

ISSN 0385-0560

INSTITUTE FOR MOLECULAR SCIENCE

分子科学研究所

分子研レターズ

昭和53年6月

NO.4, '78



昭和53年3月、研究棟、装置開発棟、化学試料棟、機器センター棟が相ついで完成した。写真には、左端の実験棟の中央から西に延びる研究棟が写っている。研究棟には各部門の研究室の他に、セミナー室、会議室、ラウンジ、臨時の図書室が備わっていて、研究所全体の活動や部門間の交流をおこないやすいように配慮されている。研究棟の前では、センター施設棟（図書館を含む）と電子計算機棟の工事が5月から始まった。

目 次

視点

水素経済か。プルトニウム経済か。…………… 分子研 赤 松 秀 雄 …… 1

研究所の現況 …………… 分子研 井 口 洋 夫 …… 2

レ タ ー ズ …………… 5

雑 感 …………… 徳島大教養 吉 川 研 一 …… 5

ミニビッグサイエンスと手作りの味 …………… 東北大理 宇田川 康 夫 …… 7

分子科学の現状と将来について …………… 東大教養 大 野 公 一 …… 8

分子科学研究所図書館の将来像について …………… 阪大理 関 集 三 …… 11

岡崎コンフェレンス …………… 14

第5回岡崎コンフェレンス報告

分子・分子結晶の高エネルギー励起状態 …………… 名大理 田 仲 二 朗 …… 14

第6回岡崎コンフェレンス報告

興味ある物性を有つ有機半導体 — その電子構造の解明を求めて — ……………

電通大 佐 野 瑞 香 …… 18

研 究 会 報 告 …………… 23

物 質 探 索 …………… 分子研 井 口 洋 夫 …… 23

光エネルギーの化学的利用 …………… 筑波大化 徳 丸 克 己 …… 25

イオン結晶および錯体におけるd電子状態 …………… 東工大工材研 丸 茂 文 幸 …… 28

フリーラジカルおよび分子イオンの高分解能分光 …………… 分子研 広 田 栄 治 …… 31

電子相関の新しい数学的手法の開発	お茶大理・分子研 細 矢 治 夫	32
相関分子科学と動的有機化学	京大理 加 治 有 恒	34
極端紫外連続光源を利用した観測システム	分子研 小谷野 猪之助	36
原子・分子の電子状態の大型計算	分子研 諸 熊 奎 治	39
外国人研究員紹介		43
F. Willig 博士	分子研 井 口 洋 夫	43
H. Tributsch 博士	分子研 坂 田 忠 良	44
J. C. Baird 教授	電通大・分子研 土 方 克 法	45
Jon T. Hougen 博士	分子研 広 田 栄 治	45
化学試料室について	分子研 高 谷 秀 正	47
昭和52年度共同研究について	分子研 井 口 洋 夫	49
昭和52年度共同研究一覧表		50
分子研コロキウム		58
編 集 後 記		60

視 点

水素経済か。プルトニウム経済か。

分子研 赤 松 秀 雄

水を分解して水素をつくり、これを燃やして再び水に戻す。分解のエネルギーを直接太陽に求めることができれば、この単純な循環の原理は、クリーンで永遠の燃料を人類に保証することとなる。石炭から石油に、そして天然ガス（メタン）に推移してきた燃料の組成からみても次にくるものが水素それ自身であっても何ら不思議はない。

石炭、石油に頼った時代ではエネルギーとは燃料を意味した。石炭時代から石油時代と入って、その便利さと安価の故にエネルギー革命とよばれるほどエネルギーの消費量が増大した。そして石油資源が不安になったとき人ははじめてエネルギーのほんとうの意味に気づくようになった。エネルギーとは本来抽象的な概念である。その結果新しいエネルギーの原理の探求がはじまった。

自然界はエネルギーに満ちている。それらのエネルギーを変換する原理と、それに伴って社会経済におよぼすエネルギー構造の探求が現代の課題である。光はもとより熱や電気はそれ自身貯蔵することは困難である。エネルギーを貯蔵するためには化学エネルギーとして物質に託すこと、すなわち燃料として貯蔵するほかはない。石炭や石油のもつ化学エネルギーを熱や電気に変えた過程とは逆に太陽光をはじめとして熱や電気（これらは地熱、風力、波力、潮力から変換される）を化学エネルギーに変換することが要請されるのである。水を分解して水素をつくるのはその例である。

石炭や石油が文明の基盤として社会経済を支配し、石炭経済、石油経済の時代を生んだのは、これらが燃料であって、貯蔵ができ、必要に応じて分割使用することも任意の場所に輸送することも可能であること、また重要なことは自由に交換や取引の対象となるからである。水素を燃料とすれば同じように水素経済の時代がくるであろう。

石炭や石油に代る天然の燃料はウランである。この場合は核エネルギーの利用であって、循環の原理にはあてはまらないが、ウランは燃料として貯蔵にも輸送にも適している。しかし自由な交換や取引の対象としては問題があるであろう。ウランを有効に利用する核燃料サイクルは結局プルトニウム経済への道をたどることになるであろう。

燃料として水素を選ぶかウランを選ぶかは水素経済かプルトニウム経済かの岐路である。それはまた分子科学と核科学に課せられた問題である。

研究所の現況

分子研 井口 洋夫

毎日、実験棟と研究棟（2,720 m²）を結ぶホールウェイ（配管のための共同溝的要素を持ち、両棟を2階で結ぶ渡り廊下）を歩きながら、「御蔭で分子研の建物も出来上ったなあ」と云う実感に浸っている。

“機能でわかる”をモットーに、研究所あげて建設を急いでいた付属3棟（化学試料棟1,060 m²、機器センター棟1,050 m²、そして装置開発室1,260 m²）もこの3月に完成して、研究棟と同じくホールウェイで結び、創設3年目にして、これら3付属施設は展開を完了した。

そして53年度、実験棟（建設計画のうち未建築部分3,740 m²）、電子計算機棟（1,020 m²）センター施設棟（4,360 m²；管理局と図書館が配置される）そして極低温センター棟（1,430 m²）の建設工事が開始された。この完成目標を54年3月においている。

49年、分子科学研究所創設準備室の片隅みで図面引きを開始して4年目、これら53年度の工事を以って当初計画の大半を完了する。この推進にあたって下さった多くの方々 — 文部省、研究所管理局、委員会等々 — の不眠の努力にあらためて感謝申上げる。

このめぐまれた施設を、管理、技術、研究の3本足の鼎の協力によって、国立大学共同利用機関にふさわしい研究所とすべく創設作業をつづけている。

52年度、相関領域研究系相関分子科学第一部門（教授1、助教授1、助手2）が発足し、これによって研究5系の一つづ、専任部門がおかれることとなった。また、研究施設として極低温センターが発足し、そこに助手1名が、また電子計算機センターが発足し助教授1名が52年12月に着任し、5研究施設がすべて名実共に設置された。

そして53年度は、研究部門・研究施設関係に10名（基礎化学〈教授1、助教授1、助手2〉、電子状態力学〈教授1、助教授1、助手2〉、装置開発室〈助教授1〉及び分子集団研究系分子集団部門〈客員部門；助手1〉）と管理局14名（生物科学総合研究機構の管理局の機能を持つ；分子科学研究所の技術課技官3名を含む）が認められた。また、最後の客員部門である電子構造研究系電子構造部門も、昭和53年度に発足し、専任10部門中7部門と客員5部門全部が勢ぞろいした。

今回の定員の中に上記のように客員部門の助手（専任）が1名加えられた。各客員部門の構成は、併任の教授、助教授各1名と、専任の助手2名から構成されている。今回の客員部門の助手の参加は、これからの分子研の研究系の研究推進に、大きな影響を与えるものと考えている。

ところで、6月締切りの2名の教授公募を皮切りに、53年度もこれから順次、教官公募を行って行く

予定で、その分野の詳細を含めて、「化学と工業」及び「Butsuri」に公告すると共に、各機関に書面で依頼している。是非多くの方々の積極的な関心を示して載きたいと思っている。

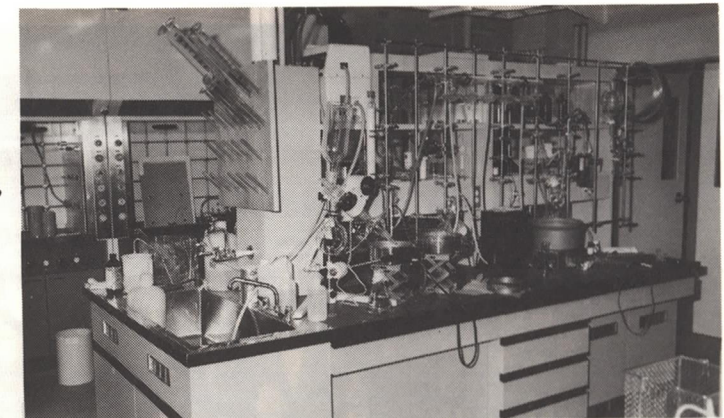
各研究施設の現状にふれると：本稿の冒頭に述べたように、研究施設の建物の完成によって、今迄実験棟にあった施設設備を、新しい建物に持込んで、展開し終えた所である。すなわち、技術課の発足と共にその充実に力を入れて来た装置開発棟、化学物質の使用を集中的に行い得るような設備と、合成・精製等の機能を持つ化学試料棟、機器を集中した機器センター棟は、最少人員で稼動し始めた。

一方極低温センターは、53年5月液化窒素の大量供給を軌道にのせ、54年3月末には液体ヘリウムの供給体制の確立を目的に、建築着工を待っている。電子計算機センターでは、機械の12月搬入、来年1月から稼

動開始出来るように準備をと、のえている。それらの十分な活動に、技官の充足を求めることや切



装置開発室の工作機械（1階）



化学試料室の合成実験台



機器センターの光電子分析装置

である。

管理局の多忙は、大変なものである。特にわれわれ分子科学研究所の創設に加えて、52年5月から、生物科学総合研究機構の創設作業が加った。管理局のセンター施設棟への移動は、上記したように54年3月である。

岡崎コンフェレンスも、5／6回を52年度に了えて、53年度は第7回、第8回を数えるに至っている。

第7回は今年9月「高分解能分子分光の現状と将来」を予定し、第8回は来年2月「原子・分子・固体表面間の相互作用」で準備が進められている。

このようにして、創設3年を経過した分子研は順次創設期を脱しつゝある昨今である。



R. S. Mulliken 教授来所を記念して、長倉三郎・東大教授、
田仲二郎・名大教授および研究所員。

(昭和53年4月11日、研究棟玄関にて)

レターズ

雑

感

徳島大教養 吉川 研一

—— 分子科学にロマンを ——

「分子科学」という名から、如何なる内容・分野を思い浮べるかは、個々の研究者によって大いに異なるであろう。そこで、まず、私なりの解釈を述べさせてもらいたい。自然界が、いくつかの階層構造から成り立っており、夫々が固有の運動法則を示すことは、既に、多くの人によって指摘されている。その時代に於て、知りうる範囲の中での最先端の階層は、常にその時代の人々の関心を引きつけてきている。現代でも、大きな方の極限では、宇宙の進化・ブラックホール・中性子星などの話題にことかかない。一方、小さな極限では、素粒子の複合模型の中で考え出されたクォークが存在するか否かは、現代物理学の中心的な課題の一つである。又、自然の階層構造の中でも、特異な位置を占める生物（生命現象）も、まだ未知の部分が多く、人類にとって永遠の研究課題である。この中にあって、化学の対象とする分子レベルの問題は、それが実際には非常に身近なことであるにもかかわらず、一般の人の興味をあまり引きつけていない面があるようである。このことが、最近の不況の中で、化学産業が構造不況業種であり、就職状況が非常に厳しいことや、これにつけ加えて、公害問題に化学産業が大きく関係していることともあわせて、現代の若い世代の中に、「化学の不人気」をつくり出していると思われる。はたして、分子科学の将来には、夢やロマンをもつことはできないのであろうか？ この問題について、私自身は、広い意味での分子科学こそが現代科学の中では、発展性を秘めた、一番魅力的な分野ではないかと考えている。これは、分子や分子集団といったものが、自然の階層構造の中でも、中心的な位置を占めていることと関係する。例を、生命現象と分子科学（化学）との関連でみてみよう。19世紀には、生物と化学の境界領域の学問は有機化学であった。それ以降は、化学の発展に伴い、生化学や分子生物学といった分野が、夫々独立した学問として発展してきている。現代では、生命現象の本質的な理解のためには、分子レベルでの研究が心要不可欠であることは明らかである。更に、今後は、単に生物を分解し、蛋白質・核酸などの分子を個々に研究するだけでなく、分子が高度に組織化されたものとしての生命現象を明らかにしようとする研究が増加するであろう。このように、分子レベルでの理解にとどまらず、その基礎のもと、さらにすすんで、生命現象全体の特質を追究することは、魅力的な研究課題である。又、最近になって、星間物質の研究に、分子科学の研究者が必要となってきたことも、分子科学の幅の広さを感じさせてくれる。或いは、原子核理論に、原子分子の分野で確立されてき

た量子化学的方法論が持ち込まれていることも興味深い。現代のように、学問が細分化してきた中で、自然科学全体を見通しながら研究をすすめることは、至難なことではある。しかし、個々の分野での研究成果を総合させ、新しい学問を切り拓くには、自然の階層構造の中でも、中心的な位置にある分子や分子集団を対象としている研究者が、現代では、その一番の近道に居るといえるのではないだろうか。

—— 分子研に対する要望 ——

まず、研究課題が固定せず、常に新しい方向へ発展することのできる余地を残すよう、心掛けてもらいたい。そのためには、人事や共同研究・共同利用のあり方が非常に重要であると思う。大学紛争の中で、封建的な色彩の強い、日本の講座制のあり方に多くの批判がなされたことは記憶に新しいことである。旧帝大系では、一つの講座の staff が、そこの出身者だけで占められているということがよくある。又、地方大学に於ては、そこがある特定の大学や研究室の“出城”になってしまっているところも数多くみうけられる。研究の継承といった意味もあるわけであり、そのような現象面だけをとらえて、これを全面的に否定することは誤りであろう。しかし、学問の全面的な発展を期すという点からは、問題が残るのは明らかである。日本に独創的な研究が少ないとよくいわれるのも、これらのことと関連していると思われる。欧米では、常勤の staff が大学や研究所を移動するのは極く普通のことであるし、それに加えて、博士研究員の制度もあり、これらのことを通じて、新しい考え方や、実験技術の交流が常におこなわれている。これに対し、日本では、ある研究室で、新たな分野の研究がはじめられるときは、海外への留学が契機になっていることが多いようである。このような機会は、それ自体重要ではあるが、その場合には、日本では新しくとも、世界的には既に「二番煎じ」になってしまっていることが多くなるはずである。このように、「人」の問題は、研究所の activity に直接関係するだけに、今後とも、大きな視野でもって、慎重かつ大胆にすすめてもらいたい。

共同利用機関としての分子研には、現在、「共同研究」「協力研究」「施設利用」などの制度があり、色々な自由度をもつ研究をするための制度的な保障がなされている。一方、地方大学は、予算・設備・人的な面、全てに、旧帝大系の大学とは比べものにならない程の悪い条件におかれている。医歯薬工などの理系の学部を擁する徳島大学でも、全学的に3000万円以上の設備費が認められることは殆どなく、例えば、全国に既に100台以上普及しているといわれる、パルス・フーリエ変換NMRでさえも、当面は入る可能性は非常に薄い。このような一地方大学で研究を行なっている私自身は、大いに分子研の共同利用の恩恵をあづかっているわけであるが、敢て、要望を述べさせてもらうならば、次のようなことがある。まず、共同利用を希望した場合に、それが、どの程度可能になるかは、事実上、所内の研究者の善意に依存する面が大きいわけである。所内の研究者との

