

分子研 レターズ

40

Issue of July 1999

巻頭言

雑感……伊藤光男

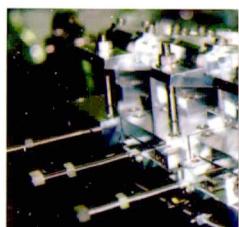
研究紹介

タンパク質分子の折り畳み問題……

岡本祐幸／金属酵素の作用機構を分子レベルで研究する……渡辺芳人

レターズ

夢のあとに……花崎一郎



表紙写真説明

右上；分子研研究会“2010年の分子科学を語る”インフォーマルミーティングの様子

（本文23ページからに関連記事）

左下；放射光用光学部品（装置開発室製作）

右下；初夏の分子研

雑感

分子研レターズの巻頭言は格調の高いものでなければならないし、ましてかって所長をつとめた者は分子研、分子科学、ひいては日本の学術研究について一家言をもち、それを披瀝することが期待されるでしょう。しかし、私は確固たる哲学や信念をもちあわせていませんし、自分の無能を棚にあげて人様に教訓めいた事を言える柄でもありません。それにしても、私のような者がよくも所長が務まつたものと感心している次第です。これもひとえに皆さんに助けていただいたお蔭と感謝しています。

考えてみると、この6年間、所長として分子研に貢献したという実感は全くありません。分子研は優秀でしかも意欲的な研究者で溢れています、黙っていても彼らの研究活動で分子研の株が上がってゆく構図ができます。分子研の研究にたいして批判的な声も耳にしますが、彼らの自由奔放さこそが新しいものを産み出す原動力であり、黙って見ているのが所長の勤めと思いました。要するに所長は何もしなくてよいわけで、ある意味では一番楽な仕事だったと思います。

所長をやめる時には、分子研に私の存在の痕跡を一切残すまいと常々思っていましたが、心配しなくとも何も残っていないようです。ただ一つこだわったのが“一銭洋食”です。分子研でのいろいろな集まり、花火観賞会、助手会、大学院生会、技官や事務官との飲み会、多くの研究室のコンパ等に呼ばれるたびに“一銭洋食”的普及につとめ、その結果かなりの若い連中に免許皆伝を与えることができるようになりました、この“一銭洋食”だけは分子研にのこるかなーとひそかに喜んでいました。ところが、所長退任前のあるコンパで一番弟子が私のために習熟した“一銭洋食”的腕前を披露してくれた時、最も重要な材料を忘れているのを発見し、結局、これも残らないだろうなーと思った次第です。このようなわけで、私自身は分子研に何も残せませんでしたが、私は分子研からたくさんのものを頂いたと心から感謝しています。

最後に少し真面目な話ですが、現在、独立行政法人化の問題が分子研のような大学共同利用研究機関、ひいては国立大学にも及ぼうとしています。これについて論じるつもりはありませんが、ある意味で日本の学術研究、大学教育が未曾有の危機に直面していると言っても過言ではないと思います。しかし、不思議なのは、これほどの大きな問題に対して、大学人の動きがほとんど無いことです。私は、独法化そのものより大学人の無反応、無表情のほうが怖い気がしています。

とりとめもないことを書きました。新所長のもとでの分子研のますますの発展を祈っています。

伊藤光男

分子研レターズ 40 目次

巻頭言

雑 感

伊藤 光男 1

研究紹介

- タンパク質分子の折り畳み問題 岡本 祐幸 4
 金属酵素の作用機構を分子レベルで研究する 渡辺 芳人 8

研究室紹介

- 分子物質開発研究センター 融合物質開発研究部 (藤井グループ)
 藤井 浩 11
 分子集団研究系 物性化学研究部門 (中村グループ)
 中村 敏和 13

流動研究部門紹介

- 相関領域研究系 分子クラスター研究部門 (田中グループ)
 田中 桂一 16
 相関領域研究系 分子クラスター研究部門 (長門グループ)
 長門 研吉 19

レターズ

- 夢のあとに 花崎 一郎 21

ニュース

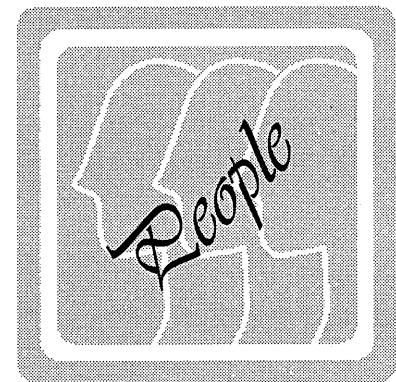
- 分子研研究会 “2010年の分子科学を語る” 北川 槟三 23
 700回を迎えた分子研コロキウム 谷村吉隆・宮島清一 25

