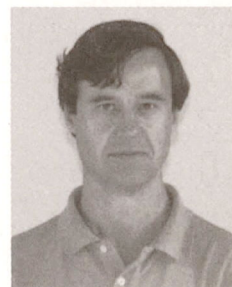
I was born in September 1964, in Liaoning Province, China. I obtained my B. Sc. (in 1986) and Ph. D. (in 1992) on Science from Nankai University (南開大学), Tianjin (天津), China. I also received another Ph. D. (in 1995) on Pharmaceutical Science from Hiroshima University, Japan, under the supervision of Prof. Eiichi Kimura. Before coming to IMS, I have been in Japan three times as a Monbusho (文部省) research graduate (1990-1992) and as a JSPS fellow (in 1995 and 1996) at Prof. Eiichi Kimura's laboratory, Hiroshima University. I was prompted to lecturer at the end of 1992, in the Department of Chemistry, Nankai University, and to Professor at the end of 1995. My research interests cover macrocyclic chemistry, supramolecular chemistry, coordination chemistry and bioinorganic chemistry. I am currently working in the group of Professor Mitsuhiko Shionoya, who has been the co-supervisor and one of my old friend when we were both in Hiroshima University, and here I do research on the design of novel polydentate ligands toward construction of functional self-aggregated polynuclear metal architectures. I will be staying here in Okazaki until October, 1999.



Pettersson, Lars Gunnar Moody

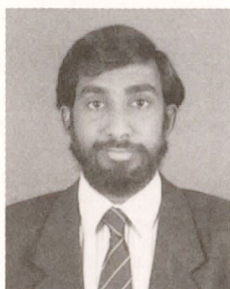
極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 客員助教授

I received my PhD in Theoretical Physics, specializing in Quantum Chemistry, in 1984 from Stockholm University under the supervision of Per Siegbahn. This was followed first by a post-doctoral year under a joint IBM (with Paul Bagus, San Jose, Ca) and Nasa Ames (with Charlie Bauschlicher, Mountain View, Ca) fellowship and then a second year at Nasa Ames before returning to Stockholm





University. My thesis work included both highly accurate dynamical correlation studies of small molecules and approximate effective core potential (ECP) methods for extended systems. My main research interests are presently processes and reactions at interfaces: gas with metal or metal-oxide and mineral with liquid. We have developed techniques to treat large metal clusters using ECP's and have developed embedding techniques for metal-oxide systems. Reconstructions and relaxations are handled using pair-potential or molecular dynamics simulations. In order to relate as closely as possible to experiment we have (with H. Ågren) developed techniques to treat X-ray spectroscopies (NEXAFS, XES, shake etc) both using Hartree-Fock and Density Functional Theory. Applications of these have been the main focus of my work in Prof. Kosugi's group here.



Umapathy, Siva

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 客員教授  
(分子構造研究系分子動力学研究部門 北川グループ)

Prof. Umapathy, graduated from the University of Madras and obtained his Ph.D from University of Otago, Dunedin, New Zew Zealand, in 1986. Subsequently, he was an SERC fellow at the Rutherford Appleton Laboratory, Oxford and the University of York, in England until late 1990. He moved from there to accept the offer of a faculty position at the Inorganic and Physical Chemistry Department of the Indian Institute of Science, Bangalore, India, where he has been ever since. He has an active group at the Institute with considerable financial support from the Government of India, to work on laser spectroscopy. He has received number of honors, which include the award of the 1996 JWT Jones Fellow of the Royal Society of Chemistry, London and the Hollemen Chair Research Professorship, at the ultrafast laser spectroscopy laboratory in the University of Groningen, Netherlands. At present he is a visiting professor in Prof. Kitagawa's group.

His research interest is in understanding the influence of vibrational structures during chemical reactions, with time ranges from milliseconds to few tens of femtoseconds. In particular, he is interested in the applications of time resolved Raman spectroscopy and resonance Raman spectroscopy, to diverse chemical problems such as, isomerisation processes, hydrogen atom abstraction reactions, reactivity of quinones and influence of solvent on electron transfer processes. The resonance Raman approach is used to learn structural dynamics within the electronic dephasing time, generally in few tens of femtosecond for polyatomic molecules and time resolved Raman is used to study processes from few

nanoseconds to milliseconds. In addition, the results are supported by considerable computational effort, based on wavepacket dynamical theory and density functional theory.

### More, Sam Dylan

極端紫外光実験施設 学振外国人特別研究員

**Academic record:** Diploma in Chemistry in 1992 at the Free University of Berlin, Department of Crystallography, PhD in the group of Prof. A. M. Bradshaw at the Fritz-Haber-Institut der Max-Planck Gesellschaft in Berlin in September 1998. Since October 1998 working as a post-doctoral scientist (JSPS fellowship) in the group of Prof. Dr. M. Kamada at the UVSOR department in the Institute for Molecular Science.

**Research Interest:** Interactions of geometric and electronic aspects of surface structure, especially involving adsorption of alkali metals on surfaces, further LEED structure analysis and crystal growth mechanisms also of biologically relevant compounds. My current work in Prof. Kamada's group concerns the study of NEA (negative electron affinity) surfaces with spin-polarized two electron photoemission using laser and synchrotron light sources.

**Hobbies:** Traveling (hiking, outdoors), judo, literature.



### Ågren, Hans Arvid

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 文部省外国人研究員

I was born 1950 in the town of Skelleftea, northern Sweden. I received a PhD in Physics at the University of Uppsala in 1979, under the supervision of Prof. Kai Siegbahn. I have had several university appointments in Sweden since then; full professorships in Computational Physics at Linköping University (1991-1998), and Theoretical Chemistry at the Royal Technical Institute in Stockholm (1998-). From a background in experimental physics my interest turned to theory and simulations. I have made contributions to the development of first principle methods, like analytical response theory methods for calculations of linear and non-linear electromagnetic properties. I have contributed to theory and models for synchrotron radiation physics, in particular with relevance to core electron spectra like X-ray-, Auger- and photoelectron spectra, for not only free molecules but also scattering and solvated states and extended systems such as polymers, surface adsorbates and molecular solutions in collaboration with Prof. Lars Pettersson, and with Prof. Nobuhiro Kosugi here.





## 新任者紹介



うえ すぎ ゆ き  
上 杉 有 紀

分子構造研究系分子動力学研究部門 非常勤研究員

平成10年3月総合研究大学院大学博士課程を修了した後、引き続き北川研究室でIMSフェローとしてお世話になっています。現在、鉄ポルフィリンの光還元の問題に取り組んでいます。釣りが趣味（最近はバスフィッシングですが、海釣りも好き）です。よろしくお願いします。



は や み し ん や  
速 水 真 也

相關領域研究系相關分子科学第一研究部門 非常勤研究員

平成9年九州大学大学院理学研究科博士課程修了後、研究生、分子研特別協力研究員を経て本年5月11日より現職。現在まで動的電子状態を有する金属錯体の合成およびそれらの磁気的性質を研究してきました。これからは井上グループで新規光応答性分子磁石の構築を研究する予定です。趣味は飲み会で暴れることとテニスです。誘って下さい。



おお はら きょう こ  
大 原 恭 子

技術課 事務補佐員

流動部門の界面分子科学で5年間お世話になり、今年5月より技術課に勤務しております。仕事の内容も一変し、また新たな気持ちで毎日臨んでおります。技術課は総勢42名と人数も多く、皆様方のお名前とお顔が一致しなくて、ご迷惑をおかけすることもあるかもしれませんが、どうぞよろしくお願い致します。



もち づ き みず の  
望 月 泉 乃

受付 部門補助員

静岡市育ち、結婚して岡崎市民になりました。5月より、毎日学校に通う気分で楽しくお世話になっております。微々たる進歩を期待してピアノに向かうのも日課の一つです。国立音大ピアノ科卒業の私（科学とは無縁、パソコンも上司も初めて！）が分子研で働くなんて驚くばかり、しかも分からないことだらけですが よろしく願い致します。

さ さ き と き よ  
佐々木 時 代

極端紫外光研究系界面分子科学研究部門 部門補助員

青春時代の2年4カ月を過ごした思い出深い分子研に平成9年より再びお世話になっています。受付嬢(?)、技術課秘書を経て平成10年5月から界面に移りました。部門の秘書は初めての経験なので悪戦苦闘の毎日ですが、周囲の方々に助けて頂いて何とか現在に至っています。今後ご迷惑をおかけすることばかりだと思いますが、どうぞよろしくお願い致します。



なか むら とし かず  
中 村 敏 和

分子集団研究系物性化学研究部門 助教授

大阪府大阪市生まれ。平成4年京都大学大学院理学研究科博士課程修了後、学習院大学理学部助手を経て、平成10年6月に現職に着任しました。有機導体・分子性導体の電子物性を、主にESR・NMRといった磁気共鳴の手法により研究を行っています。分子研では理論・実験・合成の最先端の研究者がおられますので、知識を共有させていただくとともに、わくわくするような研究結果を出していきたいと思っております。よろしくお願いいたします。



セ シ ア ア シ ョ ク  
Sethia, Ashok

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 非常勤研究員

Lecturer in the department of Physics, B. S. A. College of Engg. & Tech., Mathura 281 004 (U.P.), INDIA. On 1st June I joined Prof. Fumio Hirata's group as an IMS fellow. I did my Ph.D. work at Department of Physics, Banaras Hindu University, Varanasi 221005, INDIA under the supervision of Professor Yashwant Singh and have been awarded Ph.D. degree in 1992. During my Ph.D. programme I worked mainly on the behaviour of ELECTRON IN DEFORMABLE MEDIUM. I have used Path-integral method to study the behavior of electron in deformable medium. My current interest is focused on "electron solvation dynamics."

I am gratefully acknowledge IMS for the fellowship granted to me.



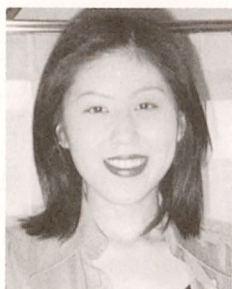




桑原 真人

理論研究系分子基礎理論第四研究部門 非常勤研究員

平成7年3月東邦大学大学院理学研究科博士課程修了、平成7年10月から電子技術総合研究所（科学技術振興事業団・科学技術特別研究員）。7月より非常勤研究員として米満研究室に来ました。電総研では共役高分子の電子状態を数値的手法で取り扱い、ドーピング等で生成されるキャリアの性質を解析してきました。今後は低次元強相関係における励起状態を取り扱っていかうと思います。よろしくお願いします。



桑 美和子

理論研究系 事務補佐員

専門学校を卒業後、いろいろな職業を経まして、この度7月から分子研で働かせていただく事になりました。理論研究系はとてもほのほのした感じで、毎日楽しく働かせていただいております。まだまだ仕事には不慣れで皆様にはいろいろとご迷惑をおかけしますが、一日も早く慣れた確に対応できる様がんばって行きたいと思っています。宜しくお願い致します。



江田 茂

極端紫外光実験施設 助手

福岡県出身。九州大学大学院博士課程修了。大学院で加速器を使った原子核実験を行っていたのが縁でここ3年ほど科学技術庁放射線医学総合研究所のガン治療用高エネルギー重イオン加速器で仕事をしていました。研究テーマは原子核破碎反応で生成したポジトロンエミッターを使ったガン治療ビーム照射の高精度化です。UVSORではこれまでに学んだ加速器の経験を生かしたいと思っています。



杉田 有治

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 助手

新潟県新潟市出身。平成10年3月京都大学大学院博士課程修了。同年4月より理化学研究所細胞情報伝達研究室博士研究員を経て、9月1日より現職。現在は、分子動力学法などの計算機シミュレーションの手法を用いて、蛋白質の動的構造、機能、安定性などの解析を行っています。分子研では幅広く勉強して自分の視野を広げていきたいと考えています。よろしくお願いします。