共同研究の場合には、その問題は、さほど大きなことではないが、研究内容によっては、施設利用的な側面が強くなる場合もあるわけで、その際にも、今後とも事情の許す範囲内で、できるだけ共同利用を認めていただければ幸いです。これにつけ加えて、旅費がどの程度獲得できるかは切実な問題であり、私自身も「協力研究」を認められてはいるが、半年に一回、2～3泊すると全額使い果してしまうといった実情があります。又、分子研には、博士研究員の制度があり、何人かの方が、現在も活発に研究をすすめておられます。しかし、まだ、全国には、広い意味での分子科学の研究を行なっている数多くの、優秀なオーバードクターの人たちが職に恵まれない境遇におかれています。そこで博士研究員制度の拡充や、旅費の支給などの配慮をすすめることによって、オーバードクターの人たちが有効に分子研を利用できるような方向で改善されるよう希望します。

以上、余りまとまらないことを、述べてきましたが、地方の一若手研究者の愚言としてうけとっていただければ幸いです。

ミニビッグサイエンスと手作りの味

東北大理 宇田川 康 夫

分子科学の研究らしいものをはじめて10年とすこしにしかならない若造が「昔のこと」を云うと年長者からは嘲笑を、若手からはひんしゅくを買うだけかもしれない。しかしこの十数年の測定技術の発展ぶりは分子科学の研究を一変させた。小生の専門の分光學で云えば、多分小生の世代（昭和41年学部卒）あたりが昔ながらの研究手法——プリズム分光器と写真乾板と水銀燈がすべて——を実際にとったことのある最後の世代ではないだろうか。現在それらは回折格子分光器、レーザー、そして多種多様のエレクトロニクス機器にとって代られ、中にはもうスペクトルと云えばミニコンからアウトプットされるものしかしないという人もいるかもしれない。滞米中に分光器、XYプロッタ、フオトンカウンタなどをミニコンでつないだシステムが動くようになった時、筆者と同世代のHANSON 教授と思わず昔は乾板で……と云いあった事を思いだす。

このように進歩した分子科学ではあるが、時にはひどく倭小に思えることもある。KEKのナントカ計画は〇〇億円という類の話を聞く時で、はて、俺の研究とはlogで3違う、地震で云えば微震と強震の違いかなどと思ってしまう。しかし倭小に思えることがあっても、ビッグサイエンスに較べてもっと身近な、いわば手作りの味が楽しめる分子科学をえらんでやはり良かったという気持ちもする。事実、これまで予算がないないと文句を云いながら、N₂やYAGレーザー、フオトンカ

ウンターなど結構手造りでなんとかあったものも多い。

しかし、上述のように現在の技術の進歩は数多くのすばらしい機器を生みだし、それらはとてもアマチュアの及ぶところではない。そしてそうした機器なしには研究を行えないようになる方向にあり、現在の分子科学の先端分野、たとえばピコ秒分光とか分子線とかは要する費用からみてミニ・ビッグサイエンスと呼べると思う。実際S O Rになればミニをとる必要があろう。こうした方向は好むと好まざるに拘わらず自然科学の進歩がもたらす必然であり、分子研の設立はその必然に日本の分子科学者が応えたものと云えよう。

だが、すべての研究機関で、特に大学の学部でミニビッグサイエンス化を目指すわけにはいかないこともまた当然のことである。ひとつの対応策は分子研のような共同利用研究所をうまく利用することであろうし、分子研がこのような期待に応えてくれることを希望してやまない。他方、大学の特質は多少ふざけて云えば研究費は少なくとも「安価で良質な労働力が豊富な」場所であることであり、この特質を生かしてミニビッグサイエンス化を最小限に留め、手作りの味も加味された研究ができないかと模索している次第です。

執筆依頼に対して断りの葉書をだすことを失念した小生のずぼらから生じたこの駄文をここまで読んで下さった方に感謝すると共に多々御迷惑をおかけした分子研レターズ編集の方にお詫び致します。

(1978年6月1日)

分子科学の現状と将来について

東大教養 大 野 公 一

突然、分子研レターズの原稿を依頼されて当惑し、その配布の対象と方法について素朴な疑問を感じた。二年間英国に滞在していたためにレターズ刊行の経緯を知らないが、それはともかく、「分子科学あるいは分子研についての自由な意見」の交換の場であるという規定に釣られて、この依頼を素直に承諾することにした。

凡そ万事には「起承転結」の四段階があるとすれば、分子科学はどの時期にあるのか。人によって意見は分かれよう。だが、量子論の誕生から既に半世紀を経た今、分子科学もひとつの区切りの時期にさしかかっていることは確かであろう。そこで、空念仏的にはなるが、分子科学の現状と将来についての私見をこの紙面を借りて述べてみたい。

一般に、学問の進展に伴って研究分野の専門化・細分化が進み、異質の分野の間隙に未開発の新

分野が生じ得ることは周知のことであろう。したがって、今後の分子科学の発展は、生命科学、情報科学、さらには、人間科学などとの境界の方向にあるという認識は正当化されてよいだろう。だが、見逃してはならないことは、分子科学の内部においても専門領域の高度な分化による一種の空洞化現象が生じ始めていることである。都市の発展の歴史に喩えてみよう。初期の住民は容易に街の全容を見渡せた。しかし、発展に伴っていくつかの幹線の間に交通不便な広大な未整地が出現して来る。そして、多くの住民には全体の眺望は得られ難くなる。終には、ある沿線の大事件が他の沿線の関心事ですらなくなってしまう。また、新参の住民にとっては幹線の先端にしかマイホーム用地を見出せなくなる。しかも、その建設のために他を省みる余裕もなく全精力を傾けねばなくなる。そこで、分子研に特に期待することは、内外の各分野、各領域間の交流の促進に尽くして欲しいということである。また、分子科学の各研究者は内外の他の研究領域に屡々目を転じてみる努力を払うべきであろう。さらに、後継の研究者の育成に当っては、専門的教養の範囲が一時代前と比べて最近では飛躍的に広がってきていることを念頭に置いた教育・指導が行われるべきであろう。以上に加えて、最近、分子科学の内部で新しい幹線や環状線、さらには、副都心の建設を目指す(在来線の延長や拡充ではない)動きがみられるようになったことは注目に値する。特に危機意識の強い意欲的な研究者の開拓精神に期待するところが今後ますます大きくなるであろう。

つぎに、我国の分子科学の将来に関連して気になることがある。科学の進展は、それを担う研究者と不可分の関係にあることは言うまでもない。そこで問題となるのは、一国の将来を占う際の要所、すなわち、人口動態である。疑問の余地はあるが、分子科学研究会の会員が分子科学の研究者の大部分を代表すると考えることにする。同会の52年度版の名簿によると、会員の年齢別構成は、(1978年1月1日を基準として)図のようになる。20代6%, 30代47%, 40代25%, 50代17%, 60代以上5%である。ここで気になるのとは二点ある。

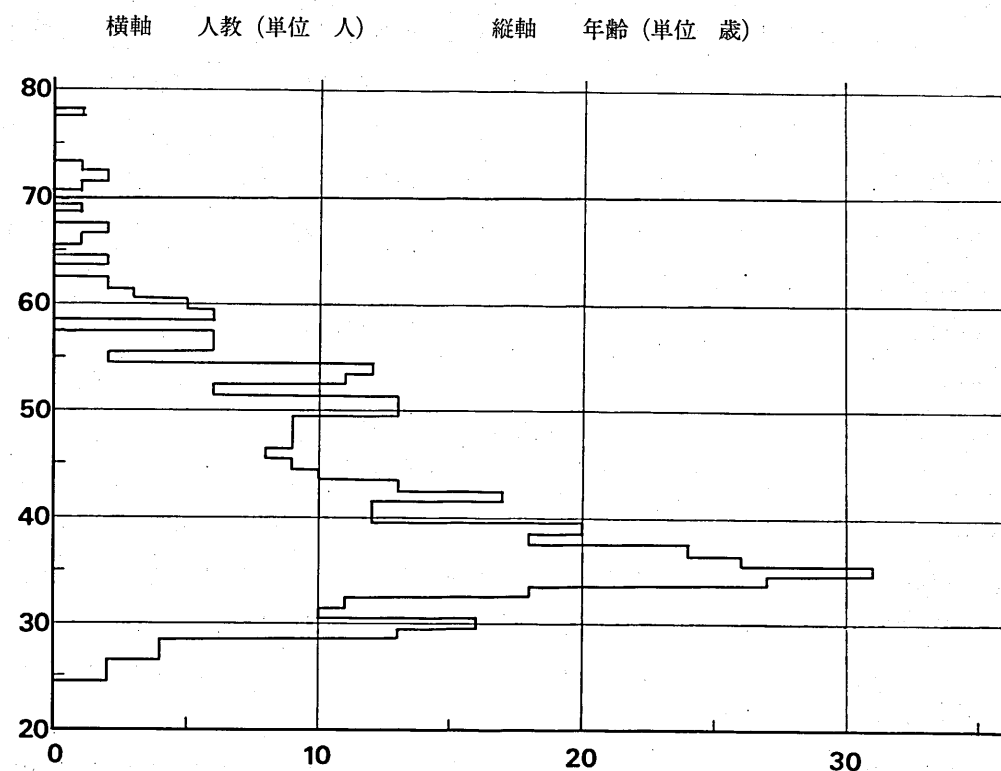
第一に、35才以下の会員の激減である(30才付近で多少持直しているが、これは、戦後のベビーブーム世代に相当する)。この原因はいろいろ考えられるが、いずれにせよ将来の担い手は後継者である。しかるべき立場にある研究者の適切な対処を期待したい。

第二は、40才から35才へかけての急激な増加である。30代の研究者が全体の約半数を占めるというこの中ぶくれ現象は、まさに異常である。次々と企画を立て新しい賛画者を必要とする者、参画者または賛画者から企画者に転じたい者、新しく参画・賛画したい者のどの立場をとってみても、現状は対立的であり、新しい研究活動の推進は今後も著しく阻害され続けて行くだろう。これは、日本の分子科学の現状及び将来に関して最も由由しい問題の一つである。各研究者それぞれの立場で善処されるよう要望する。

おわりに、悲しいニュースをこの紙面を借りてお伝えしなければならない。芳香族イオン等の研

究で著名な G. J. Hoytink 教授が 4 月 10 日に急逝された。同教授はオランダの出身であるが頭脳流出に悩む英国のシェフィールド大学の教授に迎えられ、1967 年より Chemical Physics Letters の編集長を勤めてこられた。筆者は 1975 年 9 月に同教授の下に留学したが、その直後、教授は持病の片足の切断手術を受けられた。しかし、Hoytink 教授の科学への執念は美事なものであった。半年余り後には義足で歩行されるようになり、翌年には、ご自身で車を運転され、毎週セミナーにも顔を出されるようになった。筆者のために教授は三つのテーマを用意して下さった。しかし、運悪く筆者は同教授との共著論文を発表する機会を逸してしまった。ひとつは、装置改良の予算不足のために中止になった。次は、最新鋭の装置による実験であったが、安全性に万策を施した部屋と光学台の設置に一年が経過し、さらに、専属のスタッフ（複数）の組立て作業は恐ろしい程着実であって、結局のところ筆者の帰国の期日には間に合わなかった。そして、三番目のテーマは大変に奇抜なアイデアであったが、皮肉なことに筆者が物性研で行っていた実験結果によって否定されてしまった。このことで Hoytink 教授と議論した時のことが夢のようである。片足を失っても「シェフィールドこそ科学の中心である」と豪語して憚らなかった Hoytink 教授の、あの張りのある大声が忘れられない。Hoytink 教授のご冥福を祈る。（1978 年 5 月 15 日）

図 分子科学研究会会員の年齢構成



分子科学研究所図書館の将来像について

阪大理 関 集 三

(昭和52年10月27日、分子科学研究所における講演会要旨)

図書館はエジプト時代に起源を持ち、主に欧米で発達し、2000年からの歴史を持っている。あらゆる時代あらゆる民族の文化を遺産として保存してきたのが図書館である。とくに、グーテンベルグによる印刷術の発明（1450年）以後、大量の情報を容易に蓄積できるようになり、さらに写真が出現し、また多くの情報媒体が出現し、情報の量が幾何級数的に増えてきている。これらの情報を蒐集、整理、保存するのを使命としてきた図書館は、情報量の増大とともにさらに情報の提供源としてのサービスの重要性を増しつつある。

欧米においては、いわゆる公共図書館（Public Library）が良く発達し、市民は子供の時代から図書館の恩恵を受けて成長し、市民の日常生活にも密着している。そのため、図書館や司書（Librarian）は一般社会から非常に尊敬されている。

教育と研究の両面にサービスする必要がある大学図書館も欧米では大学の中で重要視され、大学のシンボルあるいは中立的で神聖な文化の保存場所とみなされてきた。したがって、図書館は大学構内の中心的位置にあり、図書館長は、多くは司書学の哲学博士号を持つ司書である。とくにアメリカでは事務局に所属しない副学長のところも多く、予算も独立している。

いっぽう、日本の大学においては、中央図書館を持っている例が少なく、各学部が個々に図書室を持つ分散型が多い。予算も図書館の要求に従って決められることなく、研究費などの他の予算から独立していない。管理、運営、予算など、どの面についても欧米の大学図書館に立ち後れている面が目立ってきた。この結果、大学全体で同じ本を何冊も買う「重複購入」や、逆に学問の専門化、細分化に伴う「境界領域の情報」の「欠落」などの欠陥が目立つ。

しかしながら、最近の図書価格の上昇、数の増加、境界領域の増加、辞書、データブック、年鑑など参考図書（reference book）の増加と価格の上昇には、大学全体で対処する方が有利なため、先に述べた傾向も次第に改善されつつある。また、アメリカの大学図書館の影響にもよるが、個々のライブラリアンの努力の結果、日本の大学図書館も徐々に充実してきている。

クセジュ文庫に「図書館」という本があるが、訳者小林氏はその序文で「第二次世界大戦前には、日本には本当の意味の公共図書館はなかった。今日のような水準に達するまでは、胃壁をやぶり、ねむれぬ夜をつづけたライブラリアンの努力に負っている」と書いている。図書館を利用する人々

も、ライブラリアンのサービスを当然のこととして受け取るのではなく、その努力を高く評価しなければならない。ちょうど、長くつづく戦争では兵站部がしっかりしていなければ、戦闘部隊が第一戦で十分に力を発揮できないようなものである。図書館は大学における長期にわたる兵站部のようなもので、これがしっかりしていなければ、研究は本当には伸びない。情報化時代においては大学といえども R D & S (Research, Development (Education ?), Service) の三者の協力が重要であり、この三つが同格でなければ、この情報の洪水の時代に総合的な発展がとげられない。大学でも、研究所でも、その Service 機関、すなわち図書館を尊敬し、同等の立場で評価することが肝要である。これが情報化時代の図書館の姿ではないかと考える。

分子研においては、分子研、基礎生物研、生理研が共同で中央に図書館を設置する構想を持っているが、研究者、事務局の暖かい理解のもとにライブラリアンの力を十分に発揮できるような管理機構を持つ図書館にするのが望ましいと考える。図書館なのか、情報センターなのか、責任者はどこに属するのか、予算はどのように割り当てられるのか、いずれも重要な面であるが、最も大事な点は、分野の異なった、しかも全国共同利用という使命を持つ三つの研究所が共同で図書館を持つわけであるから、情報の管理集中と同時にそれらを広く開放するという重要な役目を果せる非常にアクティブな図書館を作ることである。昔のように本を整理して利用者がやって来るのを待つ本の番人になるのではなく、たとえばすべての本がアクセスイブル、つまりオープン・シェルフで非常に利用しやすい図書館になることが望ましい。

1967年に出版された『Handbook of Special Librarianship and Information Work』という専門図書館に関する本の見出しを参考にして、ライブラリアンの活動、あるいは図書館の活動はどうあるべきかを考えてみたい。