分子研を去るにあたり

- 分子研UVSORでの4年半 木下 豊彦 27
 とても濃い分子研 (ファクター3の違い) 信定 克幸 29
 心地よい思い出とともに 藤田 誠 30

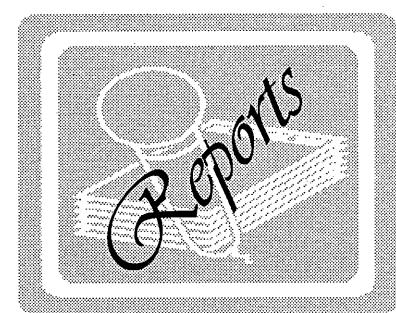
外国人研究員の印象記

- My Stay at the Institute for Molecular Science in Okazaki
 Marek J. Wójcik 31
 New experiences at IMS Lars G. M. Pettersson 32
 My Impressions of Institute for Molecular Science
 S. Umapathy 33



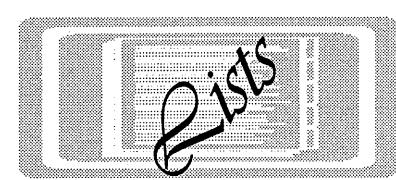
受賞者紹介

| | |
|------------------------------|----|
| 田中晃二教授に日本化学会学術賞 | 34 |
| 鹿野田一司助教授に日本 IBM科学賞 | 35 |
| 森田紀夫助教授に松尾学術賞 | 36 |
| 高橋雅樹博士に井上研究奨励賞 | 37 |
| 客員外国人研究員の紹介 | |
| Prof. Tembe, B. L. | 38 |
| Prof. Bu, Xian-He | 38 |
| 外国人研究者の自己紹介 | |
| 新任者自己紹介 | 44 |
| 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 | 54 |
| 平成 11 年度（4 月入学）新入生紹介 | 55 |



IMS マシン成果報告

| | |
|--------------------|----|
| 中赤外一次元検出器 | 56 |
| 岡崎コンファレンス報告 | |
| 第 62 回岡崎コンファレンス | 58 |
| 第 63 回岡崎コンファレンス | 64 |
| 研究会報告 | |
| 国際研究協力事業報告 | 70 |
| | 75 |



| | |
|------------------------|----|
| 分子研コロキウム・分子科学フォーラム開催一覧 | 82 |
| 共同研究実施一覧 | 83 |
| 海外渡航一覧 | 89 |
| 人事異動一覧 | 91 |

編集後記

96

タンパク質分子の折り畳み問題

岡 本 祐 幸

私が奈良女子大学理学部から分子研の理論研究系に転任してきたのは、1995年4月で、ちょうど4年が経ったところです。最初の1年間は私1人の研究室でしたが、2年目には、助手として、スイス連邦工科大学スーパーコンピューター研究所から、Ulrich Hansmannさんを、IMS Fellowとして、東京大学大学院農学生命科学研究科から学位を取得した升屋正人さんを、そして、特別研究生として、奈良女子大学大学院理学研究科から光武亜代理さんを迎えた、4人の研究室となりました。3年目には、光武さんと、東京大学大学院理学研究科化学専攻の修士課程を修了した、大塚博史さんの2人が総合研究大学院大学に入学して、私の指導を受けることになり、合計5人となりましたが、3年目も終りに近くなると、升屋さんが鹿児島大学工学部の助手に、また、HansmannさんがMichigan Technological UniversityのAssistant Professorにと、そろって転出しました。4年目の昨年度は、京都大学大学院理学研究科化学専攻から学位を取得し、理化研究所で博士研究員をしていた杉田有治さんを9月に助手として、また、慶應義塾大学大学院理工学研究科から学位を取得した西川武志さんを10月に未来開拓プロジェクトのリサーチ・アソシエイトとして迎え、再び5人の研究室となりました。

4年目の大きな変化と言えば、昨年7月から、学振の未来開拓の計算科学の分野で、「第一原理からのタンパク質の立体構造予測シミュレーション法の開発」というプロジェクトを立ち上げたことです。計算手法・溶媒・電子状態の3つの班に分け、理論第4の平田文男教授に溶媒班の班長を、計算機セン