みや ざき くに まさ  
宮 崎 州 正

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員

平成七年東京工業大学理工学研究科博士課程修了。名古屋大学研究生、物質工学工業技術研究所特別研究員を経て九月より現職。谷村助教授のグループに所属しています。今までは、非平衡熱力学の定式化の問題や、スピンなどの緩和過程の現象論を研究してきました。分子研では、もう少し微視的な方法を使って、溶液などにおける、遅い時間スケールのダイナミクスを研究したいと思っています。

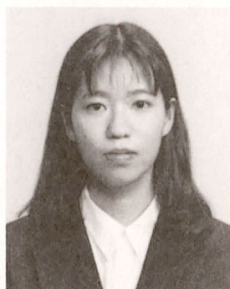


おに たけ なお こ  
鬼 武 尚 子

極端紫外光研究系 部門補助員

ここ分子研に勤務させていただいて何年か経ちました。まだまだ頼りない存在ですが、がんばって成長していきたいと思っています。よろしくお願ひ致します。

趣味は観劇とダンス（ジャズ、タップ）です。



かみ や みち よ  
神 谷 道 代

錯体化学実験施設 部門補助員

錯体でアルバイトとして勤め始めて、2年余りがすぎました。錯体は人数が多いので仕事も何かと多く、あっという間の月日でした。

私がこの機構に関わりをもつようになったのは、8年前にさかのぼるのですが、経理課で募集していた短期アルバイトで採用されたことから始まり、以後、毎年このアルバイトを経て錯体に入りました。先生方はじめ、皆さんやさしいのでとても助かっています。



つる た ゆ み こ  
鶴 田 由美子

技術課 部門補助員

昨年4月中旬からお世話になっています。以前は、12年間金融機関に勤めていました。岡崎出身の私にとって分子研は、近くて遠い存在でした。貴重な体験をさせて頂いている事に感謝しています。ごくまれに意味不明な三河弁を使うことがあるかもしれませんが、大目に見てやってください。どうぞよろしくお願いいたします。





## 平成10年度総合研究大学院大学修了学生及び学位論文名

### 数物科学研究科（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
平 田 聡	Development and application of analytical derivative methods in ab initio crystal orbital theory	理 学	H10. 9.30

### 数物科学研究科（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
丸 山 豊	Gaussian-Markovian quantum Fokker-Planck approach to nonlinear spectroscopy and wavepacket dynamics for a dissipative molecular system	理 学	H10. 9.30

### 数物科学研究科（構造分子科学専攻）〔論文博士〕

氏 名	博 士 論 文 名	付記する専攻分野	授与年月日
城 田 秀 明	Mechanistic Studies on Ultrafast Intermolecular Electron Transfer: Coumarin in Electron Donating Solvent	理 学	H10. 9.30
渡 邊 一 雄	Laser-induced reactions of methane adsorbed on transition metal surfaces	理 学	H10. 9.30

## 総合研究大学院大学平成10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	丁 玉 琴	分子集団研究系	フタロシアニン導体の物性研究
機能分子科学	Hossain, Delwar	電子構造研究系	Crossed Molecular Beam Study on Chemical Reaction Dynamics (交差分子線法による化学反応動力学の研究)

## プログラマブル微小定電流電源

分子研 豊田 朋範

(提案・開発担当者)

前回(1997年7月)の成果報告では、装置の基本構想と一部回路の設計、試作について述べた。今回はその後の経過について以下に報告する。

### 1. 動作試験と改善

前回試作した定電流回路の動作試験を行った結果、時間経過と共に出力電流値の誤差が拡大する傾向が見られた。これは、D/Aコンバータ(以下DAC)の消費電力が300 mWと大きく、このためDAC自身が発熱体となり、出力が温度ドリフトすることが原因であることが分かった。

これを踏まえて、高精度に加えて低消費電力の条件を満たすようにDACを選定し直し、問題を大きく改善した。

新たに選定したDACでは微調整回路が不要であり、DAC自身の発熱低減と併せてこの部分の温度特性の影響が除去されたことが問題改善に繋がったものと推測される。

また、DACの入力デジタル値と出力電圧の関係が理想的な正比例の直線ではなく、それが素子毎に少しずつ異なることが判明した。対策として、ソフトウェアで補正関数を定義して出力の補正を行うことにした。

8チャンネル分の出力回路と周辺回路を1枚の基板に収め(図1)、NIMモジュールに1台のユニットを構成した(図2)。このユニットをカスケード接続することで最大128台分チャンネル数を増やすことができる。ホストと接続したユニットの番号を自動認識する実験を行い、正常動作を確認した(図3)。

先の定電流回路の改善と合わせて、前回の成果報告で挙げた本装置の3つの仕様、即ち

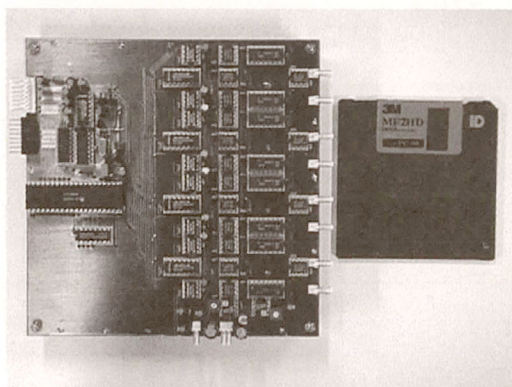


図1 出力回路と周辺回路の基板



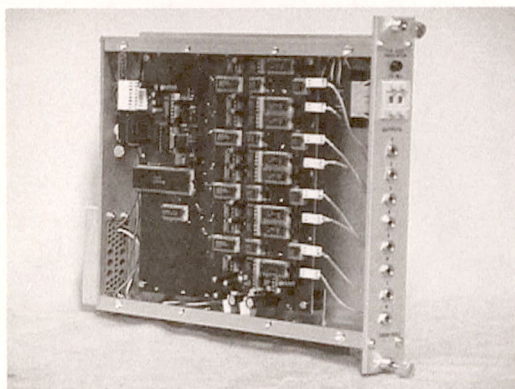


図2 NIMモジュールで構成したユニット

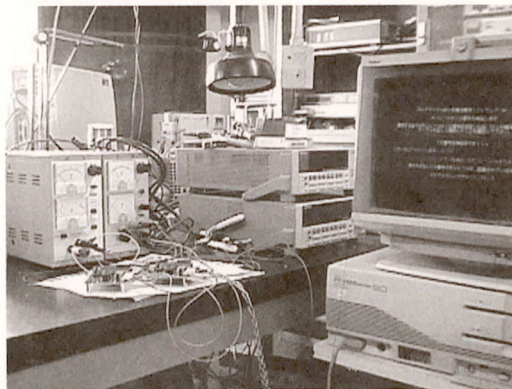


図3 自動認識試験の様子

- a. 分解能を 100 nA から 10 nA に向上する
  - b. コンピュータ (PC98) をホストとして、出力電流を自由に制御する (時系列で出力毎に勾配を付ける)
  - c. ユニット単位で必要に応じて増設
- を実現することに成功した。

## 2. 結晶両端の電圧測定

研究者との意見交換において、現在広く行われている定電流電解の問題点として、結晶両端の電圧が低いと反応が進まず、逆に高いと反応が進みすぎてしまう場合があることが挙げられた。この解決策として、結晶両端の電圧を測定してホストに送信する機能を本装置の設計に追加した。図1の基板にはその機能を実現する回路も組み込まれている。

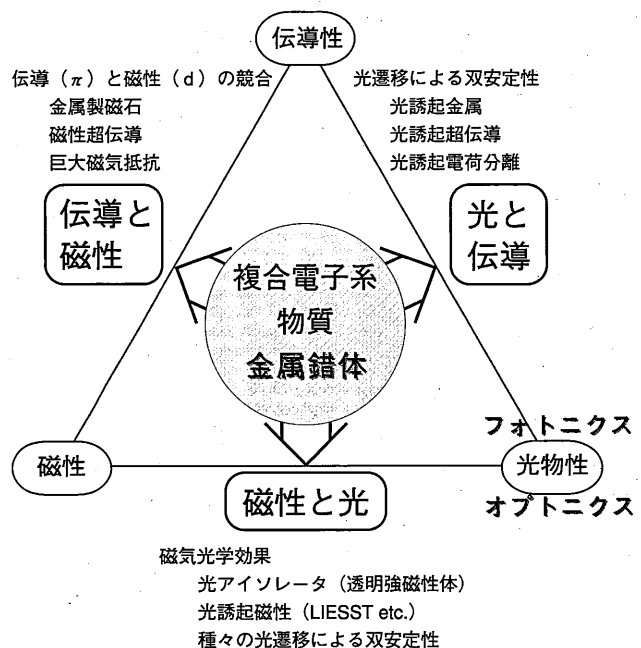
ソフトウェアにより、本装置の仕様である電流制御だけでなく、結晶両端の電圧値がある設定値以上 (以下) にならないように制御する定電圧制御、またはそれらを組み合わせた制御なども可能となる。さらに、電圧、電流値をプロファイルできるようにすれば、結晶生成の詳細な条件探索に役立つ上に、酸化 (還元) 状態の異なる結晶 (例えばFe(II)とFe(III)) を選択的に生成することも可能となろう。

# 多重機能を有する d- $\pi$ 複合電子系物質の創製

提案代表者	東京都立大学大学院理学研究科 (現；京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻)	教授	北川 進
提案者及び共同研究員	分子科学研究所	教授	小林 速男
	名古屋大学大学院人間情報学研究科	助教授	山下 正広
	東京大学大学院総合文化研究科	教授	小島 憲道
	東京工業大学大学院理学研究科	教授	榎 敏明
	北陸先端科学技術大学材料科学研究科	助手	北川 宏

## 1. はじめに

近年、物質の画期的な機能の創成という視点から様々な物質の合成が試みられつつある。とりわけ、光学的性質、磁性、誘電性、伝導性などを組み合わせることによる多重機能性の研究に焦点が当てられている。その物質設計にかかわる概念として、例えば d- $\pi$  相互作用や二重交換相互作用による電荷・スピンの結合からくる特異な輸送現象と磁気的性質の発現、多様な荷電・スピン状態を持つ系の光誘起による相転移からくる磁性変換現象などが提案されつつある。この対象となる物質は有機物または無機物という範疇に分類されて開発されてきた。ところで、無機・有機のすべてを持ち合わせている金属錯体は、多様な酸化数、スピン状態を与える金属イオン部と無機および有機の配位子（多様な  $\sigma$ 、 $\pi$  軌道を持つ）との相乗的效果により、極めて多彩な電子構造、最も画期的な機能の創成をなしうると期待され



金属錯体集積体がかかわる多重機能

る。言い換えれば電子機能の鍵をなす電子相関、電子-格子相互作用を効果的に制御しうる「新規物質」と考えられる。この物質群には未だ充分な注意が払われてこなかった。これはひとえに金属錯体分子集合体の物質開発研究が進展していないことによる。これまで本研究グループは学会等で幅広い視点（多重機能性を目指した金属錯体集合体）で次世紀に向けた研究テーマについて討論を深めてきた。そこで今後重点的に研究を進める方向として、光、磁気、電場誘起の機能を持つ金属錯体集合体に焦点を絞り、その物質合成研究を行うことを企図した。

本研究グループの研究対象は既存の無機物質と有機分子集合体の材料科学のいずれにも含まれなかった未開拓の無機・有機融合物質（錯体）であり、その機能科学は近い将来重点研究のテーマとして主体的に日本で発展し、世界をリードすべき課題であると捉えている。