- (i) 専門図書館はどんな情報サービスをしなければならないか。
- (ii) 専門図書館はどんな長とつながるか。Administration の問題。
- (iii) Library material の問題。本、雑誌、写真、テープ、レコード、絵画等の選択と公開方法。
- (iv) 資料の分類方法。
- (v) 分類された資料の検索方法。
- (vi) 情報、特に一次情報の保存。
- (vi i) 講演会、シンポジウムのプロシーディングやプレプリント等のゼロ次情報の公開方法。
- (vi ii) ライブラリアンがどんなサービスをすべきか。文献検索、要約、図書館間相互貸与のための総合目録の作成など。
- (iv) 機械化の問題。本の登録のカード化 (L C カード)、本の受入れ貸出しの機械化、マイクロ

フィルム、マイクロフィッシュの利用、Chemical Abstract Service (CAS), MEDLARS
その他の利用。

以上の事から明らかなように、ライブラリアンは何をするのか、利用者、研究者は図書館に何を要望しているのかを相互にたえず知る必要があり、それが、図書館を利用するうえでも、ライブラリアンの活動を助けて広げるうえでも大切なことである。

また、山之内製薬の金尾氏が「研究所図書室施設計画のためのチェック・リスト」というのを書いているが、これも分子研の図書館を考える場合にある程度参考になろう。金尾氏は、図書館は誰のためにあるか、館長はどこに所属するべきか、どこに設置すべきか、照明、騒音の問題、将来の拡張の問題、図書館構成要素の問題、何をおくか、フロアスペースの問題 (ブラウジング・コーナーの必要性) などを必要最小限簡潔に考察している。

最後に、研究所図書館は24時間利用者に開放されるべきで、そのために、管理方法、防災、空調設備など特別に考慮する必要があることを強調したい。

本講演会は、分子科学研究所赤松所長、生物科学総合研究機構勝木機構長をはじめとして、三つの研究所の多くの人々の出席のもとに、昭和52年10月27日午後分子科学研究所実験棟2階会議室において開催された。大阪大学教授関集三氏の講演につづいて、名古屋大学付属図書館整理課長岸本年之氏の、長年の大学図書館運営の経験にもとづいた講演があった。講演の後、両氏を囲んで懇談会がもたれ、三研究所共通図書館の考え方、その管理、運営方法、図書館の窓口業務の実際およびその機械化、さらには利用者の心構えに至るまで、実際に図書館が設置された場合に、皆が直面しそうな具体的でかつ非常に基本的な問題が話し合われた。これは、参加者各自が図書館を自分達のものとして考える良い機会であった。

岡崎コンフェレンス

第5回岡崎コンフェレンス報告

分子・分子結晶の高エネルギー励起状態

名大理 田 伸 二 朗

表題の第5回岡崎コンフェレンスは、昭和53年12月4日～7日の間、分子研で開かれた。外国人招待者は、ドイツ、ハンブルグ DESY (Deutsches Elektronen - Synchrotron) の E. E. Koch 博士で、この他に来日中の M. Inokuti 博士 (Argonne National Lab.) , G. E. Leroi 教授 (Michigan State Univ.) も参加された。

本研究会開催の趣旨は、近年世界の各地で建設され新しい成果が続々と報告されているいわゆる SOR 光源 (英語では単に Synchrotron Radiation という) を用いて、分子および分子結晶の、高いエネルギー励起状態についての研究の、現状を把握して、新しい研究計画の出発点を探ろうということであった。これは分子研の内外の分子科学研究者の間で、SOR 光源の利用と建設について、強い関心がおこっていることによる。

それには装置自体にかゝわる問題点を解決せねばならないという大きな仕事があるが、それを横において、実際に SOR 光を用いた時に、どういう結果が得られ、どういう問題が重要になるかということを討議した。

研究会の講演発表は下記の通りである。

- | | |
|---|---------------------------------|
| 1. シンクロトロン放射を用いる分子および分子結晶の高い励起状態の研究
(コメント) | E. E. Koch (DESY)
桑田敬治 (阪大理) |
| 2. INS - SOR を用いた分子分光学の最近の結果
(コメント) | 笹沼道雄 (阪市大工)
岩田末広 (理研) |
| 3. 高励起分子のダイナミクスに関する理論的側面
(コメント) | 中村宏樹 (東大工)
朽津耕三 (東大理) |

- | | |
|---|--|
| 4. 励起原子と気体分子の弾性および非弾性散乱
(コメント)
(コメント) | 福山 力 (東大理)
W. Shearer (筑波大)
蟻川達男 (農工大工) |
| 5. 希ガス固体の励起状態の分光学
(コメント)
(コメント) | 神前 熙 (東大物性研)
末元 徹 (東大物性研)
岩田末広 (理研)
原田義也 (東大教養) |
| 6. シンクロトロン放射による固体の分光学 | 石井武比古 (東北大理) |
| 7. ポリエチレンおよびそのモデル化合物のスペクトルと光電子放出
(コメント) | 関 一彦 (分子研)
志甫 諒 (名大プラズマ研) |
| 8. アレンの磁気円二色性 | 富宅喜代一 (金沢大薬) |
| 9. 電子衝撃により作られた高励起状態の発光スペクトル
(コメント) | 小川禎一郎 (九大工)
前田浩五郎 (電総研) |
| 10. 分子の高励起状態 — その放射線物理、化学との関係
(コメント) | 井口道生 (アルゴンヌ国立研)
渡部 力 (東大工) |
| 11. 光イオン化の質量分析による研究 | G. E. Leroi (ミシガン州立大) |
| 12. 光電子分光における最近の傾向 | 木村克美 (北大応電研) |

Koch 博士の講演は、SOR光の持つ秀れた特性の説明から始って、光吸収、光電子放射、蛍光、質量分析など、各種の実験手段をSOR光を用いて行う場合の実際上の経験から話された。実例としては次のような分子があげられた。まづ気体分子の代表例としてN₂分子の吸収スペクトルを真空紫外領域で測定すると、SOR光が連続光であるために、分子の回転構造のような微細構造まで観測できる。分子軌道の間の遷移 — 例えば $^1\Sigma_g \rightarrow ^1\Pi_u$

の吸収帯と、分子の Rydberg 帯とが重なると、吸収帯の強度分布は、正常の Franck - Condon 因子からひどく変る。また autoionization の準位との相互作用も観察された。700 ~ 430 Å の領域にわたって、いわゆる Fano 効果もはっきりと見える。

次に分子の内殻電子の励起に関しては、H₂O, D₂O, SiF₄, SiH₄, CH₄, ネオペンタン, C₂H₄, C₂H₂, C₆H₆ などについて研究された。光電子放出の効率についても測定された。

電子スペクトルの全領域についての測定が行えるようになると、気体 → 固体でのエネルギー準位の変化を一目で見ることができる。Cs 原子について、気体でのスペクトルと、Cs 金属の結晶、CsClの結晶のスペクトルの比較がなされた。その結果エネルギー準位間の相関は極めて高い。

固体における励起状態の特長は、エキシトン状態が出現することであるが、He, Ar, Kr など希ガスの固体について、高いエネルギー状態における励起子の動的挙動、不純物効果、光電子放射などの例が出された。

このように DESY の研究所では、SOR光を用いて行える基礎的な実験研究を、極めて広範囲に、精密に行っており、大いに参考になった。

笹沼氏は、核研の電子シンクロトンからの放射光を用いて気体の吸収スペクトルを測定しているグループの最近の成果をまとめて話された。

中村氏の講演は、Penning ionization の機構から始って、高い励起状態におけるイオン化の理論についてのものであった。特に分子の superexcited state として、Rydberg 帯、二電子励起、内殻励起をあげ、それぞれの場合について、緩和、イオン化過程の理論を説明された。

朽津氏のコメントは、CN 基をふくむ分子の励起 Ar 原子による励起移動 → 発光過程の実験と考察についてであった。

福山氏は、励起 He 原子から、Ne への励起移動について説明した。

神前、末元両氏の講演は、希ガス固体の発光スペクトルについてで、寿命の長い三重項状態からのものと、寿命の短い一重項のものから成る。その際エキシマー状態の発光も観測される。アルカリハライドの発光についても、二種類存在することは、事情は同様である。

岩田氏のコメントは、Ne のエキシマーについての理論的計算についてであった。

石井氏の講演は、NiCl₂, NiBr₂, CoBr₂, FeBr₂, MnBr₂ などについて、真空紫外から軟X線領域にかけての、吸収測定についてのものであった。

関氏は、ポリエチレン、ポリスチレン、ポリビニルクロリド、ポリビニルアルコール、ポリビニルアセテートなどの光電子スペクトルと、エネルギー準位構造の関係について話をした。炭化水素 hexatriacontane について、単結晶を作って、吸収の異方性を測定する計画についても触れた。

富宅氏は、南カリフォルニア大 Schnepf の研究室での、ベンゼン、アレンの磁気円二色性の研究について話をした。MCDは準位の同定に有力である。

小川氏は、電子線と分子線を交叉させて作るラジカルの発光スペクトルを測定する方法と、その結果の解釈について報告した。

井口氏は、Argonne 研究所で、故 Platzman 博士や Fano 博士と一緒に研究をしてこられた豊富な体験から、高いエネルギーの励起状態の研究が、分子と結晶の電子構造を研究する上で、如何



第5回岡崎コンフェレンス出席者

に重要かを例示された。佐々木氏（東大教養）との共同研究である Al のプラズマ振動の例や、X 線吸収の微細構造をしらべる EXAFS の研究と内殻電子のイオン化の問題、共鳴イオン化の問題など、多くの話題を提供され、活発な討論がなされた。

Leroi 氏の研究は、光イオン化と質量分析計を組み合わせ、イオン化した原子、分子種を確認して、各種のイオン化過程の機構を解析するもので、数種の反応例を示された。

終りに、木村氏は、昭和52年9月～11月の間のイギリス Southampton 大学 Jonathan 教授の研究室と、英国各地の大学での、光電子分光研究の状況を視察してこられて、その見聞談をされた。

以上のように、この研究会でとりあげた題目は、物理学と化学、或いは原子・分子と固体物性の研究者といった、異なる専門に属する研究者の境界領域にあったので、会の企画に当たっても、話題が発散することを心配したが、参加者一同の感想としては、むしろ異なる分野の研究成果と考え方を聞いて、啓発されることが多かったようであった。それは勿論、Koch 博士を始めとして、参加者の方々が、日頃秀れた内容の研究を沢山蓄積され、この会へ積極的に参加して下さったからに他ならない。

世話人として御協力いただいた参加者の各位に厚く御礼申し上げます。

第6回岡崎コンフェレンス報告

興味ある物性をもつ有機半導体

電通大 佐野瑞香

昭和52年度の2番目の岡崎コンフェレンスが上記のテーマで昭和53年2月13日～15日、分子研の会議室で開催された。米国の Schein、西独の Willig を含み、所外から27名が参加した。有機半導体という名称は、縮合多環芳香族炭化水素に代表される有機化合物が半導体的電子物性を示すことから与えられたものであるが、今日、固体有機化合物の電気的性質の研究は、金属的電子物性を示す一次元化合物や半導性ポリマーなどの広範な領域にまで広がっている。そのためのコンフェレンスは、そのような背景のもとで計画されたのではあるが、その焦点は有機固体における電気的現象の基礎研究に絞られた。すなわち、伝導キャリアはどのような過程で生成され、そのキャリアはど

のような機構で運動し、さらにキャリアは励起子とどのような相互作用をもつかという3つの間に要約された。このような間に対する答は、もう大体わかってしまっていると感じている人が一方にあれば、まだすっきりしないと思っている人が他方にいるのが現状である。そこで、これらの専門家が一堂に会して、「どこ迄わかっているのか」、「何がわかっていないのか」という質問を出しあって整理することは、この興味ある物性をより良く理解するとともに、実に興味ある物性をもつ新しい材料の設計と開発に大いに役立つものと考えた。

当初、ソ連の Kurik の参加が予定されていて、ソ連におけるこの分野での研究の進歩を知る機会を期待していたが、来日が実現せず残念であった。最終的に実施されたプログラムは次のとおりである。

第1日

1. General introduction H. Inokuchi (I.M.S.)
2. Electrochemistry at organic insulator crystals F. Willig (Fritz-Haber-Inst.)
3. Exciton interaction in naphthalene single crystals N. Itoh (Nagoya Univ.)

第2日

4. The mobilities of charge carriers in long chain hydrocarbons Y. Inuishi (Osaka Univ.)
5. Carrier transport in organic solids as a function of temperature L. B. Schein (Xerox Corp.)
6. Origin of temperature-independent electron mobilities in organic molecular crystals H. Sumi (Electrotech. Lab.)
7. Charge carrier mobility in o-terphenyl solids Y. Maruyama (Ochanomizu Univ.)
8. Fluorescence and steady state current of anthracene M. Shibuya (Shizuoka Univ.)
9. Carrier generation in charge-transfer complexes K. Ishii (I.M.S.)

第3日

10. Spectroscopic and photoelectric investigation of thin organic layers N. Yamamoto (Osaka Univ.)
11. Quenching of exciplex fluorescence by the electric field and the carrier generation : PVK-acceptor system Y. Shirota (Osaka Univ.)
12. Magnetic field effects on photoconductivity M. Kotani (Gakushuin Univ.)
13. Purification of organic solids H. Anzai (Electrotech. Lab.)
14. $[(C_6H_5)_3PCH_3]^+_{1-x}[(C_6H_5)_3AsCH_3]^-_x(TCNQ)^-$ Y. Iida (Hokkaido Univ.)

15. Excitonic molecules A. Matsui (Konan Univ.)

16. Round-table discussion

従来、有機固体の電気的現象については、固体物理学の用語を用いて論じられることが多かったが、Willigはそれを電気化学的立場から検討し、電極と有機固体との界面領域でのキャリアの挙動が重要であることを強調した。アントラセン結晶とメチレンブルーのような色素とのコンタクトを作り、20nsのパルス光を照射して光電流の立ち上りを解析すると、キャリアは結晶に入って電流に寄与する前に、結晶表面に平行な方向に数百Åも運動することが明らかになった。また電子伝導帯と高い励起子状態との重なりに注目して、10nsの電子線パルス照射し多量の三重項励起子を生じ、次に10~100ns遅れてパルス色素レーザー光を照射すると、これによる遅延けい光が観測される。遅延時間を変えてけい光強度を測定することにより、励起子間の相互作用に関する知見が得られた。

鎖状炭化水素に電子線パルス照射し、それにより生ずるキャリアの移動度を測定したところ、直鎖状分子では移動度は一般に温度に殆んど依存しないが、非対称分子、あるいはまるまった分子では活性化エネルギーをもつような温度特性を示すことが明らかになった。アントラセンやナフタリンなどのキャリア移動度は室温で約 $1\text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ であることが知られている。一方Burlandは2Kにおけるサイクロトン共鳴の実験から、アントラセンの正孔の有効質量は $11m$ 。という結果を得ている。この値と、移動度の温度変化 $T^{-3/2}$ から室温における移動度の値を見積ると $100\text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 以上にもなってしまう実測値と一致しない。この相異の理由が従来明らかではなかったが、Scheinはこのコンフェレンスで初めて324~54Kという広い温度範囲にわたる移動度の測定結果を発表し、324~150Kの範囲では移動度は殆んど温度により変化しないが、100K以下の低温では温度低下とともに急激に増大することを明らかにした。このような2種類の温度変化を同一試料で見出したことは画期的なことであり、その後のScheinからのたよりによると、このコンフェレンスでのアドバイスを活用して更に低温までの移動度の測定に成功したそうである。住はこの高温領域での温度に殆んど依存しない移動度を、全伝導帯幅よりずっとエネルギーの小さな格子振動が寄与するという条件のもとでのポーラロン伝導で理論的に説明できることを示した。

o-ターフェニルは同一の温度領域で結晶状態と比較的安定なガラス状態をとり得る物質であるが、それらのキャリア移動度の温度変化を測定したところ、結晶での移動度は温度とともに増大するが、ガラス状固体では逆に減少し、しかもその値自身が極めて小さいことが見出された。材料の選択の巧みさが現われた研究である。渋谷はアントラセンの取扱いにおいて、その純度がいかに物性に大きな影響を及ぼすかを示した。山本は単分子膜のような極めて薄い試料の吸収スペクトル、(吸光度 10^{-2})の測定方法からスタートとして、脂肪酸塩単分子膜の電圧電流特性、光電導の量子

収率を報告した。

ペリレン・TCNQ電荷移動錯体は、組成比(1:1)のほかに(3:1)のものが安定に存在することが、ていねいな相図の作成により明らかにされ、その光電導性は第一電荷移動吸収帯よりも短波長側の $14\times 10^3\text{ cm}^{-1}$ で現われることが報告された。ポリビニルカルバゾール膜(PVK)にジメチルテレフタレートのような弱い電子受容体を添加した系では、キャリアはエキサイプレックス状態を経て生成されることが実験的に証明された。すなわちPVKの一重項励起子は電子受容体とエキサイプレックスを形成し、このエキサイプレックスの減衰過程はキャリア生成とけい光放出との競争過程であり、外部電場によりエキサイプレックスの解離が促進されてキャリアがより多く生成されれば、それだけけい光強度の減少が観測されるのである。

2個の三重項励起子がannihilationを起こすことにより遅延けい光が生ずる場合には、そのけい光強度は外部磁場の大きさに依存することは良く知られているが、テトラセン、ピレン、アントラセン・TCPA結晶の示す光電流も外部磁場の影響を受け、キャリア生成に三重項励起子が関与していることが示されたが、有機固体では二重項-二重項の相互作用も面白い現象をひき起こすであろうことが示唆された。

有機固体の精製という講演では、かなり細かな技術的問題に迄及んだので、盛んな質問が起こった。これは実際有機固体を材料として物性研究を進めている者にとって、いかに化学的に純度が高く、いかに物理的に完全な試料を得るかということがもっとも深刻な課題だからである。帯融解法



第6回 岡崎コンフェレンス出席者

で精製する場合、不純物が集中した部分を素早く切り離さないと、短時間のうちに不純物の拡散により再び汚れてしまうという発表は印象的であった。

$[(C_6H_5)_3PCH_3]^{+}_x[(C_6H_5)_3AsCH_3]^{+}_x(TCNQ)^{-}_x$ はアントラセンとは同じカテゴリーでは論ぜられないようであるが、結晶に歪をもたらすことなくPとAsの組成比を変え得る興味ある物質である。Excitonic Molecules というのは2個の励起子が結合して新たに生ずる励起状態であり、それからの発光を高密度励起を用いて観測しようという着想である。

3日間のコンフェレンスを振り返ってみると、各講演者は通常の報告会に比べてより多くの資料を準備し、より詳細な発表を行なった。人によっては少し緊張しすぎているのではないかとさえ思われたが、討論参加者の方は、時間的制限がゆるいことも手伝って、極めて気楽に、活発に討論を行ない、コンフェレンスの意義を益々高めたように思われる。

研究会報告

物質探索

分子研 井口洋夫

分子科学研究所共同研究の一環としての研究会“物質探索”を、昭和52年7月15・16の両日、分子科学研究所で開催した。

新物質の開発は容易なことではない。その困難さを出来るだけ小さくすることは、「新物質の潜んでいる場所は何処か？」についての理論的思考と、具体的に“もの”をつくる合成・精製グループと、そして、新しい物性を引出す実験物理学の協力が必要条件である。

この協力が必要なことは、誰しも解っている。しかし、これを実行に移すとなると、その協力が長つづきしない場合が多い。上記三分野に人材を欠かない日本として、何とかしなくてはいけない境界領域である。

物性研究所・無機材質研究所・分子科学研究所の3者が協力して、triangle meeting を考えたのは51年の秋である。その第一回の会合を物性研(52年5月13~14日)で、第二回目は分子研(52年7月15・16日)で、更に第3回目を無機材研(52年10月28・29日)で、各、その特徴を生かして開催した。

なお第4回目は、“混合原子価”に的をしぼって53年6月16~17日、東大物性研究所で行う段取りになっている。

本会(第2回)の参加者は所内を含めて20名余であった。

菅野 暁(東大物性研)：理論家の立場から見た物質探索。

$KMnF_3$ 、2次元構造化合物(MoS_2)を通して、配子場理論の立場からみた興味ある材料についての提言があり、「イオン結合・共有結合とは基本的に異った結合と云う考え方が必要ではないか」と云う問題を投げかけた。

石沢芳夫(無機材研)：金属硼化物

純度の高い MB_6 ($M=La, Ce, Nd, Eu, Sm$) 及び MB_2 ($M=Zr, Cr$) の構造(電子)について述べ、中でも EuB_6 では単結晶と多結晶とで著しい物性の差が観測されている。

秋本俊一(東大物性研)：新物質の超高压高温合成。

高压下での合成は、常圧下では得られない物質をつくり出すことが出来る。その生成物を相律によりながら解説した、 $A^{2+}_2B^{4+}_2O_4$ 型の化合物について、それらの金属イオンの半径を関数としての高压相の解析、さらに高压に於けるイルメナイト構造とペロブスカイト構造の安定領域について述

べ、特に珪酸塩スピネルの特性についても触れた。

対馬立郎（電総研）：磁性体の新しい相転移（スピン再配列）とその応用

$\text{Nd}_{1-x}\text{Dy}_x\text{Co}_5$ 中のスピン再配列の問題と、それを利用して Thermomagnetic generator への応用に触れた。その基本となる鉄化合物（ $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$; FeBO_3 ）について報告した。

江良 皓（無機材研）：BN 単結晶の物性

BN 単結晶のバンド計算，その光学的性質，さらに C（炭素）を添加したときの性質を取上げた。

高谷秀正（分子研）：面白い形をした有機金属分子。

エネルギー貯蔵材料，或は新物質合成の出発物質として興味深い有機分子 — 不安定分子を対象とした。これら不安定分子は，エネルギー的に大きい歪をかゝえ込んだ化合物（trimethylethylmethane, cyclobutadiene, cyclopentadienone, Dewar benzene, heptabulvene など）で，それらが遷移金属（ $\text{Fe}(\text{CO})_5$ など）で安定化される現象についてのべた。これら化合物の磁性について参加者の興味を示された。

坂田忠良（分子研）：Zn-TPP 薄膜の光化学電池。

Zn-テトラフェニルポルフィリン（Zn-TPP）薄膜／金属系の光化学電池を組立て，その機作について，帯構造の立場から説明した。

木村啓作（分子研）：ヒドロゲナーゼを用いた酵素電池。

水素解離能力を持つ酵素ヒドロゲナーゼを利用して，炭素電極と組んだ電池について述べ，その酵素定量への応用についてふれた。

相原惇一（北大・理）：オキソカーボンの話。

電子受容体の立場をも含めて，オキソカーボンの多価イオンの物性を解説した。

小林浩一（東大物性研究所）：低次元性の無機物質。

第1回に引継ぎ，1次元及び2次元物質の詳細を解説，特に合成が比較的容易なものに焦点を合せて述べた。その中には $\text{HfF}_4(\text{H}_2\text{O})_3$ のような Chain をつくるもの， ZrO_8 のシート構造化合物が含まれているが，更にクラスター化合物，トンネル化合物（metal bronze）など“これから”の物質についても言及した。

数百万を数える化合物の中から，“これ”と云う材料をみつけるのは容易ではない。またその指針も色々あろう。それらをすべて詰めて行った上では，勘に頼ることになるのではあるまいか？

5月末 Heeger 教授と駄弁っていたの結論も“inspiration”であった。

光エネルギーの化学的利用

筑波大化 徳 丸 克 己

近年，光化学の研究が種々の立場から深く，かつ広く研究されるようになった。光化学反応は，反応系が光エネルギーを吸収して励起状態を生成し，この励起エネルギーが反応をひき起こす源となり，結局は光エネルギーは，化学エネルギーに変換される。自然界では，緑色植物はその葉緑体が可視光を吸収し，その後電荷移動，電荷分離などの過程を経てきわめて複雑かつ巧妙に構築された分子系を通して，いわゆる光合成生成物を与える。また動物の眼は，眼の色素が光を吸収して励起され，それに続く反応が膜電位の変化をもたらし，これが視神経に電気的信号を与えることにより視覚をおこさせる。さらに近年では将来のエネルギー源としての太陽光エネルギーの利用の可能性が論じられ，それに関連して光エネルギーをいかに有効に化学エネルギーあるいは電気エネルギーに変換利用しうるかが，重要な課題となってきた。

1977年9月26日，27日に開かれた，本研究会は，このような観点から光エネルギーの化学的利用を広い視点に立って基礎的な立場から討論することを試みたものである。その基本的な課題は光励起体の関与する電荷移動である。それは基質が光を吸収して生じた光励起体が他の分子と電荷移動を伴うことなく反応するときには結合の切断，組み替えに要するエネルギーは，励起エネルギーによりまかなわれることになりそのエネルギーは概して紫外部の光によることが多い。しかし光励起体と他の分子との間の電荷移動は場合によっては比較的低いエネルギーでおこるので，可視光によってもこれを起こすことができ，しかも太陽光エネルギーの利用の観点からは紫外光よりは可視光の利用を図ることが重要である。

光化学反応系が可視光を吸収して励起体を生じたのち，これが他の分子と作用して電荷移動をおこすとき，これを電池系に組み込むことにより電流をとり出すことができれば，光エネルギーを電気エネルギーに変換することができる。電池系としては，半導体電極や色素系が考案されており，さらに系内で一たん分離した電荷を再結合しないようにして利用するために膜や界面の利用などが考えられる。また光電気化学的手法により，可視光を照射することにより水を分解して水素を得ることもできる。

緑色植物は可視光照射下に二酸化炭素と水から，これらよりエネルギーの高い炭水化物を酸素とともに生成し，これを動物は“燃料”として利用する。水からの光化学的手法による水素製造もこれと同様の意義を持つものである。また太陽光エネルギー利用に関しては，光照射下に原系よりもエネルギーの高い生成物を原子価異性化などにより合成し，この時原系と高エネルギー生成系の差

に相当するだけのエネルギーを化学エネルギーとして生成系に蓄積することができる。この物質を触媒などを用いて暗所にて処理し、原系にもどすことができると、蓄積していたエネルギーを熱の形で放出するので、これを熱交換器を用いて取り出して利用することができる。このためには不飽和結合の光分子内付加により歪の高い付加環化体を得、これを暗反応により元に戻す方式が考えられる。

また種々の光反応において励起体と他の分子との間の電荷移動は、きわめて重要である。有機分子同志、あるいは金属錯体と有機分子間で重要である。

なお光エネルギーの利用としては、励起に伴う分子の形態変化によりひきおこされる機械的エネルギーへの変換もありうる。

本研究会の内容は次の通りである。(なお種々の都合から発表の順序は必ずしもこの通りではない)

I. 概 観

1) 徳丸克己 (筑波大化)

光エネルギーの化学的利用, 序論。

2) 加藤 栄 (東大教養)

光合成における光エネルギー変換(クロロフィル系の *in vivo* の特徴の指摘, 反応中心では励起クロロフィルからの電子移動のみでなく, それへの電子移動の重要性に論及)

II. 電池系による電気エネルギーへの変換および水の光分解による水素生成。

3) 徳丸克己 (筑波大化) 山村剛士 (東大理)

2-ナフトールを用いた光電池系。

4) 山村剛士 (東大理)

水和マグネシウムポルフィリン凝集体の赤色光による可逆的電荷分離; ESR。

5) 梅沢喜夫 (東大理)

水和マグネシウムポルフィリン凝集体の赤色光による可逆的電荷分離; 光電極反応。

6) 相馬光之 (東大理)

ポルフィリン結晶と水の界面における電荷の分離。

7) 坂田忠良 (分子研)

亜鉛テトラフェニルポルフィリン-金属系の光学電池。

8) 神谷信行 (横浜国大工)

光エネルギーの変換の可能性。

9) 藤嶋 昭 (東大工)

半導体表面の温度測定による光エネルギー変換効率の検討。(光音響法の利用)

10) 小林茂郎 (相模中研)

水の光分解。(主としてルテニウム塩について)

III. 溶液, 膜および界面系の光レドックス過程。

11) 豊島喜則 (広島大総合科学)

脂質二分子膜の光反応性 — 光合成のモデルとして —
(クロロフィルを含む膜を通しての光レドックス反応)

12) 松尾 拓 (九大工)

水・有機界面を用いた光エネルギーの利用。

13) 今村 昌 (理 研)

放射線化学的アプローチ(クロロフィルからのイオン生成など)

14) 大辻吉男 (阪府大工)

高原子価マンガンの複核錯体の光化学的挙動。

IV. 光エネルギーの化学エネルギー及至熱エネルギーへの変換。

15) 向井利夫 (東北大理)

原子価異性化による光エネルギー蓄積。

16) 国分 洸 (東北大理)

可視・紫外光の熱エネルギーへの変換。

V. 有機分子内の光電荷移動。

17) 大橋 守 (電通大材料化学)

電荷移動の関与する光反応。

(なお大辻吉男(阪府大工)、電子供支体あるいは電子受容体として増感剤を用いる有機合成についてコメント)

18) 吉原経太郎 (分子研)

ピコ秒レーザーによる光反応初期過程。

終りに、本研究会について細かいことまですっかりお世話していただいた吉原経太郎教授、坂田忠良助教授およびその研究室の方々に深く感謝します。

イオン結晶および錯体における d 電子状態

東工大工材研 丸 茂 文 幸

昭和52年11月11日・12日の2日間、上記の研究会が分子科学研究所の共同研究による研究会として開催され、約40名の参加者があった。

分子あるいは結晶中の電子分布は、その物質の物理的性質や化学的性質の多くが依存している重要な量である。しかし電子分布を実験的に求める最も直接的な方法であるX線回折法の精度が従来不十分であったため、電子分布を通じての物質の研究は、一部で地道な努力が重ねられてはいたが、見るべき成果を生んでいなかった。ところが、最近の電子機器の発達に伴って、X線回折の実験精度も著しく向上し、電子分布の研究が俄かに注目を集めるようになってきた。我が国においても幾つかのグループにより研究が進められており、その重要な研究成果の一つは金属錯体中のd電子および配位原子の電子分布に関する知見が得られることを示したことであろう。このような事情から、錯体化学者と回折法による電子分布の研究者が意見と情報を交換する機会をもつことが強く望まれることとなり、この研究会の開催が計画された。

研究会の内容はX線回折法による電子分布の測定その他、錯体の電子状態に関する理論、回折法以外の手段による実験的研究、合成と電子状態との関係等の話題からなり、それぞれ率直な報告と意見の交換が行われた。なお、回折実験により結晶構造因子を求める方法としては、不完全結晶からの積分反射強度を測定する方法、完全結晶を使ってペンデル縞の間隔を計る方法、完全結晶からの反射幅を計る方法等がある。精度の点からみれば完全結晶を使う後の二つの方法が断然優れているが、反面完全結晶の得られる物質は限られており、又、測定にも大変手数が掛かる。そのため化学的に興味ある物質中の電子分布を求めるには積分反射強度の測定に依らざるを得ないこととなる。この研究会でも不完全結晶を使用する実験のみを話題として取り上げた。

以下プログラムに従って講演題目とその内容を記す。

第1日(11月11日)

斉藤喜彦(東大・物性研) 回折法によるd電子分布の研究について。

X線回折によるd電子分布の研究が我が国で始められるに至った経緯と現在までの成果の概要が紹介された。又、原子の熱振動の問題など、回折データから電子分布を求めるに当たって注意すべき点が指摘された。