最近、有機-無機複合多元性錯体による  $d-\pi$  系の構築をめざした研究が、確実に増え続けている。しかしながら、 $d-\pi$  相互作用から産み出される新しい物性や機能が得られた代表的な物質は未だ存在していない。ところで、報告されているいくつかの系では、従来の固体物理の知識のみでは説明出来ない興味ある物性現象が見出されつつある。例えば、良伝導性の試料中で何らかのスピン間の order が観測されたり、そのスピン間に働く相互作用の大きさ  $J$  がスピン間の直接相互作用だけでは説明できないほど大きな値になる現象があげられる。これらの現象を、単純に  $d$  電子間に働く相互作用だけ、 $\pi$  電子の伝導理論だけで説明することは困難であり、「伝導電子（ $\pi$  性）を介した  $d$  電子間の相互作用」が関与している解釈が支持されつつある。

しかしそれならば、この系の中では具体的にどのような相互作用が働いているのだろうか？それは、無機物ペロブスカイト型マンガン酸化物などで見られるような、二重交換相互作用なのだろうか？残念ながら、この点が希薄合金における  $s-d$  相互作用とは異なり、基本的な相互作用が有効ハミルトニアンを用いて定式化されて説明される段階に達していない。つまり、「伝導電子と磁性原子との間の相互作用により……」、などの物性が報告されているが、それが本当に伝導  $\pi$  電子と磁性  $d$  電子との間の相互作用なのかどうかは確定していない。

ところで最近、Enoki らは、<sup>1</sup> (BEDT-TTF)<sub>3</sub>(CuBr<sub>4</sub>)系における磁性  $\text{Cu}^{2+}$  スピン間の大きな相互作用の原因が、 $\pi$  伝導電子を介するものではあるが、磁性  $d$  電子が delocalized し、 $d$  電子そのものが伝導に大きく関わってくる可能性があることを、DV-X $\alpha$  分子軌道計算の結果を踏まえて推論している。そうすると、これまで提唱されてきた  $d-\pi$  系の認識そのものが、大きく変更されてしまうかもしれない。すなわち、これまで  $d-\pi$  系とは、

- 磁性  $d$  電子と伝導  $\pi$  電子との間に何らかの相互作用（例えば二重交換相互作用のようなもの）が働き、その結果、スピンの order が導電性を向上させる、または、伝導電子を介して磁性ス

ピン間に大きな相互作用 ( $J \sim 100$  K) を引き起こすもの。

などと位置づけされていたが、Enokiらの結果を考慮に入れるならば、

- 伝導 $\pi$ 電子と磁性d電子を有する軌道間に重なりがあるため、一種のd- $\pi$ 軌道の混成が引き起こされ、伝導性と磁性のインタープレイによる物性が発現する状態。

と定義されるかもしれない。いずれにせよ、それらを詳しく議論するためにはまだまだ物質の絶対量が少なく、この二通りの定義も、それらを独立に区別することは非常に困難であろう。d- $\pi$ 系の定義そのものもまた、今後の研究が進むにつれて益々明確になると考えられる。なぜなら、日、仏、スペインのグループを中心として、様々な分子ユニット(多元性)、各種の空間・電子構造の次元性(多様性)による、新しいd- $\pi$ 系(多重性)の合成研究が取り組まれているからである。その中でも最もd- $\pi$ 系と考えられる、つまり前述したような磁性d電子と伝導 $\pi$ 電子との相互作用によって興味ある電気・磁気的物性が引き起こされている系は、

1. BEDT-TTF塩で磁性 $\text{Cu}^{2+}$ を含む安定金属<sup>2)</sup>の報告。
2. 超伝導転移、反強磁性転移、圧力制御などが可能であり、d- $\pi$ 相互作用をコントロールできる一連の $(\text{BETS})_2(\text{MX}_4)$  ( $\text{M} = \text{Ga}, \text{Fe}, \text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ )。<sup>3</sup>
3. 伝導 $\pi$ 電子を介して、充分離れた隣接 $\text{Cu}^{2+}$ スピン間に非常に大きなWeiss温度 $\Theta = -100$  Kが働く $(\text{BEDT-TTF})_3(\text{CuBr}_4)$ の系。<sup>1</sup>
4. 広がった $\pi$ 電子系に金属を埋め込む、かつ、圧力誘起d- $\pi$ 電荷移動が観測される $\text{MPc}(\text{AsF}_6)_{0.5}$  ( $\text{M} = \text{Ni}, \text{Co}, \text{Pc} = \text{phthalocyanin}$ )の系。<sup>4</sup>

などであろう。これらの物質の物性現象は後ほど詳しく紹介するものとして、これらの物質が、我々が追い求めている答えに比較的近く、位置しているものと思われる。

この報告書では、d- $\pi$ 系の総合的な理解を目的として、前述した興味深い物性が現れている系だけに留まらず、d- $\pi$ 系を目指している様々な系についても概観し、以下にまとめた。

## 2. これまでの背景-伝導と磁性が結合した系を中心として

### 2. 1 d- $\pi$ 相互作用系

d- $\pi$ 相互作用系は、これまで報告されたいくつかの無機物のs-d相互作用系とは異なり、有機・無機融合体において、s電子のかわりに有機のp( $\pi$ )電子が伝導電子に置き換わり、局在スピン(3d電子)との相互作用を考えることによって産みだされるものとする。<sup>5,6,7</sup>ここ数年で、金属錯体を用いて「d- $\pi$ 相互作用系」を産み出す努力をしている研究者の数が着実に増加しつつある。これに

●有機・無機融合体が無機でもなく、有機でもない独自の優れた物性を与える

●有機物質の膨大な種類、卓越した設計性に加えて無機の優れた物性を併せ持てば、想像を超える素晴らしい物性を持つ系が創成されるという期待感が高まっているためである。

特にこの  $d-\pi$  相互作用は新しい有機磁性金属を与える可能性がある。これは  $s-d$  相互作用を持つ通常の磁性金属の有機物版として有力な系となりうるものである。半導体的な有機物質の場合、この  $d-\pi$  相互作用は磁氣的相互作用をうみだすうえで有効ではないと考えられていた。しかしながら、この半導体的な有機物質でさえ、有機ドナー分子と磁性イオン間の距離が通常のファンデルワールス距離よりも短い原子間接触があるならば、有機  $\pi$  電子系を介した超交換相互作用によって  $d$  電子の局在磁気モーメント間の磁氣的相互作用の促進に十分な寄与を与えることが期待できることがわかってきた。それゆえ、分子性結晶における  $\pi$ ,  $d$  電子の寄与が新しい有機磁性体をあたえる期待が高まっている。

### 3. 研究成果 ('97-'98)

#### 3. 1 磁性超伝導体をめざした物質開発

①(BEDT-TTF)<sub>3</sub>CuCl<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (文献2, 8)

②(BETS)<sub>2</sub>(MX<sub>4</sub>) (M = Ga, Fe, X = F, Cl, Br) (文献9, 10, 11, 12)

#### 3. 2 磁性金属をめざした物質開発

①(BEDT-TTF)<sub>3</sub>(CuBr<sub>4</sub>) (文献1, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20)

#### 3. 3 外場応答を目指した物性研究

①擬一次元鎖ハロゲン架橋金属錯体

②オキシム系

③一次元混合原子白金錯体の研究 (文献21, 22, 23, 24)

④室温光誘起スピン転移を目指したスピנקロスオーバー錯体の研究

⑤(参考) MPc(AsF<sub>6</sub>)<sub>0.5</sub> (M = Ni, Co, Pc = phthalocyanin) (文献4)

#### 3. 4 新規融合系の構築

①電荷移動型遷移金属錯体集積体 (TTF<sub>7</sub>(FeCl<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, ET<sub>2</sub>(MoCl<sub>6</sub>) 文献25)

②  $d-\pi$  系の新たなねらい (方向性) ( $\{[M^{\text{II}}(\text{CA})(\text{H}_2\text{O})](\text{G})\}_n$  ( $M^{\text{II}}$  = Metal, G = Guest molecule))

③アニオンを介した、伝導  $\pi$  電子と磁性 d 電子との相互作用系 ( $\text{Cr}(\text{X}_4\text{SQ})_3$  と TTF 誘導体から成る電荷移動錯体)

④新規低次元 d -  $\pi$  物質の構築 ( $\{\text{Na}_2[\text{Ru}(\text{Cl}_4\text{Cat})_3](\text{L})\}_n$  ( $\text{L} = \text{pyz}$  or  $\text{tz}$ ) 文献 26)

#### 4. 今後の展望

有機・無機融合系としての錯体集合体による d -  $\pi$  相互作用系の構築を行った合成研究について報告した。すなわち (1) 金属イオン部位に d スピン、 $\pi$  性有機分子を主とした部位に伝導電子を持つ設計指針による磁性超伝導、磁性金属系研究、(2) 金属 (d 電子) - 配位子 ( $\pi$  電子) 間の分極を、光などの外場により誘起することにより生ずる新規物性系、(3) 電子-水素相互作用に基づく新しい競合状態・融合状態を利用する物性系などである。

特に、合成の立場からは、興味あるビルディングブロックを用いて、合理的に 1 ~ 3 次元構造を構築する研究を代表者の行った物質系を中心に詳説した。また、この話の展開過程で、このような無機・有機融合系では何が特徴で、どのような機能が期待されるかも報告した。この成果により、ビルディングブロックを巧妙に連結して d -  $\pi$  相互作用の調整をおこなう方法が現実的なものとなり、目的とする多重物性系の構築に近い将来行いうるものと大いに期待される。

- 1 J. Yamaura, K. Suzuki, Y. Kaizu, T. Enoki, K. Murata and G. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 2645 (1996).
- 2 P. Day, M. Kurmoo, T. Mallah, I. R. Marsden, R. H. Friend, F. L. Pratt, W. Hayes, D. Chasseau, J. Gaultier, G. Bravic and L. Ducasse, *J. Am. Chem. Soc.* **114** 10722 (1992).
- 3 小林速男、小林昭子、徳本圓, *固体物理* **31**(7), 653 (1996).
- 4 T. Hiejima and K. Yakushi, *J. Chem. Phys.* **103**, 3950 (1995).
- 5 芳田奎, 近藤効果とはなにか丸善 (1990).
- 6 榎敏明、加藤礼三, 分子磁性 4 章、伊藤公一編、学会出版センター (1996).
- 7 薬師久弥, *応用物理* **64**, 985 (1995).
- 8 D. Chasseau, P. Guionneau, J. Gaultier, Y. Barrans, L. Ducasse, C. J. Kepert, P. Day and M. Karmoo, *Synth. Met.* **86** (1997), in press.
- 9 A. Kobayashi, R. Kato, H. Kobayashi, T. Mori and H. Inokuchi, *Solid State Commun.* **64**, 45 (1987).
- 10 H. Kobayashi, A. Sato, E. Arai and H. Akutsu, *J. Am. Chem. Soc.* **119**, 12392 (1997).
- 11 M. Tokumoto, P. Cassoux and H. Kobayashi, *Synth. Met.* **86** (1997), in press.
- 12 H. Kobayashi, H. Tomita, T. Naito, A. Kobayashi, F. Sakai, T. Watanabe and P. Cassoux, *J. Am. Chem.*

---

*Soc.* **118(2)**, 368 (1996).

- 13 T. Enoki, J.-I. Yamaura and A. Miyazaki, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **70**, 2005 (1997).
- 14 N. Yoneyama, A. Miyazaki, T. Enoki and G. Saito, *Synth. Met.* **86**, 2029 (1997).
- 15 T. Enoki, M. Enomoto, M. Enomoto, K. Yamaguchi, N. Yoneyama, J. Yamaura, A. Miyazaki and G. Saito, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **285**, 19 (1996).
- 16 A. Miyazaki, T. Enoki, H. Uekusa, Y. Ohashi and G. Saito, *Phys. Rev. B* **55**, 6847 (1997).
- 17 A. Miyazaki, I. Ichikawa, T. Enoki and G. Saito, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **70**, 2647 (1997).
- 18 T. Enoki, I. Ichikawa, A. Miyazaki and G. Saito, *Synth. Met.* **86**, 1971 (1997).
- 19 A. Miyazaki and T. Enoki, *Netsu Sokutei* **24(2)**, 90 (1997).
- 20 T. Enoki, J.-I. Yamaura and A. Miyazaki, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **70**, 2005 (1997).
- 21 小島憲道, *応用物理* **63**, 277 (1994).
- 22 小島憲道, *高圧力の科学と技術* **3**, 368 (1994).
- 23 N. Matsushita, A. Takano and N. Kojima, *Mol. Cry. Liq. Cry.* **285**, 317 (1996).
- 24 T. Komatsu, N. Kojima, *et. al.*, *Solid State Commun.* **103**, 519 (1997).
- 25 M. Umeya, S. Kawata, H. Matsuzaka, S. Kitagawa, H. Nishikawa, K. Kikuchi and I. Ikemoto, *J. Mater. Chem.* **8(2)**, 295 (1998).
- 26 M. Kondo, M. Hamatani and S. Kitagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 455 (1998).

## 化学合成した金属酵素モデルによる 酸素分子変換系の研究

提案代表者	九州大学有機化学基礎研究センター	教授	成田 吉徳
提案者及び共同研究員	分子科学研究所	教授	渡辺 芳人
	九州大学有機化学基礎研究センター	助手	谷 文都
	九州大学有機化学基礎研究センター	非常勤研究員	中村 暢文

酸素分子はその基底状態が3重項であるために殆どの有機基質に対して反応性の乏しいことから、その活性化にはd軌道に不対電子を持つ遷移金属錯体などとの錯形成を経て、酸素-酸素結合の開裂により強い酸化活性種を創り出すことにある。金属酵素はこのような酸素活性化反応を行っており、その機構解明と応用の上から化学合成した反応中心モデルによる研究は多くの利点を持っている。特に、複数の電子やプロトンの移動を含む酵素反応の解明においては、反応を凍結させてその中間体を観測する必要があるが、酵素は極低温での取り扱いができないし、連続した電子やプロトンとの早い反応が含まれている場合には各段階で反応を停止して観測することは極めて難しい。しかし、限られた構成要素だけから構築したモデル錯体においては低温での有機溶媒中の反応も可能であり、反応条件を制御することにより反応を1段階ずつ進めることも容易である。特に電子やプロトンの流れが反応を制御しており、不安定な中間体が反応の鍵となる場合においては特に有力である。いわば反応の“スナップショット”を取ることが出来ることになる。

酸素分子活性化は酸素添加酵素における反応機構の解明や有機合成化学における酸素分子を用いた酸化反応など多方面から大きな関心が寄せられているにもかかわらず、酵素に見られるような選択性・反応性両面から触媒的に有用な反応へと結びつく例は少ない。最近の酸素代謝に関する酵素の3次元構造の構造決定や酵素の変異体研究の進展に伴い酵素においては次式に示すような基本的に単純な反応により酸素分子の活性化が進行しており、アルデヒドのような酸化されやすい分子を犠牲分子として使うことなく純粋に酸素分子を金属イオンと電子、プロトンを用いて活性化する基本原理は次の式で表される。



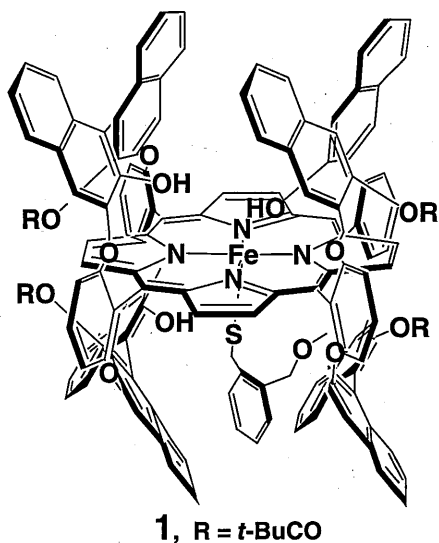


単核の錯体で酸素分子の活性化を行っているチトクロームP-450とそのモデル研究については化学・生化学両面から研究されているが、その核心となる酸素分子の活性化中間体については依然として実験的に実証されていない。果たして $RS\cdot\text{Fe}^{\text{IV}}=\text{O}^+$ は存在するのであろうか？もちろんこのような中間体は酵素反応ではとらえることが極めて困難である。そこでこの様な酸素分子の活性化を伴う重要な2種類の酵素の活性中心に相当するモデル錯体を化学的に合成しその反応性、スペクトル特性からこれまで明らかに出来なかった問題点を解決することを目的として本研究を進めた。

1番目のターゲットはP-450である。モデル錯体としては、ヘムの上下両面に嵩高い不斉ピナフタレン4個を共有結合により修飾し、中心鉄イオンの上下に酸素配位/基質認識と軸配位子のためのポケットを作る。このポルフィリンは2つの王冠を合わせた形に似ていることから"twin-coronet"ポルフィリンと呼んでいる。それぞれのピナフタレン分子の水酸基の1個は中心金属の方向を向き配位酸素原子に対して水素結合できる距離に存在すると共に、チオレート配位子を結合させるための官能基としても使える。さらにこれにチオレート配位子として適当な電子供与性が期待できるベンジルメルカプタン誘導体を良好な収率で結合させることができ、図1に示した中性の $\text{Fe}(\text{III})\text{-SR}$ 錯体の合成に成功した。これは複雑な天然有機化合物の全合成に匹敵するものであり、有機合成の醍醐味が味わえる合成であった。通常、 $\text{Fe}(\text{III})$ 錯体は酸化能を有し、チオレート配位体は空气中で自動酸化を受け分解してジスルフィドを与えるが、この錯体は室内光、空气中で安定な錯体であり、P-450と類似した特徴的な低スピンEPRを与えるほか、EXAFSより $\text{Fe-S}$ 結合長は酸化型の酵素と類似した2.2 Åと推定された。

このモデルはこれまで合成されたP-450活性中心モデルとしては最も複雑であり、かつ酵素の活性中心において必要とされる構造を全て取り込んでいる。その特長の一つとして酸素配位部位が立体保護されたポケット内に存在する点である。低温では還元体の1は酸素と可逆的な錯形成を行うことが明らかとなった。酸素錯体は共鳴ラマンスペクトルにおいて明瞭な $\text{Fe-O}$ 振動が観測されることから立証された。

図1  $\text{Fe}(\text{III})\text{-SR}$ 錯体の分子構造



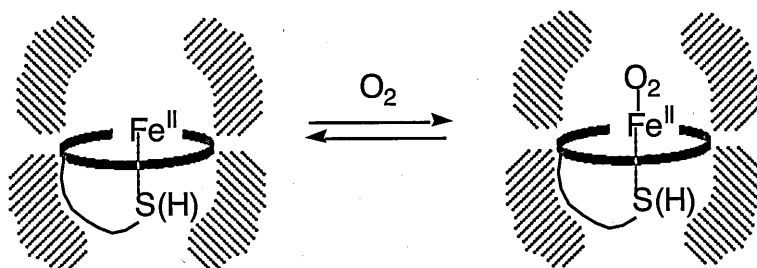


図2 酸素との可逆的錯形成

このような酸素の可逆的な配位を行うのは酵素以外では電子供与性のチオール（チオレート）配位体においては初めての例である。一般にチオール（チオレート）の様な電子供与性の軸配位子が存在すると  $\text{Fe}^{\text{II}}\text{-O}_2$  錯体は容易に酸素への電子移動を起こし自動酸化される事が知られており、その点からは強い電子供与能のある軸配位子が存在すると安定な酸素錯体形成は極めて難しいとされてきた。この結果から、安定な酸素錯体形成の方法論が見出されたので、酸素分子活性化のための道が開けたことになる。さらこのモデル錯体の還元体は室温・酸素雰囲気下でもその酸化はさほど早くなく酸素酸化が起こりにくいことが明らかとなった。このモデルは酸素配位部位に配位酸素分子への水素結合部位も有しており、同時に不斉ビナフタレン修飾により不斉反応場を持つことから、酸素活性化／（不斉）分子認識を併せて行える分子として有望である。また、軸配位子として様々の誘導体が修飾可能であることから、酵素においては実現できない非天然型の様々の誘導体の合成へと発展が出来る。

このようなヘムを中心とした金属酵素以外に酸素分子の活性化に関与している酵素には非ヘム型に見られる2核錯体を持つものがある。その両者の中間に属するものとしてチトクロームc酸化酵素が知られている。この酵素は膜タンパクであり、末端組織において酸素分子を4電子還元して膜間にプロトン濃度勾配を生成させる機能を有している。この濃度勾配のエネルギーを利用してATP合成がされている。この酸素分子代謝部位には銅-ヘム二核錯体が存在する。生化学的には銅部位の変化はスペクトル的に検出できないことからその機能は不明である。また、この反応においても酸素分子が活性化を受けて高原子価鉄錯体が生成していることがスペクトル研究から考えられているが、この反応そのものが電子とプロトンの連続的な流入を含む複雑な過程であることから、モデルを用いた研究対象としては望ましい条件を全て備えている。そこでこの酸素代謝部位に存在する銅-鉄イオンが酵素に類似した距離になるように予め設計したモデル錯体2を

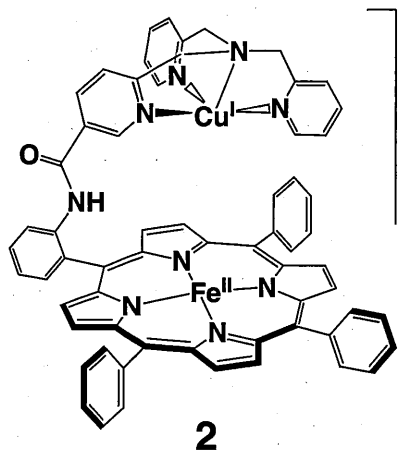


図3 モデル錯体2の分子構造

で選択的に安定に錯形成をおこなっている点も注目に値することである。この酵素反応においては休止状態にある酸化型錯体はFe(III)、Cu(II)を含んでいるにもかかわらず、これらのイオンのESRスペクトルは観測されないことから何らかの分子が両イオン間に存在し、反強磁性相互作用によりESRシグナルを与えないものと考えられていたが、その構造は長年不明であった。このモデルで初めてその実体を明らかにすることが出来た。この結果の報告後、酸化状態の酵素においてもモデルにおいて見られたのと類似の $\mu$ -ペルオキシ型錯体が存在することがX線結晶構造解析結果より明らかとなり、このモデル錯体はこの特異な構造を予言することができたものと考えられる。

さらにこの酸素錯体の分解過程を追跡することにより新たな酸素活性化の機構を提案できるものと考えている。また、自然が長年の試行錯誤の結果到達した原理をモデルを用いて再現することにより新たな分子触媒の創成の可能性があり、しかもそれは生物において行われているように、電子、プロトン、酸素、水といった循環可能な単純な原料に基づく反応であることから、このようなモデル反応の設計は将来に向けての理想的な反応設計にも大いに寄与するものと考えている。

合成した。

この錯体は酸素との反応により室温でも比較的安定な $\mu$ -ペルオキシ型錯体(Fe-O-O-Cu)を生成することがスペクトル測定により明らかとなった。しかも配位している酸素分子はその $\nu_{O-O}$ の値よりほぼ2電子還元状態に相当しており、いわば過酸化水素が酸化型の錯体Fe(III)-Cu(II)に配位したものと同等と考えられる。このような錯体が室温で安定に生成することは、われわれにとっても大いに驚きであった。しかも、このFe(II)ポルフィリンは両側で酸素の配位が可能であるが、酸素分子は分子間で配位することなく分子内のみ