小林 宏(東工大・理) 錯体における電子分布の分子軌道法的研究

金属錯体の分子軌道計算に用いられている種々の理論が紹介され、角重なり近似やab initio の

計算でうまく説明できる実験事実の例が挙げられた。一方、Co(III)錯体などについて行われたX線回折実験では、中心金属の電気的中性が可成り良く成立しているという結果が得られているが、ab initio 計算では大きな電荷をもつという結果となること等、今後解決しなければならない問題点が指摘された。

山寺秀雄(名大・理) Angular Overlap Model の前提とその適用限界について。

取り扱いが容易であるわりに実用性が高いことで注目されている Angular Overlap Model が成立するための前提に関する明快な解説と、このモデルの適用に慎重でなければならない場合についての説明がなされた。

中村大雄(名大・理) 核四極共鳴から求めた配位子の電子密度。

$[MX_6]^{2-}$ 錯イオン(X:ハロゲン元素)のような例ではXの核四極子共鳴周波数を測定することにより、Xの負電荷量を求めることができる。一連の R_2MX_6 型錯体にこの方法を適用し、錯イオンの中心金属が可成り良く電気的中性を保っているという結果を得たこと、この電荷量と電気陰性度の関係などが報告された。

佐野博敏(都立大・理) 錯体のメスバウアー分光学的研究。

メスバウアースペクトルの化学シフト値から中心金属の原子核位置における電荷密度を求めた研究例として、フェロセン、フェリシニウム塩、フェロセノファン、フェロセノファニウム塩等一連の鉄化合物中の鉄原子の電子状態に関する研究が紹介された。又、電場勾配の温度依存性を調べることも、電子状態の研究に重要であることが指摘された。

山中高光(東大・理) Mn_3O_4 の Jahn-Teller 効果の温度変化。

常温および高温における Mn_3O_4 結晶のX線回折による精密構造解析の結果と、Jahn-Teller 歪みの関係について報告がなされた。

井上元道(名大・理) $2, 2'$ -ビピリジンのマンガン異常原子価錯体の電子状態(真の酸化数について)

ESRおよび磁化率の測定から、謂る異常原子価錯体の中心金属の真の原子価を決めた例として、表題の錯体に関する研究結果が紹介された。一般に、低原子価錯体でも中心金属は通常の原子価をもち、余分な電子は配位子に入っていると考えられることが述べられた。

斉藤一夫(東北大・理) 置換反応性と電子分布の関係 — オキソ錯体の位置選択性およびゆがみの影響 —

電子分布の測定を化学反応の研究に如何に役立て得るかが、表題の具体例について解説された。これは回折法による電子分布の研究者が今後進めるべき研究方向を示唆するものとして、興味深い話題であった。

武居文彦（東北大・金研） 第一遷移金属元素イオン結晶の成長と不完全性。

オリビン型 M_2SiO_4 およびイルメナイト $FeTiO_3$ を例に、合成条件と不完全性の関係が報告された。配位子場の影響による d 電子分布の僅かな変化を実験的に求めようとする場合、試料結晶の十分な吟味が要求される。

大場 茂（東大・物性研） $K_2Na[Co(NO_2)_6]$ 結晶中の電子密度分布。

表題の結晶中の電子分布を X 線回折法により求めた結果が報告された。 $Co(III)$ の 3 d 電子は予想される通り主に t_{2g} 軌道を占めていることが明らかにされ、亜硝酸イオンの電子分布についても興味ある結果が得られている。

島海幸四郎（東大・物性研） $CoAl_2O_4$ 結晶中の電子密度分布。

四面体配位子場にある遷移金属原子の電子分布を X 線回折法で調べた結果が報告された。結合にイオン性が強い Al_2CoO_4 の場合と共有性が強い K_2CrO_4 の場合が比較された。

藤野清志・佐々木聡・竹内慶夫（東大・理）

低対称場における d 電子状態 — Ni, Co, Fe, Mn オリビンの場合。

4 種のオリビン型 M_2SiO_4 についての X 線回折法による電子密度解析の結果が報告された。

伊藤徹三・東以和美・桜井敏雄（理研）

$\alpha-AlB_{12}$ のホウ素 20 面体型構造における結合電子分布。

非局在 3 中心結合を含む AlB_{12} 結晶中の電子分布を X 線回折法で調べた結果が報告された。得られた電子分布は類似の構造をもつ $B_{12}H_{12}^{3-}$ について CNDO/2 法により行った計算結果と良い対応を示している。

田中清明・丸茂文幸（東工大・工材研） $KCuF_3$ および二三の珪酸塩スピネル中の電子密度分布について。

Jahn-Teller 歪みをもつ $KCuF_3$ 結晶の X 線回折データを、 Cu の原子散乱因子として、 Ar 核および各 d 軌道からの寄与に分けて考えたものを用いて解析した結果が述べられた。

岩田深雪（東大・物性研） 非球対称性原子散乱因子を用いた Ni_2SiO_4 構造の精密化。

Ni_2SiO_4 , $[Co(NH_3)_6][Co(CN)_6]$, $[Co(NH_3)_6][Cr(CN)_6]$ の 3 種の結晶の回折強度を、構成原子の電子分布モデルとして球対称近似のモデル、原子軌道別に分けて取り扱うモデル、電子分布を一般展開したモデルに基いて解析し、中心金属の電荷を求めた結果が報告された。

総合討論

二日間に互る研究会の締めくくりとして、実験、理論および結果の活用の 3 点から総合的な討論が行われ、実験上の問題点、理論家から実験家に対する要望など活発な意見が出された。

最後に、この研究会を開くに当り終始御援助下さった分子研井口洋夫教授並びに同研究室の皆様
に感謝致します。

フリーラジカルおよび分子イオンの高分解能分光

分子研 広田 栄 治

化学反応の中間体として生成する短寿命分子種を高分解能、高感度分光法によって検出、同定することは、反応機構解明の基本的な問題の一つでありまた分子構造論的な観点からも興味ある主題である。本研究会は、このような構造論と反応論の接点を念頭において企画された。実際の会期はわずか 1 日（昭和 52 年 11 月 25 日、11:00-17:00）の短いものであったが、所外 16 名、所内 9 名（内 2 名併任）の参加を得て、きわめて活潑に行われた。

この研究会とその目的において密接な関連をもつ国際シンポジウムとして Free Radical Symposium があり、過去 13 回米英加等 8 ケ国で開催されてきた。今回は日本で開かれることが決っており、その主催責任者である森野米三、田中郁三両氏から、先ずこの Symposium の意義、歴史等について詳細な説明があった。次いで昭和 52 年 9 月 4-9 日英国 Lyndhurst で開かれた Symposium に出席した斉藤修二氏から、この会議の詳しい報告があった。この Symposium ではとくにレーザー、マイクロ波等の高分解能分光に力点がおかれており、斉藤氏の報告によりこの方面における諸外国の第一線の研究の現状を知ることができた。

午後は先ず島内みどり、天竺堯義両氏による招待講演が行われた。島内氏は、最近関心を集めているエキシマーレーザー、とくに XeF や KrF レーザーについて、その製作、発振特性、さらにそれを用いた分光について報告した。一方天竺氏は、アンモニア反転スペクトルのマイクロ波飽和特性から、回転（反転）運動の横緩和時間と縦緩和時間の比の決定を報告した。ここでは吸収線の M_J 依存性が問題点として指摘され、その解決には新しい方法論の開発の必要であることが確認された。

最後に分子研で進行中の不安定分子の研究が紹介された。先ず山田千樫氏は、新しい高分解能分光光源である半導体赤外レーザーを用いて測定した N_2O , CH_3F のスペクトルからこの光源の性能を論じ、次いで不安定分子 CS の $v=1 \leftarrow 0$ バンドの観測を報告した。 CS は CS_2 の低周波放電で生成した。川口建太郎氏は CO レーザー磁気共鳴分光法によるフリーラジカル NH_2 v_2 バンドの測定を行い、 v_2 状態の精密な分子定数を報告した。 NH_2 の生成にはヒドラジンと水素原

子、または NH_3 と F 原子の反応が用いられた。一方鈴木哲雄氏は分子イオン検出用のグロー放電型マイクロ波吸収セルの製作を報告した。イオン種の検出にはなお吸収セルの冷却等改良すべき点の多いことが指摘された。

不安定分子、分子イオンの検出とその精密分光については未だ充分な成果がえられていないが、いくつかの研究室で着々と準備が進められており、本研究会はその動向を探るのにきわめて有効であった。

電子相関の新しい数学的手法の開発

お茶大理・分子研 細 矢 治 夫

この共同研究の研究班は、分子研の理論の客員部門を兼担しているという事情から、研究代表者を引き受けたが、表記の研究活動の重心は共同研究者の側に大きく寄っている。すなわちそのメンバーは、金沢大理・青野茂行、理研・岩田末広、信州大繊維・渋谷泰一、大阪市大理・西本吉助、京大理・福留秀雄である。

元来電子相関 (electron correlation) という語は、専門外の人には甚だ曖昧模糊に聞こえるであろう。原子でも分子でもよいが、2 電子以上をもったある系を考え、その非相対論的全電子エネルギー (実測値から相対論的補正を逆に差し引いた値) と、その系の Hartree - Fock 限界値 (いわゆる SCF 法によるエネルギーの最良の値) の差を電子相関エネルギーとよんでいる。つまり Hartree - Fock 近似では、一つの軌道に入った二つの電子は、それぞれ相手の電子のつくる平均場の中を運動しているとして計算されるため、スピンを異にする二つの電子は実際以上に接近する確率が高くなるので、その分だけエネルギーは不安定になる。この不安定化分を正しく見積るためには、James と Coolidge (1933) が水素分子について成功したように、2 つの電子の間の距離 r_{12} を分子の波動関数の中にあらわに入れて計算するか、Hartree - Fock 法の限界か、それに近い精度の波動関数を使って配置間相互作用を行なわせるか、という大きな 2 つの方法に分かれる。

それぞれの立場に立った理論が数多く提出されているが、当面の対象をどんな化合物にとるかによって今度は 3 通りの立場に分かれる。一つはいわゆる formalism 追求型、一つは小さな分子の相関エネルギーの数値をできるだけ正確に計算する型、および大きな分子や結晶の特異的性質の本質を探る型である。

福留は、Hartree - Fock のような独立粒子近似では電子相関の問題の本質は解決できないとし

て、フェルミオンのリー環による多体問題理論という壮大な理論展開を行ないつつある。これは第 1 の型の代表的なものであろう。しかし、この理論を独習することは非常に難しい。

一方長いポリエンは、鎖の長さをいくら増しても、単結合と二重結合の交互に現れる結合交替の状態にあることが知られているが、この原因を電子の相関に結びつけることができる。この結合交替の状態を半導体というならば、結合交替が消えてすべての結合が等間隔になった状態は金属といえる。1 電子 2 中心のいわゆる共鳴積分と、2 電子 1 中心のクーロン反発積分の比がある値になると、半導体と金属の間の Peierls 転移が起こるが、Hubbard の先駆的論文や Orchinikov らの精力的な研究は第 3 の型に入るであろう。

この Hubbard モデルは、ハミルトニアン of 形こそ分子軌道の計算を行なっている者になじみやすいが、波動関数の成分の一つ一つのもつ意味や数式的処理方法は非常に難解である。

本共同研究の目的の一つは、まったく新しい数学的手法を開発する以前に、上にあげたような新しい数学的手法の消化吸収にあった。そこで 1977 年 12 月 16 日 (金)、17 日 (土) 両日、分子科学研究所に Closed 形式の少人数の会合をもった。参加者は共同研究分担の 6 名の他に、阪大教養・高橋実、分子研・諸熊奎治、塚田捷、加藤重樹、大峯巖、北浦和夫、及び京大工・中辻博、滋賀医大・平尾公彦の 8 名であった。

高橋は、1 次元、2 次元 Hubbard モデルの厳密的解法を、福留は上記の問題について、それぞれ長時間解説を行なった。岩田と大峯はポリエンの問題の新しい展開を示した。その他の参加者も各自のかかえている問題点を提起し活発な議論に終始した。

共同研究班としてのおもてだった成果は上記の研究会だけであるが、1979 年 10 月の量子化学国際会議の際の多体問題のシンポジウムの推進母体になるという大きな前進があった。

以上のような趣旨と経過の共同研究ならびに研究会であったが、その経験から分子科学研究所の共同研究と研究会の今後のやり方や方針に一つの提言を行ないたい。

理論関係の共同研究は、計算機を中心にして活動するものと、そうでないものに分かれるであろうが、特に後者の場合、研究打合わせと研究会の両方に大きなメリットがあるわけで、もしこの 2 つの活動が自由に行なえるように旅費中心の予算構成になっていれば実験装置の製作と較べれば極く僅かな予算で実のある研究が達成されることになる。

次の 2 点はすべての共同研究と研究会に当てはまることであるが、分子研の現在の制度では、分子研に在籍する研究者に何らかのかたちで人脈が研究テーマでつながりをもったテーマでなければ申請が許可にならない可能性が非常に大きい。京大の基礎物理学研究所や数理解析研究所では、研究所の人にほとんど関係のないような研究会が日常的に行なわれ、それが一つの大きな実績になっている由である。分子研の現在のやり方では、分子研内の研究者に大きな負担がかかり過ぎている

ので、共同研究系のスタッフの増強か組織の改善を行なって、研究テーマに制約や偏りの生じないような配慮がほしい。これはとりも直さず分子研の発展につながるはずである。

最後に、これはみみっちいようで実は大きな問題である。現在の分子研の研究会の旅費は、あらかじめ申請のあった有資格者（しかるべき大学や研究所に在籍）が研究会当日に印鑑を押してから約1月後に銀行振込になる。その金額もかなり切りつめた額である。研究会が成功するかしないかの成否は、その研究内容に実質的に貢献する人の参加の多寡にかかっている。そのような人達だけが集まれば、参加者全体として見たときに赤字になっても不平はどこからも出ないであろう。筆者の経験では、成功裡に終わった研究会というものは、どこで行なわれたものでも、参加者全体としては赤字になっているはずである。そういう時こそ会の世話人の腕のふるいようがあるというものであろう。しかし現在の制度では、世話人は参加者に謝ることしかできない。分子研の研究会を実のあるものにしたいものである。

これらの提言は、筆者一人の意見ではなく、今回の共同研究の一つの成果であることを付言する。

相関分子科学と動的有機化学

京大理 加 治 有 恒

昭和53年1月19～20日両日にわたって、上記研究会が分子科学研究所（実験棟）会議室及び同セミナーハウス（山手ロッジ）で開かれた。本研究会は、基礎有機化学と分子科学の研究者が、それぞれの領域について、特に動的有機化学と相関分子科学の現状と問題点を認識し合い、それらの学問領域の展望を拡げることが目的として企画され、会には分子研から3名と基礎有機グループ14名が参加した。

基礎有機化学は、構造論、反応論、及び合成論において、著しい進歩発展をとげ、その諸成果によって関連諸科学に多大の寄与をしてきた。しかし、ますます多様化する諸科学への展開や、基礎的方法論の開発、拡大化する有機化学情報類の流通処理など、今後一層重要となる諸問題をかかえている。基礎有機化学者から見れば、分子科学の発展や今後の動向をよく理解することは重要であり、一方分子科学者もその研究の具象化或いは研究素材源として、また研究展開の方向づけに関連して、基礎有機化学の進展に多大の関心を抱かざるを得ないと思われる。そこで、各領域の現状や問題点を検討し、その相互理解を深めるとともに、特に相関分子科学と動的有機化学との共同関係のあり方や、そのための効果的な研究体制等について研究することは、大いに意義のあることと考

えられる。

研究会は、各領域の研究者から、その現状と問題点などについて話題提供がなされ、これについて出席者間で質疑応答する形で進められた。まず代表者である加治より、この研究会開催の経緯、目的などについて、ほぼ上述のような説明がなされた後本題に入った。

中川正澄（阪大理）は、非古典的有機化学構造論の立場から話題を提供した。共役三重結合を含む種々の大環状クムレン類の合成例と、これがNMR時間尺度では平面共役系であって、Hückel 則に適合することを解説し、双環ないし多環性同族体では、Hückel 則を単純には適用し難い問題点のあることを指摘した。

丸山和博（京大理）は、有機光化学反応論の立場から、N-置換フタルイミド類とオレフィンとの、分子内（N-ブテニル体等）及び分子間（対スチレン）の光付加反応を中心とする有機光化学について話題を提供し、これらの反応が、反応場（溶媒、反応条件）に著しく影響され、反応系に溶媒が取り込まれる場合のあることを例示した。

加治は、有機化学合成論の立場から、生理活性をもつ α, β -不飽和カルボニル化合物類の新合成単位反応の創出を例として説明し、ラジカル性求核置換反応や、硫黄原子を含むジアニオンの反応を利用すれば、多置換同族体までも、常圧低温下で one-pot 合成が可能であることを示し、その際の立体選択性に関する問題点を指摘した。

西田進也（北大理）は、有機化学反応論の立場からの話題として、シクロプロピル基と共役したオレフィンの、テトラシアノエチレンとの付加反応を中心とする種々の反応例を示し、この種の付加は、Woodward Hoffman 則や Bartlett の極性付加の考え方等では説明し難く、電荷移動錯体を経由すると思われる新たな付加反応が見られることを指摘した。

諸熊奎治（分子研）は、大型電算機による量子化学的精密計算の現況と、その有機化学構造への適用について解説し、分子科学研究所における電算機設置計画と、これによる計算の可能性について説明した。遷移状態における原子間距離や結合角の計算まで可能となるが、一方構成原子数や反応場の影響に関して、計算上の制約が残ることを指摘した。

岩村 秀（分子研）は、他核NMRの現況と問題点について解説し、分子科学研究所に設置した機種の特長について説明、その応用分野が極めて広く、今後多くの研究が展開できることを示唆した。

井口洋夫（分子研）は、分子科学研究所の建設現況と、近い将来の完成計画及び併設の基礎生物学研究所や生理学研究所とのかかわり（事務機構等）の現況について説明し、研究所や研究機構についての話題とした。

基礎有機化学グループから、「基礎有機化学研究所（仮称）」の設立構想について話題提供があ

り、加治から概要を説明、長倉三郎（東大物性研）、湯川泰秀（阪大・東理大）から、関連共同研究所、研究機構等に関する現況について説明があった。

以上の各話題について、それぞれ活潑な質疑応答が交された。時間的制約があったにもかかわらず、基礎有機化学、分子科学両分野の研究者が共通の場で関連分野の諸問題について幅広く論議し、現在直面しつつある困難について認識するとともに、互に有効な示唆を与え合うことができた。また、討議の間に、分子間及び分子内の電子移動反応の研究や、他核NMRによる求核置換反応の解析について共同研究が提案される等の具体的な展開もあった。以上の内容により、この研究会は所期の目的に照らし、十分成果があったものと考えられる。明年度以降もこのような機会を設けられれば、両分野の研究者の相互理解を深め、各領域の進歩発展に資するところが大きいと考えられる。

なお、上記の各人以外の参加者は次の8名であった。桜井英樹（東大理）、徳丸克己（筑波大化）、大木道則（東大理）、向山光昭（東大理）、野依良治（名大理）、速水醇一（京大養）、安藤喬志（阪大産研）、都野雄甫（九大理）

以上。

極端紫外連続光源を利用した観測システム

分子研 小谷野 猪之助

ここにいう「極端紫外連続光源」とはSOR（Synchrotron Orbital Radiation）源のことである。分子科学研究所はその当初計画の一つとしてSOR施設の建設を予定しており、本研究会はそこに設置すべき観測システムということを念頭において計画された。分子研のSORを念頭においていた研究会はこれまで、昭和51年度の「極端紫外連続光源」および同52年度の岡崎コンフェレンス、[Higher Excited States of Molecules and Molecular Crystals]の二つが行われており、今回はこれらに続く三番目のものである。去る3月6～7の両日、分子科学研究所で約30名の参加のもとに行われた。

形式は非常にインフォーマルなもので、観測システムを①光電子分光観測システム、②光化学観測システム、③化学反応素過程観測システム、④分光観測システムの四つに分け、おののに主講演者一人と短い話題提供者（討論者）2～3人をおいただけのものであった。上記の四システムは“分子科学”の領域でSORを用いて今後行うべき研究についての何回かにわたる討論に基づいて設定されたものである。

以下に講演の順を追って具体的内容を記す。

3月6日（月） 午後

【光電子分光観測システム】

木村克美（北大応電研）：主講演

SORの特徴が光電子分光の研究にいかに関わられるかが原理的な面にまで立ち返って論じられ、世界におけるこの方面の仕事の紹介と共に演者の研究室における N_2O_4 やフリーラジカルのPES、水銀光増感反応系のPES、He II 光源による β 値の測定などの仕事を紹介された。SORを用いて今後行われるべき課題として、光源のエネルギーを連続的に変えた場合のイオン化断面積と角度分布の変化、分子イオンの吸収スペクトルの測定、分子ビームのPESなどの重要性が強調された。

原田義也（東大教養）：コメント

SORを用いて固体、とくに分子性固体の光電子分光を行う場合の実験上の諸問題（試料室、分析室の設計、真空、温度、試料の前処理など）が演者の経験に基づいて論じられた。

小林常利（理研）：コメント

今後行われるべき課題として、SORの波長連続性を利用したしきい電子スペクトルの重要性、PESと同時に吸収スペクトルを測定することの重要性、パルス性を利用した飛行時間法によるPESなどが強調された。試料は従来の気体、固体から液体へ拡張されるべきことも論じられた。

西嶋光昭（京大理）：コメント

固体表面の光物性研究者の立場から、表面のPESを行う場合の諸条件（表面組成、表面組成がよく定義されたものである必要、など）が論じられ、Ni 表面に吸着されたCO分子からの光電子の角度分布測定の研究例が紹介された。

【光化学観測システム】

小尾欣一（東工大理）：主講演

光化学初期過程の詳細な解説がなされ、つづいてSOR光の特性一つ一つの光化学への応用が論じられた。波長の連続性を活用するといろいろな過程の励起スペクトルが得られるが、とくに短波長まで連続光が得られることから、簡単な分子の解離励起、イオン化解離励起過程が重要な課題になることが指摘された。ほかに、パルス性に基く励起状態の寿命測定、偏光性を利用したホトフラグメント分光、けい光の偏光度の測定などの重要性が強調された。

森 雄次（東工大理）：コメント

SORはかならずしも極端紫外領域だけでなく200 nm 附近でも有効に利用されていることが指摘され、演者らの試作している183, 180 nmにおけるナノ秒パルサーとこの領域におけるSORとの比較検討がNOのけい光寿命測定を例にとって行われた。寿命測定の実験に必要な光子数の検

討から、ストーレージリング内の電流を高くすることも重要であることが指摘された。

伊吹紀男氏（京大化研）：コメント

SORを用いた実験の例として、 N_2O 、 CO_2 のイオン化解離の機構を論じた興味ある研究が紹介され、観測システムに分光的手段とあわせて質量分析法を導入することの重要性が強調された。

【化学反応素過程観測システム】

楠 勲（東北大科研）：主講演

化学反応素過程および分子エネルギー移動の研究にどのように光が用いられるかが詳細に検討された。それらは大別して、反応生成物のエネルギー分布のサーベイに用いられるもの、反応の制御に用いられるもの、および光エネルギーを反応に直接利用しているものに分けられ、おのおのについて豊富な例が挙げられると共にSORを用いる場合の展望について検討が加えられた。

伊佐公男（福井大教育）：コメント

固体表面における素過程研究の立場から、タングステン上のカリウムの滞在時間の測定、金属表面にアルカリビームを照射して電子分光を行う実験などが紹介された。

桑田敬治（阪大理）：コメント

演者らの行っている低エネルギー電子線衝撃による発光測定とSOR光を用いて同じことを行った場合との比較検討が詳細になされた。また、これらの実験におけるデータ処理（測定系のオートメーション、繰返し処理）の重要性が強調され、データ処理を介してはじめて成功した二体衝突による化学発光の実験（ $NO+O \rightarrow NO_2^* \rightarrow NO_2+h\nu$ ）が披露された。

【分光観測システム】

田仲二郎（名大理）：主講演

SORを用いたX線領域での分光研究の諸問題が、主としてDESYの仕事を例に論じられた。ついで、名大にある回転対陰極をもつ強力X線発生装置とそれを用いた実験計画が紹介され、価格の点ではるかに安いこのような装置をSORの代用として用いることはできないかという問題が提起された。

中村正年（筑波大物理）：コメント

東大核研のシンクロトロンからのSORで実際に測定を行った経験に立脚して、SORによる分光研究上の問題点が懇切に述べられた。分光器、回折格子の選定、迷光、高次光の除去の方法等、これからSORを利用しようとするものにとってきわめて有益な助言がなされた。

波岡 武（東北大科研）：コメント

分光研究上のカナメである回折格子に関する問題が詳細に論じられた。とくに、偏光異常、効率、迷光、高次光の除去について、しろうとが定量的研究を行う場合に知らずにおかし易い誤りについ

て注意を喚起された。

志田忠正（京大理）：コメント

凝縮系での光照射によるイオン化過程の問題がとりあげられ、凝縮系でのベニングイオン化の可能性、イオン化効率の波長依存と空間分布測定的重要性が論じられた。二光子を用いてカチオンの光化学を研究する可能性も述べられた。

原子・分子の電子状態の大型計算

分子研 諸 熊 奎 治

分子研計算機センターに大型計算機が54年1月から入ることが内定し、原子・分子の大型計算が日本において初めて世界的なレベルで本格的に可能となろうとしている。導入を予定されているのは、中央処理装置2台（処理能力6.5 MIPS）から成るシステムで、主記憶容量8メガバイト、ディスク記憶容量7000メガバイトを持っている。この大型計算機を有効に利用するために、全国の研究者の間での協力体制を早急に整備する必要がある。この機に際して、特に原子・分子の電子状態の大型計算に関して、現在そのためのプログラムを保持あるいは開発している研究者、実際現在電子状態の計算を行っている研究者、機会が与えられればそのような計算を行いたいと考えている研究者たちに、一堂に集まってもらい分子研計算機の概要を説明し、世界及び日本の大型計算の現状を解析し、分子研計算機利用の具体的なプロジェクトの可能性について論じるために、表記の研究会を計画した。研究会は昭和53年3月10、11日の両日、分子研会議室において所外より30余名、所内より約10名が参加して次のようなプログラムで行われた。

▷プログラム◁

3月10日（金） 13：30～17：30

分子研計算機の概要 諸熊奎治（分子研）

セッション1．電子状態大型計算プログラムの現状と展望

a．GAUSSIAN 70, MCSCF

HONDO, CI

b．JAMOL, COMICAL, ATOMCI

c． $X\alpha$ 法

d．エネルギー勾配法

山辺信一（奈教大）

岩田末広（理 研）

佐々木不可止（北大）

足立裕彦（阪 大）

加藤重樹（分子研）

e. 各大学センターの現状

東大：土方克法（電通大）

名大：秦野甯世（名 大）

九大：大旗 淳（九 大）

セッション2. 電子状態大型計算の実例

a. 電子相関

雑賀重幌（京 大）

b. ポテンシャル面

大旗 淳（九 大）

c. SUGAR PHOSPHATE

松岡 修（電通大）

d. コバルトポルフィリン

柏木 浩（分子研）

e. 分子間力

北浦和夫（分子研）

f. 表面と吸着

塚田 捷（分子研）

3月11日（土） 9:30~15:00

セッション3. 大型計算の体制作り

パネルディスカッション

司会：土方克法（電通大）

岩田末広（理 研）

山辺信一（奈教大）

米沢貞次郎（京大）

諸熊奎治（分子研）

セッション4. 大型計算のための興味ある問題

a. MCD への利用

旗野昌広（東北大）

b. 結晶内分子の電子密度分布

伊藤徹三（理 研）

c. 金属錯体と電子状態

榑 茂好（熊本大）

d. 有機反応と電子状態

笛野高之（阪 大）

e. 酵素反応機構の解明

梅山秀明（北里大）

f. ポリアミノ酸の電子状態

今村 詮（滋賀医大）

g. ab initio 計算の信頼度

岩田末広（理 研）

まず計算機センターの諸熊は導入機の主としてハードウェアについて説明した。導入機は上述の他、1600/6250 bpi 磁気テープ装置、XY プロッタ、蓄積型グラフィックディスプレイを持ち、またカードリーダー、ラインプリンタなども設置される。センター内には10ヶ以上の TSS 端末が設置されるほか、電話公衆回線を通じて所外の端末からも TSS を使用出来る。またセンターの建物に

についても説明があり、共同利用研究室5室が作られ、外部からの利用者に供されるはずである。

セッション1では現在日本で使用可能な電子状態計算プログラムについて、その構成、適用範囲、性能などが、プログラム製作または管理を行っている人々 — 山辺、岩田、佐々木、足立、加藤の各氏 — から報告された。GAUSSIAN 70 系、JAMOL 系及び $X\alpha$ 法は、いずれもプログラムがよく整備されており比較的小さい変更・拡張で分子研での大型計算に使用出来る状況にあることが明らかになった。また各大学大型計算機センターに登録されている電子状態プログラムの現状について、東大は土方氏、名大は秦野氏、九大は大旗氏から報告があった。JAMOL は北大、名大で登録されており、東大は現在準備中である。GAUSSIAN 70 は東大、名大、京大などで使用されているが登録はされていない。

セッション2では、現在までの電子状態の中、大型計算を行った例について、それぞれ経験者からの報告を聞いた。先ず雑賀氏は、多体摂動論を H_2 分子へ応用した結果について、その問題点、拡張性などを含めて説明した。大旗氏は、米国 IBM 研究所で行った水の光分解反応のポテンシャル面の ab initio CI 計算を紹介した。数ヶの励起状態を配置間相互作用で求めるのに CPU 時間は約5分だが、構造を広範囲に変えるため数百点でのポテンシャルエネルギーを必要とする大型計算である。また得られたポテンシャルを解析関数に近似して古典 trajectory を求めた。松岡氏は同じく IBM 研究所で行った sugar-phosphate-sugar 系の安定構造の ab initio 計算について報告した。これは torsional angle に対するポテンシャル面を mapping したもので、現在行われている分子の電子状態の計算中最大の規模のものといえ、超大型機で数百時間を必要とした。柏木氏は、JAMOL を用いて北大で行ったコバルトポルフィリンの計算について紹介、CPU 時間を例として、現在日本の大学の計算センターで行ないうる計算の限界と、分子研計算機によって開ける可能性を比較した。又、北浦氏は分子間相互作用の ab initio 計算例について、塚田氏は $DV-X\alpha$ 法による金属酸化物のクラスターについて計算例を紹介した。

パネルディスカッションでは、先ず電算機センターから将来計算機センター運営委員会で決められるべき運営の方針について、意見を聞きたいと発言があった後、いろいろな考え方についてパネル、会場から討論が行なわれた。主な論点は ① 利用負担金をとるべきかどうか、② プロジェクトの審査をどうすべきか、③ 共同研究との関係、④ 旅費をどうするかなどであった。

セッション3では現在日本ではまだ大規模な計算が行われていないが、近い将来活発な応用が期待されるいくつかのトピックについて、実験結果の review や小規模な計算の結果などの紹介が行われた。MCD（旗野氏）、金属錯体の電子密度分布（伊藤）、その反応性（榑）、有機反応機構（笛野）、酵素反応機構（梅山）、生体高分子（今村）などにおいて大型計算の果すべき役割について示唆が与えられた。最後、時間切れで充分余裕がとれなかったが、岩田氏が ab initio 計算の