## 炭素クラスター科学の新展開

提案代表者	法政大学工学部	教授	丸山 有成
提案者	分子科学研究所	教授	薬師 久彌
	北陸先端科学技術大学院大学	教授	三谷 忠興
	東京都立大学理学部	教授	阿知波洋次

標記課題研究が平成7年度—平成9年度にわたって実施されてきた。この研究がスタートした時は、文部省科学研究費の重点領域“炭素クラスター”が終了する年度であって、重点領域研究で盛り上がった研究をさらに深く追求し発展させるために、分子研を核に研究グループの存続、発展をはかることが重要と考えられた時期であったので、この課題研究のスタートは大変タイムリーであった。

初年度の研究計画はその時点で重要と考えられたテーマをかなり幅広く取り上げ、核となる11名の班員がそれぞれ独自のテーマに取り組むと同時に何人かが組となって共同研究を行う形を期待した。その時念頭においたテーマは以下のとおりであった。

1. 巨大フラーレンの製造と物性探索。
2. TOF型質量分析計による炭素クラスターの分離と精製。
3. 金属入りフラーレンの決定的構造評価と物性研究。
4. フラーレン生成機構の解明。
5. 小型フラーレンの合成の可能性の検討。
6. カーボンナノチューブの分離、精製と物性評価。
7.  $M_3C_{60}$  錯体の超伝導機構と電子フォノン構造の解明。
8.  $C_{60}$  以外を成分とするフラーレン錯体の超伝導探索。
9. MBE法等による各種組成のフラーレン錯体薄膜の作製と物性研究。
10. フラーレン強磁性体の物性研究。
11. フラーレンの新しい化学反応の開発とその誘導体に関する研究。

研究の進め方は、各班員がそれぞれの課題について独自に研究を進めていき、少なくとも年に1回の全体会議を持って成果報告、情報交換を行い共同研究の推進を図ると共に、常時相互の連絡を密にするようにしていろいろなレベルでの共同研究の発生、進展が行われるようになった。

2年目には、1年目の全体会議の結果を踏まえてテーマの絞り込みを行った。即ち、

### 1. 巨大フラーレンの製造とその物性

阿知波グループ(都立大)が中心となって、巨大フラーレンの製造、評価の条件が確立され、それに基づいてフラーレン生成機構の解明に向けて大きな進展が見られた。又、この面での丸山グループ(東大)のアプローチも重要な情報を提供した。

### 2. 金属入りフラーレンの製造と評価

篠原グループ(名大)、高田グループ(島根大)によりYやSc入りのフラーレンの構造がX線回折とMEM法により明らかになった。そこで次の段階として、その固体物性の解明が急務と考えられるようになった。

### 3. C<sub>60</sub> 錯体の超伝導機構の研究

M<sub>3</sub>C<sub>60</sub>型錯体に窒素、水素あるいはアンモニアを混入した系が盛んに研究された(分子研:今枝、井口)。さらに、アルカリ土類金属との錯体も詳細に研究され、超伝導機構解明の核心に迫る研究が展開された(北陸先端大:岩佐、三谷)。

### 4. カーボンナノチューブの分離、精製と物性評価

特に単層ナノチューブの製造、精製技術が進み、チューブ1本の物性や応用が研究されるようになった(三重大:齋藤、分子研:坂東、東北大:田路、東大:寿栄松)。

平成9年度もほぼ前年度の成果を継承、発展させる方向で研究が行われた。

即ち、

### 1. フラーレン生成機構の解明を目指した実験的、理論的研究

巨大フラーレンの生成過程の研究を発展させ、レーザー蒸発法による炭素クラスター生成の温度依存性を研究した結果、フラーレン生成の核として環状炭素クラスターが極めて重要であることが実験的に初めて示され、生成機構解明への大きな一歩となった。理論計算あるいはシミュレーションによる研究からもフラーレン生成のその他の因子の寄与も明らかになってきた。これらの成果を踏まえさらに総合的に生成機構解明に迫る研究がすすめられた。

### 2. 金属内包フラーレンの物性研究

Y、Sc等を内包したフラーレンの構造がMEM法による解析の結果確実に明らかとなり大きな進歩を遂げた。未だ大量合成へのブレークスルーが必要ではあるが、一方それらの固体の物性研究を早急に行う必要性が議論された。

### 3. C<sub>60</sub> 錯体における新超伝導体の開発

C<sub>60</sub>のアルカリ金属錯体の超伝導性に対してアルカリ金属の位置が重要な役割を果たしている事がNH<sub>3</sub>やHの含有効果の結果として明らかにされた。さらにC<sub>60</sub>分子上の電荷制御も重要であることがあらためて確認された。これらの原理に基いて新しい超伝導体開発の可能性が出現したのでこの点が追求された。

#### 4. カーボンナノチューブのキャラクタリゼーションと物性研究

単層ナノチューブの新しい合成法、精製法が明らかにされ、その一本を分離して評価することが可能になってきた。そこで主としてSTMを用いての構造評価と電子状態の解明が進められた。また、単層チューブの生成機構の議論も進展した。

フラーレン類の研究には一個のクラスター（分子）についての研究とその集合体の研究の両面がある。現時点では前者は著しい進展をみせており、その成果を踏まえて後者を充実させることがこれからは重要である。本研究グループはそのような化学と物理の両面からの融合的研究に適したグループであったと言えよう。

以上の3年間を振り返ってみて本課題研究“炭素クラスター科学の新展開”として検討されそして得られた直接的、間接的成果としては、

1. フラーレン、ナノチューブの生成機構の解明に極めて肉迫する研究がなされたこと。
2. 金属入りフラーレンの構造が確実に明らかにされたこと。
3. C<sub>60</sub>金属錯体の超伝導機構の解明に向けて大きな進展があったこと。
4. 巨大フラーレンとしてC<sub>120</sub>が化学反応によって合成されたこと。
5. 単層カーボンナノチューブがかなり容易に取り扱えるようになり、その構造や物性が実験的に明らかになり、応用までも可能になったこと。

などが挙げられよう。さらなる一步への期待が高まってきている。

3年間でメンバーは随時いれかわりもありましたが、全期間を通じてご協力頂いた主なメンバーのお名前を記しておきます。

三谷忠興、阿知波洋次、薬師久弥、加藤立久、寿栄松宏仁、岩佐義宏、斎藤 普、斎藤弥八、篠原久典、板東俊治。特に研究会の運営等には、岩佐、薬師、加藤氏らに大変お世話になりました。

最後に、本研究の遂行を絶えずご支援下さった分子科学研究所長伊藤光男先生および同共同研究委員会委員長斎藤修二先生に深く感謝申し上げます。

## 若手分子科学者のための物理化学研究会

1998年6月3日(水)

岡崎コンファレンスセンター2階小会議室

- |             |   |             |                              |
|-------------|---|-------------|------------------------------|
| 13:30-13:35 | 開会の辞<br>田原太平(分子科学研究所)   | 14:55-15:25 | 休憩                           |
| 13:35-14:15 | 原子・分子クラスターおよびその<br>イオンの構造と動力学<br>美齊津文典(東北大学理学部)                   | 15:25-16:05 | 化学動力学実験の諸問題<br>鈴木俊法(分子科学研究所) |
| 14:15-14:55 | 固体の光学活性—高精度万能旋光<br>計(ハウプ)の測定原理とその応<br>用—<br>朝日透(早稲田大学材料技術研究<br>所) | 16:05-16:45 | 溶媒効果とMO計算<br>佐藤啓文(分子科学研究所)   |

## 分子研コロキウム (第686回～)

- 第686回 1998年 4月 15日 Competition between Non-Covalent Forces:  
The Influence of Ion-Molecule and Hydrogen-Bond Interactions  
(Jim Liszy)
- 第687回 1998年 5月 20日 Molecular Structure in Contemporary Quantum Chemistry  
(Brian Sutcliffe)
- 第688回 1998年 5月 27日 最近の超高压技術の進展と物性研究 (毛利 信男)
- 第689回 1998年 6月 3日 デンドリマーの光アンテナ機能とエネルギープールの可能性  
(相田 卓三)
- 第690回 1998年 7月 1日 有機薄膜の成長、構造、電子状態:  
角度分解紫外光電子分光と低速電子散乱による研究  
(上野 信雄)
- 第691回 1998年 7月 8日 分子配列システムによる量子演算素子の設計  
ー量子コンピューティングとは何かー (山崎 巖)
- 第692回 1998年 9月 6日 金属酵素による酸素の活性化機構 (藤井 浩)
- 第693回 1998年 9月 30日 半導体微細構造を用いた量子力学実験 (樽茶 清悟)



## 平成10年度（前期）共同研究

### 課 題 研 究

科学反応に対する溶媒効果の分子論

分子科学研究所

平田 文男

### 協 力 研 究

X線非干渉性散乱因子の計算

東北大学大学院工学研究科

渡辺 昇  
林 久史

テトラシアノベンゼン錯体の構造と電子状態に関する理論研究

千葉工業大学

松澤 秀則

水溶液中におけるタンパク質の安定立体構造の第一原理予測

京都大学エネルギー理工学研究所

木下 正弘

ペプチドのフォールディングに対する溶媒効果の研究

奈良女子大学理学部

中沢 隆  
渡邊 華奈

水和エネルギーを導入したタンパク質の立体構造予測シミュレーション

鹿児島大学工学部

升屋 正人

溶液内化学反応に関する、統計力学的手法による研究

京都大学大学院理学研究科

石田 干城

ブルー銅タンパク質の共鳴ラマンスペクトル

茨城大学理学部

高妻 孝光

ウマ心筋ミオグロビン compound I のラジカルタイプの決定

慶応義塾大学医学部

江川 毅

紫外共鳴ラマン分光法を用いたSH3ドメインと結合ペプチドとの相互作用による構造変化の解析

金沢大学医学部

置塩 信行

位相制御された二つの単一モードレーザーを用いた2重共鳴分光法による無極性分子の回転スペクトル測定

東京工業大学理学部

金森 英人  
熊谷 基弘

金属フラーレンのESRを用いた電子状態の研究

東京都立大学大学院理学研究科

菊地 耕一  
兒玉 健

光を用いた液晶配向制御に関するラマン測定

北里大学理学部

片山 詔久

4-ジメチルアミノピリジン誘導体の電子励起状態ダイナミクス

東京農工大学大学院生物システム応用化学研究科

中田 宗隆  
原 さおり  
中野 文超

気相芳香族ケトンの電子状態に与える溶媒効果

信州大学工学部

田中 伸明

高圧下における単一芳香族分子結晶の電子スペクトル

室蘭工業大学

城谷 一民  
林 純一  
武田 圭生

金属フタロシアニン陽イオンラジカル塩における金属d-骨格 $\pi$ 電子相互作用(3)

東北大学大学院理学研究科

小林 長夫  
東 隆司

混合原子価錯体Cs <sub>2</sub> Au <sub>2</sub> X <sub>6</sub> (X = Cl, Br, I) の高圧光吸収	東京大学大学院総合文化研究科	松下 信之 小島 憲道
(DI-DCNQI) <sub>2</sub> Mの赤外吸収スペクトル	山口東京理科大学基礎工学部	井口 眞
Pd(dmit) <sub>2</sub> /キヌクリジニウム塩の結晶構造と電気物性	北海道大学大学院理学研究科	内藤 俊雄
導電性物質の高圧電導度測定	富山大学理学部	宮崎 隆文
TTF骨格を有する新規有機ドナー分子の合成と物性	名古屋大学情報文化学部	田中 政志 鈴木 博
<sup>13</sup> C-NMRによる液晶CBOBPにおけるリエントラント相の出現機構の解明	日本大学文理学部	藤森 裕基
トロポロン誘導体の混晶結晶内における互変異動性力学の解明	東邦大学理学部	持田 智行
金属酵素による酸化反応の分子機構解明—極低温下における不安定反応中間体の補足—	京都大学大学院工学研究科	石森浩一郎 田中 元雅
デカメチルフェロセン・TCNQ錯体の構造制御と磁気的性質	埼玉大学理学部基礎化学科	中原 弘雄
ラジカル種をゲストする包接体結晶の研究	東京大学大学院総合文化研究科	小林 啓二 山形 武広
新規強磁性有機ラジカル結晶の探索	法政大学工学部	中村 暢男
新規フェルダジルラジカル結晶の磁性に関する研究	愛媛大学理学部	向井 和男 仙波 伸得
融点および沸点近傍における水銀の分子動力学計算	九州大学大学院工学研究科	墨 智成
ランタノイド元素のモデルコアポテンシャルの開発とその応用	九州大学工学部	酒井 嘉子
反応計測STMの製作	豊橋技術科学大学	内田 裕久 八田 徳和
高分解能斜入射分光器の調整及び差動排気系の整備	広島大学理学部	吉田 啓晃 仙波 泰徳
低速電子回折条件下での励起脱離現象の研究	東京大学生産技術研究所	岡野 達雄 辰巳 夏生
HCP分子の <sup>1</sup> Δ電子励起状態における前期解離過程の研究	東北大学大学院理学研究科	石川 春樹
THz電磁波の波形整形	慶応義塾大学理工学部	神成 文彦
可視光ポンプ・遠赤外光プローブ分光法による化学反応ダイナミクス研究	神戸大学理学部	富永 圭介

アズレン環を組み込んだ新規1,3-ジチオールドナーの研究	信州大学理学部	太田 哲
カルベン三量体の生成とその性質に関する研究	三重大学工学部	高橋 康丈
キノリノール誘導体およびその錯体に関する研究	姫路工業大学工学部	北村 千寿
金属集積場におけるNOの還元反応	金沢大学薬学部	櫻井 武
新規ホスフィン配位子を用いる錯体触媒反応の開発	岐阜大学大学院工学研究科	海老原昌弘 竹中 和浩
特異的な核酸塩基配列を認識する亜鉛錯体の開発とその生理活性の探究	広島大学医学部	青木 伸
1,3-ジイミン構造を有する五配位鉄(II)-ヒドロペルオキシド錯体の同定とDNA切断	熊本大学薬学部	後藤 正文
NO錯体を利用したニトロソチオールの合成に関する基礎研究	福島大学教育学部	大山 大
ルテニウム錯体を基本骨格とするプロトン共役電子移動系の分子構築	中央大学理工学部	芳賀 正明
自己集積性高分子錯体の構築	宮城教育大学	笠井香代子
遷移金属ニトロシル錯体の合成と物性	上智大学理工学部	長尾 宏隆
有機磁性体結晶の極低温における構造の研究	電気通信大学電気通信学部	岩崎不二子 橋爪 大輔
NO <sub>x</sub> 分解, CO <sub>2</sub> のメタネーション反応および触媒表面の磁気化学	愛知学泉大学	梅田 昭司
一次元有機導体の極低温磁化測定	岡山大学理学部	大嶋 孝吉
研 究 会		
若手分子科学研究者のための物理化学研究会	京都大学大学院理学研究科	梶本 興亜
施設利用 (I) 分子制御レーザー開発研究センター		
高光度青色発光ダイオードの光学特性	弘前大学理工学部	小豆畑 敬
強力赤外光による新材料の光耐力の測定	石川工業高等専門学校電気工学科	瀬戸 悟
レーザーアブレーションによる薄膜作製に関する研究	石川工業高等専門学校電気工学科	大坪 茂
施設利用 (I) 分子物質開発研究センター		
半導体薄膜の評価	豊橋技術科学大学	吉田 明

金属錯体を用いた反応の活性化	愛知教育大学	中島 清彦
MMX-Chain物質の電子構造の解明	北陸先端科学技術大学院大学材料科学研究科	北川 宏
金属酵素モデルの精密設計と反応制御	名古屋工業大学	増田 秀樹
SOR光, レーザー光, プラズマを用いて形成された機能性薄膜の評価	名古屋大学大学院工学研究科	堀 勝
アモルファス磁性合金の磁気特性と電子構造	名古屋工業大学	山田 正明
超微粒子磁性の研究	三重大学教育学部	佐光三四郎
アルミナを母体とする物質の特性化	豊橋技術科学大学	角田 範義
金属原子を含む新規炭素ナノ集合体の生成と物性の研究	名古屋大学大学院理学研究科	小塩 明
デキストラン-マグネタイト磁性流体の磁化およびYb化合物の磁化測定	名古屋工業大学	大原 繁男
化合物半導体 (GaAs系, GaN系) 結晶とアモルファスカーボンの構造, 電子状態及び固体表面の評価	名古屋工業大学大学院工学研究科	林 靖彦
希土類マンガナイトの相転移とその物性の研究	豊橋技術科学大学	亀頭 直樹
新規物性を有する遷移金属配位高分子の合成	東京都立大学大学院理学研究科	近藤 満
アルカリ金属をドーピングした単層ナノチューブの磁気的研究	科学技術振興事業団ナノチューブ状物質プロジェクト	坂東 俊治
金属置換ウレアーゼの電子構造	大阪大学大学院理学研究科	山口 和也
クロム置換型希薄磁性半導体の合成と評価	名古屋工業大学	安達 信泰
K型 BEDT-TTF有機半導体の金属-絶縁体転移と超伝導の磁束状態	東京大学大学院工学系研究科	谷口 弘三
アルカリ金属をドーピングしたC <sub>60</sub> 電荷移動錯体の合成と物性研究	京都大学大学院理学研究科	近藤 哲生
γ線照射による超高分子量ポリエチレンの機能化	静岡大学教育学部	澤渡 千枝

## 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

BL7Bの整備と新分光システムの性能試験	福井大学工学部	中川 英之
有機薄膜のための角度分解光電子強度解析用ビームラインの開発建設	分子科学研究所	上野 信雄

放射光励起光反応高効率分光ビームラインの開発建設	分子科学研究所	宇理須恆雄
UVSOR協力研究		
極端真空紫外領域における臭化シアンの光解離過程	いわき明星大学理工学部	神田 一浩
固体ハロゲン化水素の基礎吸収	東北大学科学計測研究所	渡辺 誠
孤立電子対を持つ分子の真空紫外光化学	広島大学理学部	田林 清彦
軌道放射光とレーザーを併用した分子の光電子分光	高エネルギー加速器研究機構	伊藤 健二
放射光励起アシストによるダイヤモンドの選択形成	名城大学理工学部	縄田 正人
MPT <sub>3</sub> (M = Cr, Mn, Fe, Co) の M 3p-3d 共鳴光電子分光	広島大学理学部	佐藤 仁
擬一元ペリジウム鉛ハロゲン系の光電子分光	京都大学大学院理学研究科	神野 賢一
ARUPS による GeS 上に作業した有機薄膜の構造と電子状態に関する研究	千葉大学工学部	奥平 幸司
フラーレン類の光電子分光	千葉大学工学部	日野 照純
層状アルカリ金属複合酸化物の光電子分光	富山大学理学部	宮崎 隆文
角度分解紫外光電子分光による金属単結晶上に配向した有機単分子膜の研究	名古屋大学大学院理学研究科	関 一彦
Ag(111)面上に作成した自己組織化単分子膜の角度分解光電子分光	理化学研究所	徳光 秀造
光電子分光法によるシリコン表面上の銅フタロシアニンの配向と電子状態の研究	筑波大学	秋本 克洋
UVSOR招へい協力研究		
BL 7 A 集光システムの性能評価	鳴門教育大学	松川 徳雄
UVSOR施設利用		
元素添加非晶質 SiO <sub>2</sub> ならびに非晶質 Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> の光吸収および発光特性	早稲田大学理工学部	大木 義路
鉛ハライド結晶の内殻励起過程	福井工業高等専門学校	北浦 守
ポリエステルフィルムの極端紫外反射スペクトル	徳島文理大学工学部	大内 伊助
SHG 相を有する電界分極石英ガラスの光学特性	宮崎大学工学部	黒澤 宏
アルカリ土類ハライド量子井戸構造の発光特性 II	琉球大学教育学部	江尻 有郷
アミノ酸蒸着膜の真空紫外スペクトル測定	神戸大学発達科学部	蛭名 邦禎

硫化物ガラスの真空紫外域反射スペクトル	九州大学大学院総合理工学研究科	武部 博倫
鉛ハロゲン化合物および $\text{ZnP}_2$ の光学スペクトル	海上保安大学校	藤田 正実
内殻および価電子励起に伴う絶縁体固有発光のダイナミクス	信州大学工学部	伊藤 稔
$\text{ZnP}_2$ 半導体の内殻励起子2光子分光	岡山大学理学部	有本 收
放射光と高繰り返しレーザーの組合せによる励起子の2光子分光	大阪歯科大学	辻林 徹
強相関遷移金属化合物の真空紫外分光	名古屋大学大学院理学研究科	水貝 俊治
$\text{CaF}_2$ 単結晶の偏光蛍光測定	東京工業大学応用セラミックス研究所	細野 秀雄
B I S用バンドパス検出器の特性評価	東京工業大学応用セラミックス研究所	川副 博司
水素結合型強誘電体 $\text{PbHPO}_4$ , $\text{PbHAsO}_4$ の光学スペクトル	大阪電気通信大学工学部	大野 宣人
層状化合物アルキルアンモニウム金属ハライドの偏光反射スペクトル	山形大学理学部	大西 彰正
B L 1 Bの整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
ペロブスカイト酸化物の内殻励起緩和励起子発光	京都大学大学院理学研究科	田中耕一郎
$\text{ZrC}(100)$ 中性面におけるK, Csの吸着機構	東京工業大学理学部	枝元 一之
電子-イオン・コインシデンス分光法を用いた表面におけるサイト選択的イオン脱離の研究	愛媛大学理学部	長岡 伸一
同時計測法を用いた希ガス固体からのイオン脱離過程の研究	分子科学研究所	桜井 誠
電子・イオン・コインシデンス分光法を用いた、希ガス上吸着分子の内殻電子刺激イオン脱離の研究	分子科学研究所	永園 充
表面に吸着したホルムアミドの内殻励起による光分解反応の研究	広島大学理学部	関谷 徹司
A E P I C O分光法を用いた内殻電子励起に由来するイオン脱離の基盤依存性の研究	分子科学研究所	間瀬 一彦
高分解能P E P I C O分光法を用いたフッ素が飽和吸着したシリコン単結晶表面からのサイト選択的イオン脱離の研究	分子科学研究所	間瀬 一彦
内殻電子励起に由来する中性励起水素原子脱離の研究	分子科学研究所	間瀬 一彦
B L 2 B 1の整備	分子科学研究所	田中慎一郎