信頼度について、最近まとめた莫大な資料を配布して説明した。

このように、分子研大型計算機の利用について電子状態大型計算の経験者、未経験者あるいは理論家、実験家が日本における現状、世界の潮流および分子研計算機導入に伴う可能性などについて討論したことは原子・分子の電子状態の大型計算のための準備の第一歩として大きな意義があった。昭和53年度には、大野公男北大教授を主提案者とする共同研究「分子科学における大型分子軌道計算」がはじめられ所内4名、所外18名の共同によってこの研究会で得られた方向づけの具体化が進められている。昭和54年1月の計算機運用開始が待たれる。

外国人研究員紹介

F. Willig 博士

分子研 井 口 洋 夫

昭和52年度の外国人招へい研究員として、我々の強い要望を受けてクリスマス直前の12月23日来所、3月29日多忙な共同研究の日程を終えて帰国の途についた。

ハンブルグ大学、ミュンヘン大学で医学・物理学を学び、ミュンヘン大学の物理化学科の助手を経て、1971年以来ベルリンにあるマックス・プランク財団のフリッツ・ハーバー研究所で研究に従事し、昨年来所直前、Habilitationを取得している。

ミュンヘン時代(1962~1970)から液体電極と有機結晶との界面に於ける電荷の注入の問題に取り組んで居り、彼の仕事を一口で云うと“有機結晶の電気化学の研究”の言葉で表現できるであろう。

ベルリンでは、H. Gerischer教授の許でその片腕として、電子移動反応(固体中、及び固-液界面などに於ける)の研究手段として有機結晶(アントラセン、ペリレンなど芳香族化合物)を用いての仕事を積重ねている。その手法はミュンヘン大学当時より行っている電極に於ける電荷のgenerationとinjectionである。(この辺の仕事の全貌はAdvances in Electrochemistry and Electrochemical Engineering 中のElectrochemistry at Organic Insulator Crystalsに詳しくまとめられている。)

3ヶ月の滞在であったが、深夜まで実験、実験の連続で、物性化学部門とはベルリンで開発中の光電子顕微鏡の電子放出機構の解明のために、アルカン及びポリエチレンの光電子放出の実験を、また基礎電子化学部門では、いくつかの有機単結晶上に単分子膜状態で吸着させた、ローダミン系の色素の蛍光寿命についての測定を、帰国前日の3月27日まで行った。

“魚が好きな(ベルリンではとれないと思うのは単純な考えか?) Willigさん”で象徴されるように、来所のその日から我々の社会に溶け込んで、何の抵抗もなかった。そして忽ち岡崎の町を、“理解”してしまった。大樹寺まで地図を片手に迷わず行ったり、山手ロッジと研究所を直線コースで結ぶルートを見つけたり(その直線上に高等学校がある!)、サンリバーと云う百貨店の中で“きんめ鯛”を見つけてバター料理にしたりして。

有機結晶の電気化学と云う面で大いに学ぶところが多かったが、一方そのInternationalな感覚から学ぶところも非常に多かった。最近手紙をもらったが、ベルリンでも毎日夜中まで実験している由である。

H. Tributsch 博士

分子研 坂 田 忠 良

3月1日より、フリッツ・ハーバー研の H. Tributsch 博士を迎えている。6月30日まで滞在予定である。

Tributsch 博士は1943年6月オーストリアの生れで、ミュンヘン工科大学 Gerischer 教授の下で「半導体電極における色素の分光増感の研究」で博士号を授与されている(1968年)。その後1969年から2年間アメリカ合衆国カリフォルニア大学の Lab. Chemical Biodynamics の M. Calvin 教授のもとで、励起クロロフィル分子の電気化学と光合成の生物エネルギー的研究を行っている。その後南米チリにわたり、チリ大学で生物エネルギー学の理論的仕事を行うとともに、チリ政府の要請で、バクテリアを利用した銅の採掘の応用研究を組織し、北部チリのアタカマ砂漠で労働者と一緒に仕事をした。その後フリッツ・ハーバー研研究員として現在に至っている。

Tributsch は、半導体による色素増感の機構に対する先駆的研究で世界的に有名であるが、他にも Oscillatory Reactions の電気化学や、バクテリアによるエネルギー変換の研究で業績を上げている。

Tributsch 博士は以上の経歴でわかるように非常に行動的で、自然の神秘に対する感受性が強く、泥くさいことにも積極的に立ちむかう気迫に満ちている。一定期間テーマに集中し、成果を上げた後、ヒマラヤ等に旅行したり、ガラパゴスの海にもぐったりして自然の息吹に触れ、英気を養うこともする。現在遷移金属カルコゲナイド(層状化合物)を使った太陽エネルギー変換の研究で画期的な成果を上げつつあるが、これらの化合物を使うことの思いつきは、バクテリアによる銅の採掘に一年間従事した経験から来たとのことである。また大衆と自然科学者との交流、応用面にも深い関心を持ち、現在まで啓蒙書を二冊出版している。一つは、生物物理の啓蒙書“*How life learned to live.*” もう一つは地震に関するもので“*When the snakes awake : Mysterious earthquake premonitory signals*”である。

同博士の分子研での仕事ぶりは非常に精力的で、朝早くから実験に集中し、疲れることを知らない。また、非常に心のひろい、暖かみの感じられる人柄で、ディスカッションをしても楽しく、いろいろ教えられることが多い。夫人は、美人であり、夫婦仲はきわめてむつまじい。将来の大成が期待される人材である。

J. C. Baird 教授

電気通信大学 土 方 克 法

去る5月8日ブラウン大学教授 James C. Baird 教授が昭和53年度分子科学研究所外国人研究員として来所された。10月7日まで滞在する予定である。

同教授は1959年テキサスのライス大学で学位を取得した後、ハーバード大学、カリフォルニア大学(バークレイ)の博士研究員を経て、1962年ブラウン大学の助教授、1971年同大学の正教授となり現在に及んでいる。

初期の研究は NO, NO₂, ClO₂ 等のスペクトルの微細構造および超微細構造の測定であるが、ハーバードで行なったオプティカルポンピングの実験は、その後のレーザー光学の嚆矢となったもので、あまりにも名高い。その後超微細構造の理論および実験に多くの業績を挙げた後、1968年には水素原子の交叉ゼーマン準位の精密測定を行なって、微細構造定数の値を決定した。爾来レーザー装置を種々開発・応用し、原子・分子の分光学に関する仕事が多いが、そのどれもが物理的に極めて興味ある内容をもっている。現在は二原子分子の基底状態の高い振動状態が、上の電子状態とエネルギー的に重なる辺りの精密測定およびその理論、またスピンのそろった H 原子の集団を生成して、Bose 粒子集団としての特徴を観測すること等に興味をもっている。

二児の父。長女の小学校が休暇になるのを待って家族を呼ぶ。温和だが、仕事に見られるようにズバリとしたことが好きな性分。目下日本料理の Cookbook を買いこみ奥さんの来る前に一通り習得しようとしている。

Jon T. Hougen 博士

分子研 広 田 栄 治

「今年 Jon Hougen が分子研に来ることになった」というと、「それは素晴らしいことだ。お前は多くのものをえることだろう」という答が例外なく返ってくる。最近私がアメリカ、カナダを訪問した折の話である。Hougen はこのように多くの人達から尊敬され、そして愛されているのである。

Herzberg さんの本、Molecular Spectra and Molecular Structure の Vol. III をお持ちでしょうか。その序文にある謝辞のところを開いて下さい。真先に Hougen の名があげられているでしょ

う。Hougen はハーバード大学でPh. D. を取得（恐らく Klemperer の研究室）した後、1960～67 年カナダNRC の Herzberg のグループに参加し、理論面を担当した。この時の彼の寄与が、上記 Vol. III にまとめられた成果の基礎をなしているのである。Hougen にとっても恐らくこの間のもっとも幸せな時期の一つであったに違いない。分子の中の様々な運動、電子、振動、回転、スピン、およびこれらの間の相互作用、また群論を用いたエネルギー単位、線強度の計算等、この時期に手がけた分子に関する基礎理論は、その後NBS (Washington) に移ってからも彼の研究の根幹をなしている。最近では Boulder のNBS の人達、特に Evenson によって観測された遠赤外レーザー磁気共鳴スペクトルの解析を行っている。とりあげられたラジカルは HO_2 、 NO_2 、 CH_2F 、 CH_2 等で、観測された複雑なスペクトルは Hougen によっではじめて正体が明らかにされたといつてよいであろう。

Hougen は理論家ではあるが、その理論は実験に密着したもので、実験家にとっては誠にありがたい存在である。私もかつて分子内の複雑な運動の解析に困っていた折、彼に教えを受けたことがあるが、説明は明快かつ懇切丁寧をきわめた。今回の来日では、現在分子構造研究系で続々観測されつつあるフリーラジカルのスペクトルの解釈に彼の援助を期待している。

Hougen は語学の才能に恵まれ、オランダ語などは方言まであやつるとのことである。日本語にも関心を持ち、勉強に励んでいるようで、分子研では日本語で討論できるのではないかと思っている。本年7月17日来所し、明年2月末まで滞在の予定である。

化学試料室について

分子研 高 谷 秀 正

化学試料室は分子研研究施設として昭和51年度に発足した。51年11月に私が名古屋大学理学部化学教室から転任し、52年10月に安田新氏が京都大学工学部工業化学教室から博士課程後期2年を中退して技官として就任した。53年3月に化学試料棟が完成し、これと期を合せて設備、備品の充実に努力して来た。以下に試料室の現状ならびに分子研における試料室の役割について私なりの考えを述べたいと思う。

分子科学が物質を対象とする学問である以上、分子研における化学試料室の果たす役割は言うまでもなく重大である。研究者が望みの量の化学物質を、望みの純度で入手できるかどうか研究の成否を左右する場合がしばしばあると言っても過言ではない。研究に必要な量の高純度物質を得る為には、従来の製造方法を根本から考え直す必要に迫られることもある。また、未知の化合物を初めて合成したり、これまでにない高純度の物質を製造したりするに至っては目的達成に研究者が注ぐ努力は大変なものである。諸外国では、このような作業を博士研究員が行なうことが多い。教授は自分が専門とする分野以外の研究者を博士研究員として雇い、彼等の助けを借りて高いレベルの研究が可能になっているように思う。分子研ではこの重要な仕事の一部を化学試料室が分担し、部門研究者の研究をサポートすることになっている。このように化学試料室は分子研における物質製造の中心的存在であり、その目的達成には、合成、反応、精製、分析等の専門家を集め、部門研究者が望む物質の製造に携わり、また製造に際して起こる諸問題の解決に適切な助言ができる体勢をもつことが必要である。勿論、試料室のスタッフは独自の研究をも進め、分子科学の発展に貢献すべきことは言うまでもない。試料室における職務の大部分をサポートする者、として技官が配置されるわけであるから、技官に対しても高い技術レベルが要求されるのは当然である。

化学試料棟建設にあたっては分子研管理局の技術陣は言うに及ばず、建築のための委員会に加わって下さった研究者の方々にも大変お世話になったことを心からお礼申し上げる。お陰で各種の特徴をもった立派な実験室が完成した。物質製造に際しては、引火性、爆発性、催涙性、発癌性等々の有害化学物質を取扱う。目的達成にはこれら物質の使用を避けることができない場合も多く、何らかの理由で使用制限がなされることは目的放棄を意味することにさえる。これら試薬の性質を十分に理解し、逆にその試薬のもつ特性を積極的に活用することが重要であり、試料室建築には安全性、衛生面で十分な配慮がなされたと言える。主なものを挙げると、(1)排水系をすべて二系列とし化学排水は廃水処理施設に、小規模冷却水は一般水系に流すこととした。(2)ストックルームには

耐震薬品庫を入れ、腐蝕性ガス発生物質貯蔵用にウォークインドラフトを設置した。また、ハロン自動消火装置を採用した。(3)ドラフトは有害ガスを洗浄除去するためすべてスクラパー付とし、空調時のエアバランス保持のためにエアーカーテン方式を採用した。(4)実験室内換気用に給気、排気ダクトを設け1時間あたり3～4回の換気能力をもたせた。(5)実験室入口内部に緊急シャワーを、また廊下に洗眼器を設けた。(6)ベランダを設け、脱出用扉を付けた。(7)排煙用小窓を設けた。(8)屋外にボンベ庫を設け、特殊ガス（アルゴン、窒素、酸素）を集中配管した。(9)水素使用室（2室）の天井を水素が自然に排出される構造にした。(10)高压実験室を一般実験室と分離した。機能面でも多くの工夫がなされている。屋上に太陽熱集熱器が設置されており（赤松所長のご発案によると同っている）、機器洗浄用に40±5℃の湯が1日2.5t利用できる。

ドラフトの導入、室内各種配管工事等に若干の時期的遅れを感じる。また、結晶育成、精製、研磨機器、原子吸光をはじめとする元素分析機器類の導入等が今後の問題として残っているが、物質供給の中心としての化学試料室の環境作りは急速に進んでいると言って良い。

今後は、やがて迎えるであろう分子研の研究活動の極大期に合せて有能な技官を養成して行くことが試料室の最も重要な課題である。

昭和52年度共同研究について

分子研 井口 洋 夫

昭和52年度の共同研究の実施は、そのシステムの輪郭をかためる時期であったように思われる。或は言葉を換えると、その器の形や大小を決める時期であったのかも知れない、しかし、所内研究者の充足がこれからと云う時期のいまは、試行錯誤をいま暫く繰返しながら、共同利用の成果を問うようにして行くのがよいのではないかと考えている。

現在の共同研究の組立ては、次のようになっている。

		募 集 方 法	
共同研究	共同研究	→ 年1回	1～2月
	協力研究	→ 年2回	1～2月 7～8月
	招へい協力研究	→ 年2回	1～2月 7～8月
	所長招へい協力研究	→	一定の予算枠内で随時
	研究会	→ 年2回	1～2月 7～8月
	施設利用	→	一定の予算枠内随時

所で、これらの中で、共同研究（数名の所内外の研究者により、特定の課題について行う研究）協力研究（所内外の研究者が相互に協力して行う研究）の位置づけは、これからの具体的な共同研究の実施を通して定着すると考えているが、施設利用とは、明確に一線を画して進んだ方がよいのではないかとする声が多い。

例えば前二者については、その計画、実施及び発表についても、その協力の意味が充分反映されるように、推進されるべきであろう。一方施設利用は、研究所側としては受身の立場で、その成果を期待するものであろう。

研究会も50年、51年と年次を追って、一つのパターンが出来上りつつあるように思われる。それは決して内容を固定化すると云う意味ではないが。研究棟の中にゼミナー室も出来上り、運営も楽になると共に、内容も充実し、月1回程度の開催になりつつある。しかし、開催回数は、研究系、研究施設の充足をにらみながら、検討して行くべき問題であろう。

共同研究の実施にあたってのもう一つの問題点は、研究所が大都会——特に東京・京阪——を離

れてつくられていると云う点である。名古屋地区の大学・研究機関を除いて、大半の研究者の来所が、宿泊並びに旅費を伴うことである。

まづ宿泊については、山手ロッジの利用が多くの方々の努力によって、一段と便利になったことを報告上げたい。本レターズ No 3 で述べたように、旧愛知教育大学の宿泊施設を全面的に改修してつくりあげた共同研究者宿泊施設（山手ロッジと呼称している。研究所から徒歩10分）には個室（2人で共用することもある）11、長期滞在用家族室（大小）6室より成っている。そして、この5月から、管理局の支援によって、朝食のサービスが開始された。しかし、分子科学研究所、生物科学総合研究機構の充足は、これらの収容能力を超過することが目に見えており、管理局が中心となって、その拡大の方策を探っている。

旅費については、共同研究としての一定の枠があり、多くの希望をさばき切れず、その大巾な削減を余儀なくされている。そして、そこに選考と研究者の自主的な協力が求められるが、電子計算機の本格的稼動を来年1月にひかえて、この旅費問題を何とか乗り越えて、都会を離れた共同研究機関独自の共同研究のパターンをつくり上げたいと思っている。

技術課が主体となって行っている技術研究会の第6回目が6月2日に開催され、技術者の生の成果を出し合って盛況を極めた。この技術研究会については別に触れられるであろう。

なお昭和52年度の共同研究の実施状況を次にまとめて掲げることとする。

昭和52年度共同研究一覧表

共同研究

○近紫外可変波長コヒーレント光源の開発

○東京大学工	清水 富士夫
東京大学理	霜 田 光 一
東京大学理	上 田 芳 文
分子科学研	広 田 栄 治
分子科学研	斎 藤 修 二

○電子相関の取扱いに関する新しい数学的手法の開発

○お茶の水大学理	細 矢 治 夫
理 化 学 研	岩 田 末 廣
京 都 大 学 理	福 留 秀 雄

金 沢 大 学 理

大阪市立大学理

信 州 大 学 理

青 野 茂 行

西 本 吉 助

渋谷 泰 一

○不安定分子および分子イオンの分光学的研究

○分子科学研

東京大学工

富山大学理

東京工業試験所

東京工業試験所

理 化 学 研

九州大学理

九州大学理

相模中央化学研

相模中央化学研

東京工業大学資源化学研

東京大学理

分子科学研

分子科学研

広 田 栄 治

清水 富士夫

高 木 光司郎

松 村 知

竹 尾 陽 敏

高 見 道 生

田 中 武 彦

田 中 桂 一

上 原 博 通

谷 本 光 敏

広 瀬 千 秋

天 埜 堯 義

斎 藤 修 二

小谷野 猪之助

○固体表面における吸着の理論

○分子科学研

大阪大学工

北海道大学触媒研

北海道大学触媒研理学研究科

九州大学教養

大阪大学理

大阪大学理

東京大学物性研

東京大学物性研

大阪大学工

大阪大学工

分子科学研

塚 田 捷

井 本 正 介

戸 谷 富 久

伊 藤 洋 行

甲 木 伸 一

金 森 順次郎

寺 倉 清 之

菅 野 暁

村 田 好 正

足 立 裕 彦

田 辺 哲 朗

諸 熊 奎 治

○振動構造を考慮した化学反応路の理論的研究

○京 都 大 学 工	山 辺 時 雄
京 都 大 学 工	藤 本 博
京都大学工研究生	加 藤 重 樹
京都大学工学研究科	湊 敏
分 子 科 学 研	諸 熊 奎 治

○Time- Dependent 理論の将来計画

○電 気 通 信 大 学	土 方 克 法
京 都 大 学 工	中 辻 博
東 京 大 学 工	渡 部 力
東 京 大 学 工	中 村 宏 樹
東 北 大 学 理	安 積 徹
大阪大学基礎工	笛 野 高 之
東京大学宇宙航空研	市 川 行 和
東京大学宇宙航空研	島 村 勲
北 海 道 大 学 理	柏 木 浩
分 子 科 学 研	諸 熊 奎 治

○高光伝導性有機化合物 (テトラベンゾペリレン) の物性研究

○分 子 科 学 研	井 口 洋 夫
東 邦 大 学 理	青 木 淳 治
電 気 通 信 大 学	佐 野 瑞 香
お茶の水大学理	丸 山 有 成
明星大学理工	岩 島 聡
学習院大学理	小 谷 正 博
東 邦 大 学 理	竹 川 実
分 子 科 学 研	石 井 菊次郎

○酵素ヒドロゲナーゼの作用機作とその電極反応

○分 子 科 学 研	井 口 洋 夫
静 岡 大 学 教 育	八 木 達 彦
東京大学物性研	大 野 和 郎
東京大学物性研	田 村 正 平

横浜国立大学工	仁 木 克 己
虎 の 門 病 院	北 村 元 仕
分 子 科 学 研	塚 田 捷
分 子 科 学 研	木 村 啓 作

○新しい不斉ホスフィン配位子の合成とそれを用いる立体選択的有機合成反応の開発

○分 子 科 学 研	高 谷 秀 正
名 古 屋 大 学 理	野 依 良 治
名 古 屋 大 学 理	早 川 芳 宏
名古屋大学理学研究科	山 川 仁

○固体表面における吸着物質の構造・物性および反応性

○大阪大学基礎工	坪 村 宏
大阪大学基礎工	山 本 直 登
大阪大学基礎工	松 村 道 雄
大阪大学基礎工学研究科	大 西 敏 博
東 北 大 学 工	末 高 治
東 北 大 学 工	八 田 有 尹
東 北 大 学 工	伊 藤 正 時
関西学院大学理	山 田 晴 河
関西学院大学理	佐 伯 雅 夫
分 子 科 学 研	坂 田 忠 良
分 子 科 学 研	川 合 知 二

(○印：提案代表者)

協力研究

[前期]

○Exciplex の反応性

大阪市立大学理	西 本 吉 助
---------	---------

○エキサイプレックス系における電子移動および水素移動素過程の研究

大阪大学基礎工	又 賀 昇
---------	-------

○蛋白質薄膜の調整とその電気伝導度の測定

都城工業高等専門学校	中 原 祐 典
------------	---------

○光合成の初期光化学反応の研究

東京大学理学系研究科 林 秀 則

○固体表面上への原子・分子の吸着の機構

東京大学物性研 高 橋 慶 紀

○固体表面の電子構造の理論

大阪大学基礎工 永 吉 秀 夫

○光合成の初期光化学反応の研究

東京大学理 森 田 茂 廣

○有機化合物の構造および反応性に関する理論的研究

奈良教育大学 山 辺 信 一

○有機固体内電子の減衰距離

城西大学理 日 野 照 純

○環状共役化合物の電子状態と芳香族性の決定

北海道大学理 相 原 惇 一

○ポルフィリン結晶と水の界面における光励起による電荷の分離過程

東京大学理 相 馬 光 之

○色素の可視紫外スペクトルに対する吸着等の効果

東 邦 大 学 理 梶 原 峻

○多重 p・n 接合表面の構造・吸着および反応性——電極反応および気相不均一反応に対する応用

東京大学理 近 藤 保

○シーストランス光異性化の理論的研究

理 化 学 研 岩 田 末 廣

○イオン—分子反応による星間分子生成の機構

東京工業大学理 山 崎 秀 郎

○ヘテロ環式有機化合物の電子構造の研究

徳島大学教養 吉 川 研 一

[後期]

○量子化学的手法による動的原子分子過程の研究

東京大学宇宙航空研 島 村 勲

○分子の解離励起による高励起原子分子の生成

東京大学理 福 山 力

○固体表面の凸凹の表面電子状態への影響

電気通信大学 神 原 武 志

○色素の可視紫外スペクトルに対する吸着等の効果

東 邦 大 学 理 梶 原 峻

○アセチレンの励起状態の物性

理 化 学 研 野 村 興 雄

○分子の解離励起による高励起原子分子の生成

東京大学理 近 藤 保

○オキソカーボン類の電子状態の研究

北海道大学理 相 原 惇 一

○有機固体内電子の減衰距離

城西大学理 日 野 照 純

○新しい電子物性を持つ有機物固体の研究

お茶の水大学理 丸 山 有 成

○イオン—分子反応と高密度星間雲における分子進化

京都大学理学研究科 鈴 木 博 子

○化学修飾電極表面の光電子分光法による研究

東北大学薬 藤 平 正 道

○イオン—分子反応 $N_2^+ + H_2 \rightarrow N_2 H^+ + H$ における振動エネルギーの効果

東京工業大学理工学研究科 本 間 健 二

○黒鉛層間化合物の化学反応性および物性

京都薬科大学 大 橋 憲 太 郎

○二酸化塩素の高分解能赤外スペクトル

東京大学薬 浜 田 嘉 昭

○クラスター展開法による新しい変分波動関数の決定と応用

滋賀医科大学 平 尾 公 彦

○分子間相互作用の分子軌道法的研究

北 里 大 学 薬 梅 山 秀 明

○ポルフィリン結晶と水の界面における光励起による電荷の分離過程

東京大学理 相馬光之

○イオン-分子反応による星間分子生成の研究

東京工業大学理 山崎秀郎

招へい協力研究

○高分解能分子分光による精密分子構造

東京大理学 中川 徹

○可変周波数赤外レーザーを用いた高分解能分子分光

東京都立大学理 藤山常毅

○スピントリップラマンレーザーなど周波数可変赤外レーザー分光器の開発

東芝総合研 後藤顕也

○レーザー研究の現状と将来

工業技術院電子技術総合研 黒田寛人

○芳香族分子のビーム化

富山大学薬 北川泰司

○化学変化を伴う物質の光電子分光

東京大学教養 原田義也

○電極反応を通してのエネルギー変換

東北大学薬 藤平正道

○酵素の電極反応

東北大学薬 T. Kuwana

○極低温下表面物性解析装置の開発

東京大学物性研 村田好正

○ジョセフソン・ジャンクションを用いたミリ波検出器の開発

理化学研 太田 浩

研究会

○光エネルギーの化学的利用

筑波大学化学 徳丸克己

○物質探索

分子科学研 井口洋夫

○イオン結晶および錯体におけるd電子状態

東京工業大学工業材料研 丸茂文幸

○フリーラジカルおよび分子イオンの高分解能分光

分子科学研 広田栄治

○極端紫外連続光源を利用した観測システム

分子科学研 井口洋夫

○相関分子科学と動的有機化学

京都大学理 加治有恒

○レーザーを中心とした大型設備について

分子科学研 吉原経太郎

○分子の電子状態の大型計算について

分子科学研 諸熊奎治

○グラファイト層間化合物 …… その物理と化学

分子科学研 井口洋夫

他に、所長招へい協力研究(10件)及び施設利用(37件)を実施。

分子研コロキウム

所内コロキウム、第30回以降の題目演者は次の通りです。

- 第30回 9月21日 (1977)
 π 電子系の励起状態 (大峰 巖)
- 第31回 9月28日 (1977)
 赤外レーザー分光～シュタルク分光, 磁気共鳴 (川口建太郎)
- 第32回 10月5日 (1977)
 Cis-trans 光異性化の反応機構 (特にスチルベンについて) (住谷 実)
- 第33回 10月19日 (1977)
 Gradient 法を用いた反応過程の記述について (加藤 重樹)
- 第34回 10月26日 (1977)
 有用な天然物合成に役立つ新反応の開発 (安田 新)
- 第35回 11月2日 (1977)
 何故分子は相互作用するか? (諸熊 奎治)
- 第36回 11月16日 (1977)
 アルカリハライドにおける励起子の格子緩和と色中心生成 (谷村 克己)
- 第37回 12月14日 (1977)
 数え上げ多項式 (細矢 治夫)
- 第38回 1月11日 (1978)
 乱れた格子をもつ磁性体 $\text{Ni}_p\text{Mg}_{(1-p)}(\text{OH})_2$ の磁気的挙動 (榎 敏明)
- 第39回 1月18日 (1978)
 誘電媒質中のコヒーレントな光パルスの伝播 (秋元 興一)
- 第40回 1月25日 (1978)
 レーザーの周波数・波長測定について (清水富士夫)
- 第41回 2月1日 (1978)
 Σ/Π 相互作用を考慮した π 電子系励起状態の半経験的分子軌道法 (北浦 和夫)
- 第42回 2月8日 (1978)
 遷移金属錯体の旋光能と構造 (斎藤 喜彦)
- 第43回 2月22日 (1978)

鉄族錯体吸収線スペクトルに現われるヤーンテラー効果とエキシトン (辻川 郁二)

- 第44回 3月1日 (1978)
 新しい光学活性二座配位ホスフィンの合成およびそれを用いた不斉合成 (相地 敏明)
- 第45回 3月8日 (1978)
 Organic molecular crystals as probe for electron transfer reactions
 (Frank Willig)
- 第46回 3月15日 (1978)
 Electrochemical solar cells : Developement trends and chances
 (Helmut Tributsch)
- 第47回 3月22日 (1978)
 半導体レーザーを光源とした分子分光 (広田 栄治)
- 第48回 3月29日 (1978)
 長寿命励起原子を“光源”とする“光化学” (朽津 耕三)
- 第49回 4月19日 (1978)
 Rotational isomerism in allylamine (Ivan Bot Skor)
- 第50回 5月11日 (1978)
 Investigation of the ionization properties of small molecules by electron spectroscopy (Andrew I. Yench a)

編集後記

本冊子は広く分子科学研究者の意見を交えるための“レター”を交換する場である。したがって分子科学研究上の問題点や分子科学研究の基盤に立った社会への提言等が発表されることを期待している。その意味において本号では“提言”として赤松所長の論文“水素経済か。プルトニウム経済か。”は分子科学者にとってのみならず、広く一般にも与えるインパクトは大きいと考える。今後も高い見地からの提言が寄せられることを期待している。

本冊子のもう一つの目的は分子研の活動状況を分子科学研究者に知らせることである。この意味において本号より共同研究に関する報告をこれまでより詳しく掲載することとした。共同研究もいよいよ軌道に乗りつつある。この点を見ていただければ幸いである。

前号出版から変わったことは一つは建物の充実である。本年3月に研究棟、化学試料室棟、機器センター棟、装置開発室棟の4棟が完成した。4月12日に分子科学の生みの親とも云うべき、R. S. マリケン教授を迎えて、講演をしていただき、研究棟の“こけら落とし”ができたことは望外の幸であった。人員の充実は遅々としているが進んでいる。管理局の方ではこれまで研究所創設の労をとり、研究者と日夜労苦を共にした何名かの方々が辞めてゆかれた。年間の日曜休日出勤率約 $\frac{1}{3}$ 、宿直数知れずに3年近くを過した人もいる。これらの方々の縁の下での努力があつてはじめて研究所創設のプロセスが進行していることを記して、感謝の意を表したい。

[吉原・斎藤記]

◎交通機関

東京方面より

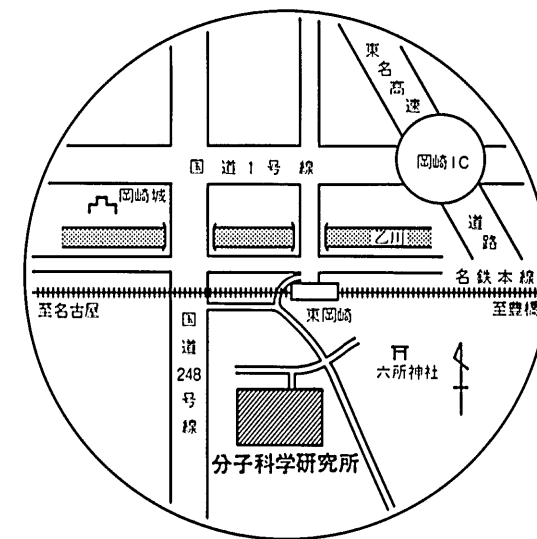
新幹線 豊橋駅下車

名鉄本線 豊橋 - 東岡崎 (所要時間25分)

大阪方面より

新幹線 名古屋駅下車

名鉄本線 名古屋 - 東岡崎 (所要時間35分)



分子科学研究所

〒444 岡崎市明大寺町西郷中38

代表電話番号 (0564) 52-9770

《時間外直通電話番号》

理論研究系	(53) 4660
分子構造研究系	(52) 9722
電子構造研究系	(52) 9720
分子集団研究系	(52) 9721
相関領域研究系	(53) 5721
電子計算機センター	(53) 5722
極低温センター	(53) 5720
機器センター	(53) 5727
化学試料室	(53) 5728
装置開発室	(53) 5729