TiO <sub>2</sub> 表面からのイオン脱離機構の研究	分子科学研究所	田中慎一郎
アモルファス半導体の光電特性に関する研究	岐阜大学地域共同研究センター	林 浩司
S T Mを用いた放射光照射に伴う半導体表面光化学反応過程の解明	豊橋技術科学大学	吉田 明
1, 2 価分子陽イオンの生成と解離過程	大阪市立大学工学部	増岡 俊夫
紫外レーザーと放射光を組み合わせた極端紫外光分光	分子科学研究所	見附孝一郎
メタロセンの浅い内殻励起に起因する解離過程の研究	姫路工業大学理学部	小谷野猪之助
B L 3 A 2 の整備	分子科学研究所	下條 竜夫
二次元画像観測法による分子の光解離の研究	分子科学研究所	下條 竜夫
窒化物半導体の光電子分光	福井大学工学部	福井 一俊
(Au,Cu)/Si(111)系の高分解能SiZp内殻光電子分光	名古屋大学大学院工学研究科	曾田 一雄
B L 5 A の整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
物理吸着分子および多層膜分子の光電子分光	分子科学研究所	田中慎一郎
B L 5 B の整備	神戸大学理学部	木村 真一
10~200 eVでのアントラセン単結晶中の色中心および励起子の生成効率	神戸大学発達科学部	中川 和道
磁気線二色性による強磁性薄膜の磁性の研究	分子科学研究所	木下 豊彦
低温における(DI-DCNQI) <sub>2</sub> M, (M = Ag, Cu) の光電子分光	分子科学研究所	木下 豊彦
極端紫外光センサーの較正実験	東京大学大学院理学系研究科	中村 正人
超短周期軟X線酸化物多層膜鏡の光学特性	理化学研究所	熊谷 寛
希ガス固体からの粒子脱離に伴う放射過程の研究	分子科学研究所	桜井 誠
低応力軟X線多層膜の光学特性評価II	姫路工業大学高度産業科学技術研究所	新部 正人
高空間分解能X線望遠鏡の開発	国立天文台	常田 佐久
固体Neにおける表面特有励起子の生成・崩壊過程	学習院大学理学部	荒川 一郎
リチウムイオン2次電池材料LiCoO <sub>2</sub> のミリ波反射測定	神戸大学理学部	太田 仁
B L 6 A 1 の整備	神戸大学理学部	木村 真一
強相関伝導系の赤外磁気円偏光二色性	神戸大学理学部	木村 真一

YbBiPtの赤外反射スペクトルの研究	東北大学金属材料研究所	Pittini Raniero
稀土類3元化合物の高圧下光反射スペクトル	神戸大学理学部	難波 孝夫
Ni <sub>1-x</sub> S及び(Fe <sub>1-x</sub> V <sub>x</sub> ) <sub>3</sub> Alの赤外反射スペクトル	神戸大学理学部	岡村 英一
高エネルギー粒子を照射したツソカガラスの局所構造解析(2)	名古屋大学工学部	吉田 朋子
化合物半導体混晶AlGaInのXANES	金沢大学工学部	直江 俊一
BL7Aの整備	分子科学研究所	木下 豊彦
MoO <sub>3</sub> /ZrO <sub>2</sub> , MoO <sub>3</sub> /ZnO触媒表面のXANES解析	東京学芸大学	長谷川貞夫
層状ハイドロタルサイト化合物のXAFSによる構造解析	名古屋大学大学院工学研究科	吉田 寿雄
遷移金属複合酸化物触媒のL殻X線吸収スペクトルによる構造解析	名古屋大学難処理人工物研究センター	服部 忠
Alを含む準結晶合金のAlのXANESによる研究	名古屋大学情報文化学部	森 昌弘
ケイ酸塩ガラスの高密度化挙動に対するAlイオンの効果	工業技術院大阪工業技術研究所	北村 直之
AlK-XAFSによるFe/AlN界面の局所構造解析	大阪大学産業科学研究所	高橋 昌男
軟X線励起による発光・放射測定	鳴門教育大学	松川 徳雄
電子収量法を用いたXAFSによる非晶質合金中微量不純物の状態分析	工業技術院大阪工業技術研究所	梅咲 則正
AlK-XAFSによるアルミニウムポリアミン錯体及びアルミノケイ酸塩の構造解析	福岡大学理学部	脇田 久伸
ダイヤモンドの放射光励起エッチング	琉球大学教育学部	石黒 英治
SRアプレーションを用いた量子構造形成プロセス	名古屋大学工学部	後藤 俊夫
放射光励起プラズマによるナノメータ加工エッチングに関する研究	名古屋大学工学部	森田 慎三
シンクロトロン放射光励起エピタキシーによるテルル化亜鉛への不純物ドーピング	佐賀大学理工学部	小川 博司
放射光励起エッチング反応脱離生成物の質量分析法による検出	名古屋大学大学院工学研究科	正畠 宏祐
窒化物半導体昆晶の窒素K内殻吸収測定	福井大学工学部	山本 暁勇
K殻励起による多原子分子の反応制御	京都教育大学	伊吹 紀男
マンガンスピネル酸化物中の遷移金属の酸化状態	京都大学大学院エネルギー科学研究科	内本 喜晴
BL8B1の整備	分子科学研究所	下條 竜夫



---

Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ナノ粒子のOK-XANES

内殻磁気旋光分光の研究

アルコール，有機酸の内殻励起による光解離過程の研究

京都教育大学

東北大学科学計測研究所

広島大学理学部

村田 隆紀

羽田野 忠

平谷 篤也

# 海外渡航 (10. 4. 1 ~ 10. 9. 30)

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目的国・地域	目 的
下 條 竜 夫	極端紫外光実験施設 助 手	10.4. 4 ~10.4.15	ブラジル	ブラジルの放射光施設LNLSにての共同研究
緒 方 啓 典	分 子 集 団 研 究 系 助 手	10.4.12 ~10.4.19	アメリカ	米国MRS 1998 Spring Meetingに参加, 講演を行うため
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教	10.5. 1 ~10.5.14	アメリカ	CLEC/IQEC'98に出席, 発表のため
加 藤 立 久	分 子 構 造 研 究 系 助 教	10.5. 3 ~10.5.10	アメリカ	重点研究国際協力事業「光励起電荷移動」に関する共同研究実施のため
鈴 木 俊 法	電 子 構 造 研 究 系 助 教	10.6. 5 ~10.6.19	イタリア ロ シ ア	国際学術研究「オゾン欠損の分子科学的起源の解明」実施のため
塩 谷 光 彦	錯体化学実験施設 教 授	10.6. 7 ~10.6.13	アメリカ	第23回大環状化学に関する国際シンポジウムに出席し, 「人工DNAの超分子構造」に関する研究発表を行う
田 中 桂 一	相 関 領 域 研 究 系 助 教	10.6.13 ~10.6.26	アメリカ	国際分子分光会議出席および分子分光学についての討論
藤 井 正 明	電 子 構 造 研 究 系 教 授	10.6.18 ~10.7. 1	イギリス	第9回共鳴イオン化分光法に関する国際会議に出席, 発表
岩 田 末 廣	理 論 研 究 系 教 授	10.6.20 ~10.6.26	フランス	International Conference on Water in the Gas Phase 国際会議において招待講演
岡 本 祐 幸	理 論 研 究 系 助 教	10.6.21 ~10.6.29	ロ シ ア	「蛋白質の構造, 安定性, 折れたたみ, 基礎と医学的側面」会議での招待講演のため及びロシア科学アカデミーにて研究討論のため
北 川 禎 三	分 子 構 造 研 究 系 教 授	10.6.26 ~10.7. 6	スウェーデン	第10回ヨーロッパ生体エネルギーコンファレンスに出席, 講演及びイエテボリ大学Peter Brzeninski 準教授と研究討論
高 田 恭 孝	極端紫外光科学研究系 助 手	10.6.30 ~10.7.10	ド イ ツ	HASY LAB (ドイツ, ハンブルグ) での共同研究のため
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 教 授	10.7. 1 ~10.7.15	チ ェ コ	日本チェコ共同研究「分子科学: 気相及び凝縮相における電子移動, プロトン輸送及びエネルギー変換過程」の研究実施のため
片 柳 英 樹	技 術 課 技 官	10.7. 6 ~10.9. 5	アメリカ	FMドップラー分光に関する研究技術習得及び情報収集のため
細 越 裕 子	相 関 領 域 研 究 系 助 手	10.7. 6 ~10.7.18	フランス	合成金属の科学と技術に関する国際会議98 (ICSM'98) 出席および国立研究所 (CNRS) 訪問
田 中 彰 治	分子物質開発研究センター 助 手	10.7.10 ~10.7.21	フランス	ICSM'98 (合成金属の科学技術に関する国際会議) に出席し研究発表を行う
米 満 賢 治	理 論 研 究 系 助 教	10.7.10 ~10.7.26	フランス イ タ リ ア	1.合成金属科学技術国際会議 (ICSM'98) に出席及び発表 2.強相関電子系の未解決問題に関するワークショップに出席及び発表
緒 方 啓 典	分 子 集 団 研 究 系 助 手	10.7.10 ~10.7.19	フランス	International Conference on Science and Technology of Synthetic Metalsに参加, 講演のため
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教	10.7.10 ~10.7.19	ド イ ツ	超高速現象国際会議出席のため
山 下 敬 郎	分子物質開発研究センター 助 教	10.7.10 ~10.7.21	フランス	ICSM'98に出席, 研究発表を行う

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目的国・地域	目 的
薬 師 久 彌	分 子 集 団 研 究 系 授 分 教	10.7.11、 ～10.7.26	フランス ポーランド	ICSM'98での研究発表ならびに研究打ち合わせ
中 村 敏 和	分 子 集 団 研 究 系 授 分 助 教	10.7.11 ～10.7.20	フランス	国際合成金属会議に出席し、研究発表、討論を行う
藤 原 秀 紀	分 子 集 団 研 究 系 手 分 助	10.7.11 ～10.7.22	フランス	合成金属に関する国際会議 (ICSM'98) に出席し、資料収集及び研究発表を行う
小 林 速 男	分 子 集 団 研 究 系 授 分 教	10.7.11 ～10.7.21	フランス	合成金属に関する国際会議 (ICSM'98) に出席し、講演、発表を行う
中 澤 康 浩	分 子 集 団 研 究 系 手 分 助	10.7.11 ～10.7.22	フランス	合成金属の科学と技術に関する国際会議に参加、発表のため
宇理須 恆 雄	極端紫外光科学研究系 教 授	10.7.13 ～10.7.17	韓 国	Microprocess and Nanotechnology '98国際会議出席し、研究成果を講演
岸 根 順一郎	理 論 研 究 系 手 理 助	10.7.18 ～10.8. 3	イタリア イギリス	1.X Trieste Workshop on Open Problems in Strongly Correlated Systemsに参加、ポスター発表および議論を行う 2.Cambridge大学物理科学理論物理グループを訪問し、P.Littlewood教授のグループと議論を行う
藤 田 誠	錯 体 化 学 実 験 施 設 助 教	10.7.19 ～10.7.23	アメリカ	重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する研究成果発表のため
鈴 木 陽 子	技 術 課 官 技 技	10.7.19 ～10.7.28	フランス オランダ	「非平衡系における光学応答」に関する研究技術習得及び情報収集のため
谷 村 吉 隆	理 論 研 究 系 授 理 助 教	10.7.19 ～10.7.28	フランス ス イ ス	国際会議 Statphys20 の参加と、ローザンヌ大、Majet Chergui教授との研究討論
岡 本 祐 幸	理 論 研 究 系 授 理 助 教	10.7.24 ～10.8. 1	アメリカ	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のため
高 田 恭 孝	極端紫外光科学研究系 助 手	10.7.31 ～10.8.17	アメリカ	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のため
信 定 克 幸	理 論 研 究 系 手 理 助	10.7.31 ～10.8.31	ロ シ ア	「非断熱遷移及びトンネル現象の半古典力学的理論の開発と応用」についての共同研究のため
田 中 慎一郎	極端紫外光実験施設 助 手	10.7.31 ～10.8.13	アメリカ	第12回真空紫外線に関する国際会議に出席し、研究発表を行う
春 山 雄 一	極端紫外光実験施設 非 常 勤 研 究 員	10.7.31 ～10.8. 9	アメリカ	第12回真空紫外放射の物理に関する国際会議に出席し研究成果を発表するため
木 下 豊 彦	極端紫外光実験施設 助 教	10.8. 1 ～10.8. 9	アメリカ	第12回真空紫外光物理国際会議に出席するため（発表と討論）
松 下 道 雄	分 子 構 造 研 究 系 手 助	10.8. 1 ～10.8.19	ド イ ツ	29th AMPERE-13th ISMAR(joint)国際会議に出席し研究発表を行う
間 瀬 一 彦	極端紫外光科学研究系 助 手	10.8. 2 ～10.8. 9	アメリカ	第12回真空紫外線物理国際会議に参加し、招待講演を行う
山 下 敬 郎	分子物質開発研究センター 助 教 授	10.8. 2 ～10.8. 8	香 港	ISNA-9に出席し、研究発表を行う
上 野 信 雄	極端紫外光科学研究系 教 授	10.8. 2 ～10.8.14	アメリカ イギリス	科研費（国際学術）「放射光の特徴を利用した有機薄膜の定量的紫外光電子分光」の研究成果発表及び共同利用実験機器の研修のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目的国・地域	目 的
戸 村 正 章	技 術 課 官	10.8. 2 ～10.8. 8	香 港	第 9 回新規芳香族化合物国際会議 (ISNA-9) に出席, 講演のため
岩 田 末 廣	理 論 研 究 系 教 授	10.8. 2 ～10.8. 9	カ ナ ダ	13th Canadian symposium on Theoretical Chemistry 国際会議 において招待講演
鎌 田 雅 夫	極 端 紫 外 光 実 験 施 設 助 教 授	10.8. 3 ～10.8.11	ア メ リ カ	第 12 回真空紫外物理学国際会議に出席し, 発表ならびに 情報収集を行う
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	10.8. 8 ～10.8.17	ア メ リ カ	重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する研究成 果発表及び共同研究実施
Pettersson, Lars G. M.	極端紫外光科学研究系 外 国 人 客 員 助 教 授	10.8.10 ～10.9.28	スウェーデン	遷移金属化合物の内殻励起の量子化学に関する共同研究実 施
保 坂 将 人	極 端 紫 外 光 実 験 施 設 助 手	10.8.15 ～10.8.27	ア メ リ カ	第 20 回国際自由電子レーザー会議出席
濱 広 幸	極 端 紫 外 光 実 験 施 設 助 教 授	10.8.15 ～10.8.27	ア メ リ カ	第 20 回国際自由電子レーザー会議出席
谷 村 吉 隆	理 論 研 究 系 助 教 授	10.8.18 ～10.8.25	ア メ リ カ	JAFoS シンポジウムに参加する
小 杉 信 博	極端紫外光科学研究系 教 授	10.8.20 ～10.9. 7	ド イ ツ スウェーデン	文部省在外研究員として自由電子レーザー利用実験に関す る調査研究に従事するため
北 川 禎 三	分 子 構 造 研 究 系 教 授	10.8.21 ～10.8.28	ア メ リ カ	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギー転換」 分野による研究成果発表及びセミナーの打ち合わせのため
小 澤 智 宏	錯 体 化 学 実 験 施 設 助 手	10.8.27 ～10.9. 8	イ タ リ ア	第 33 回錯体化学国際会議 (ICCC) への出席
上 野 信 雄	極端紫外光科学研究系 教 授	10.8.28 ～10.9. 6	イ ギ リ ス	国際真空会議に出席し研究発表及び研究討議を行う
田 中 晃 二	錯 体 化 学 実 験 施 設 教 授	10.8.28 ～10.9. 5	イ タ リ ア	第 33 回錯体化学国際会議での研究発表
藤 田 誠	錯 体 化 学 実 験 施 設 助 教 授	10.8.29 ～10.9. 5	イ タ リ ア	第 33 回錯体化学国際会議にて招待講演
楠 川 隆 博	錯 体 化 学 実 験 施 設 助 手	10.8.29 ～10.9. 8	イ タ リ ア フ ラ ン ス	研究課題「テンプレート法とセルフアセンブリーを組み合わせた 機能性内部連結分子の構築」実施及び研究成果発表のため
小 林 速 男	分 子 集 団 研 究 系 教 授	10.8.29 ～10.9. 3	イ タ リ ア	錯塩化学に関する国際会議 (XXXIII ICC) に出席し, 講 演する
大 竹 秀 幸	分子物質開発研究センター 助 手	10.8.30 ～10.9.13	イ ギ リ ス	テラヘルツ国際会議, ミリ波遠赤外波国際会議出席のため
伊 藤 光 男	分 子 科 学 研 究 所 所 長	10.9. 3 ～10.9.13	前77次国 マレーシア	マレーシア化学会会長との研究打ち合わせ及び第 16 回ラ マン分光国際会議に出席のため
田 原 太 平	極端紫外光科学研究系 助 教 授	10.9. 3 ～10.9.13	前77次国	第 16 回ラマン分光学国際会議に出席, 講演のため
南 部 伸 孝	電子計算機センター 助 手	10.9. 5 ～10.9.12	イ ギ リ ス	MOLEC X II 国際会議発表出席のため

氏 名	所 属 ・ 職	期 間	目的国・地域	目 的
鈴木 俊 法	電子構造研究系 助 教 授	10.9. 5 ～10.9.12	イギリス	「オゾン欠損の分子科学的起源の解明」のための共同研究のため
高 口 博 志	電子構造研究系 助 手	10.9. 5 ～10.9.12	イギリス	研究課題「オゾン欠損の分子科学的起源の解明」のための共同研究実施
田 中 晃 二	錯体化学実験施設 教 授	10.9.10 ～10.9.14	韓 国	Korea Institute of Science & Technologyでの特別講演とSymposium on Inorganic/Organometallic Chemistryでの招待講演
藤 田 誠	錯体化学実験施設 助 教 授	10.9.10 ～10.9.19	オランダ フランス	研究課題「テンプレート法とセルフアセンブリーを組み合わせた機能性内部結合分子の構築」に関する共同研究の打ち合わせおよび実施のため
井 上 克 也	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	10.9.12 ～10.9.20	フランス	国際会議 (International Conference on Molecular Magnetism) に参加・発表のため
平 等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	10.9.13 ～10.9.21	イギリス	レーザー、非線形波長変換関連のCNOM会議への出席及び光エレクトロニクス関連のCLEO/EUROPE-EQEC98にての研究発表
谷 村 吉 隆	理 論 研 究 系 助 教 授	10.9.17 ～10.9.21	台 湾	原子分子研究所訪問と日本・台湾若手ワークショップ参加, 講演
井 上 克 也	相 関 領 域 研 究 系 助 教 授	10.9.20 ～10.9.25	中 国	純粋化学と機能性高分子国際会議 (FCFP-8) に参加・発表のため
北 川 禎 三	分 子 構 造 研 究 系 分 教 授	10.9.21 ～10.9.25	ベラルーシ	ICSCP-98 に出席, 招待講演のため
北 川 禎 三	分 子 構 造 研 究 系 分 教 授	10.9.26 ～10.10.4	アメリカ	日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギー転換」分野共同研究実施のため

# 人事異動 (10. 5. 1 ~ 10. 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
10. 5.11	上 杉 有 紀	採 用	分子構造研究系 分子動力学研究部門 非常勤研究員	分子構造研究系 分子動力学研究部門 特別協力研究員	
10. 5.11	速 水 真 也	採 用	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 非常勤研究員	相関領域研究系 相関分子科学第一研究部門 特別協力研究員	
10. 5.11	大 原 恭 子	採 用	技術課 事務補佐員 (受付)		
10. 5.16	田 中 桂 一	併 任	九州大学 理学部 助教授	(相関領域研究系 分子クラスター研究部門 助教授)	10. 9.30 まで
10. 6. 1	中 村 敏 和	採 用	分子集団研究系 物性化学研究部門 助教授	学習院大学 理学部 助手	
10. 6. 1	Sethia, A.	採 用	理論研究系 分子基礎理論第四研究部門 非常勤研究員	インド国 B. S. C. College of Engg. & Tech. 講師	
10. 6. 1	鈴 木 賢 剛	採 用	理論研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	岡 田 一 俊	採 用	理論研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	大 塚 博 史	採 用	理論研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	寺 西 慶 哲	採 用	理論研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	今 井 隆 志	採 用	理論研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	荒 木 光 典	採 用	分子構造研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	和泉田 真 司	採 用	分子構造研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	安 藝 理 彦	採 用	分子構造研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	山 本 晃 司	採 用	分子構造研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	小 杉 健太郎	採 用	電子構造研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	米 原 由華子	採 用	分子集団研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	佐 藤 あかね	採 用	分子集団研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	小 島 絵美子	採 用	分子集団研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	後 藤 義 夫	採 用	相関領域研究系 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
10. 6. 1	岩 堀 史 靖	採 用	相関領域研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	初 井 宇 記	採 用	極端紫外光科学研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	銘 荊 春 隆	採 用	極端紫外光科学研究系 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	鈴 木 和 治	採 用	分子物質開発研究センター リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	田 坂 基 行	採 用	錯体化学実験施設 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	曹 紅 花	採 用	錯体化学実験施設 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	幡 野 明 彦	採 用	錯体化学実験施設 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	茂 森 一 輝	採 用	錯体化学実験施設 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	森 下 泰 全	採 用	錯体化学実験施設 リサーチ・アシスタント		
10. 6. 1	青 柳 将	採 用	錯体化学実験施設 リサーチ・アシスタント		
10. 6.19	内 山 功 一	併任終了	(技術課 第三技術班 装置開発技術係員)	名古屋大学 理学部・理学研究科・多元数理学研究科 技官	
10. 7. 1	桑 原 真 人	採 用	理論研究系 分子基礎理論第四研究部門 非常勤研究員	科学技術振興事業団 科学技術特別研究員	
10. 7. 1	桑 美和子	採 用	理論研究系 分子基礎理論第一研究部門 事務補佐員(未来開拓事業)		
10. 7. 6	谷 口 亨	辞 職	スイス国 ジュネーブ大学 博士研究員	理論研究系 分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員	
10. 7.14	Tolstikhin, Oleg I.	退 職	ロシア科学アカデミー Lebedev 物理学研究所	理論研究系 分子基礎理論第二研究部門 非常勤研究員	
10. 8. 1	江 田 茂	採 用	極端紫外光実験施設 助手	科学技術振興事業団 科学技術特別研究員	
10. 8. 1	Kovalenko, Andriy F.	採 用	理論研究系 分子基礎理論第四研究部門 リサーチ・アソシエイト(未来開拓事業)	極端紫外光科学研究系 極端紫外光研究部門 客員助教授(外国人研究員)	
10. 9. 1	杉 田 有 治	採 用	理論研究系 分子基礎理論第一研究部門 助手	理化学研究所 細胞情報伝達研究室 奨励研究員	
10. 9. 1	宮 崎 州 正	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	科学技術振興事業団 科学技術特別研究員	
10. 9.30	猿 倉 信 彦	併任終了	(分子制御レーザー開発研究センター 助教授)	東京大学 物性研究所 助教授(客員部門)	

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
10. 9.30	田 中 桂 一	併 任 終 了	(相関領域研究系 分子クラスター研究部門 助教授)	九州大学 理学部 助教授	



## 編集後記

---

分子研レターズ39号も無事発刊の運びとなりました。ご多忙中にもかかわらずご執筆をお引き受け下さった皆様には編集委員一同心から御礼申し上げます。

長らく分子研の発展にご尽力下さった伊藤光男所長も平成11年3月をもっていよいよ任期を終えられることとなり、分子研もまた新たな節目を迎えることになります。分子研の次なる発展のために、この分子研レターズも所内外のコミュニケーション媒体の一つとしてこれまでも増して寄与できるよう願っております。

### 分子研レターズ編集委員

塩 谷 光 彦 (委員長)  
森 田 紀 夫 (本号編集担当)  
田 原 太 平  
藤 井 正 明  
薬 師 久 彌  
米 満 賢 治

分子研レターズNo.39

発行年月 平成11年1月

印刷年月 平成11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 西濃印刷株式会社