ターの青柳睦助教授に電子状態班の班長をやって頂いています。

さて、それでは、私の研究室の研究紹介を始めましょう。

まず、1995年1月、私が現在の職を得るための面談で申し上げた、「今後の研究計画」は以下の通りです。

1. 小タンパク質分子の第一原理からの立体構造予測
2. マルチカノニカル法の分子動力学法版の開発
3. 新しい大行列の対角化法の開発

4年たった今、2つ目と3つ目は完了しましたが、1つ目の項目は進展はしているが、未だ道半ばというところです。

1つ目と2つ目の項目は関係していますが、3つ目はその2つとは無関係ですので、先に説明します。分子研に着任する前に私がブラウン大学のMarisさんと作った大行列の対角化法¹⁾は、調和振動子の運動方程式を数値的に解く時に現れる発散解を利用するものでしたが、今度はシュレーディンガー方程式を数値的に解く時に現れる発散解を利用するものを開発したのです²⁾。理化研究所の飯高敏晃さんと光武さんとの共同研究でした。以前の方法は最大固有値か最小固有値しか求められないのに対し、新しい方法はそれ以外にも任意の区間の固有値も求められるように拡張されたものです。

2つ目の項目についてですが、私がタンパク質の立体構造予測の問題で使ってきた主なシミュレーション手法は徐冷法(simulated annealing)とマルチカノニカル法(multicanonical algorithm)ですが、モンテカルロ法として用いてきました。しかし、タンパ



ク質の立体構造予測の分野ではモンテカルロ法よりも分子動力学法の方がより広く使われています。徐冷法の分子動力学法版は簡単に実現できるのですが、マルチカノニカル法の方はそれ程自明ではありませんでした。よって、何とかマルチカノニカル法の分子動力学法版を開発したいと思っていたのです。これは結局、(我々を含む) 3つの研究グループが成し遂げました³⁻⁵⁾。

それでは、第一項目についてもう少し詳しく述べて行きましょう。タンパク質の自然の立体構造(自由エネルギーが最小の状態)をそのアミノ酸配列の情報のみから予測することを、第一原理からの立体構造予測と呼びます。この問題はタンパク質が細胞内で合成される事実を考えるとき、環境因子が複雑すぎて、一見、理論家の挑戦を絶望的に退けているように思われます。しかし、1960年代初頭の所謂 Anfinsen の実験は、試験管内でタンパク質の変性状態から自然の立体構造を再構築するものであり、細胞内のもろもろの複雑な環境因子を忘れて良いことを示唆しました。よって、この実験は、計算機シミュレーションによってタンパク質の立体構造予測が可能であるという希望を多くの理論家に与えましたが、現在に至るまで、第一原理からの構造予測は解決不可能な難問とされています。

第一原理からのタンパク質の立体構造予測に成功するために必要な要素は二つあると考えられます。一つはタンパク質の系の正確なエネルギー関数を用いることです。この内で、特に溶媒の寄与が、計算時間を含めて問題の困難さを際立たせています。また、電子状態がタンパク質の構造に依存して大きく

変わらかども避けは通れない点検事項です。二つ目の要素はエネルギー極小状態に留まってしまわない、強力で効率的なシミュレーション法を導入することです。タンパク質の系は自由度が非常に大きく、必然的にそのエネルギー関数には無数に極小状態が存在するのです。これら二つの要素がうまく満たされたとき、第一原理からの構造予測が成功すると考えられます。

溶媒の寄与については、精度のレベルによって、いろいろな取り入れ方があります。例えば、最も単純なものでは、距離に依存した誘電率をタンパク質の構造エネルギーの静電相互作用項で使う方法があります(レベル1の溶媒効果と呼びましょう)⁶⁾。二つ目の例としては、タンパク質分子の溶媒接触表面積に比例した項を溶媒和自由エネルギーとするものです(レベル2の溶媒効果)⁷⁾。最後に、最も厳密な溶媒の寄与の取り入れ方としては、例えば、液体の統計力学に基づいたRISM理論による溶媒和自由エネルギー項が考えられます(レベル3の溶媒効果)⁸⁾。

エネルギー極小状態に留まらないモンテカルロ法としては、我々は徐冷法(simulated annealing)及び拡張アンサンブル法(generalized-ensemble algorithms)(例えば、マルチカノニカル法)を適用してきました^{9,10)}。

徐冷法は物質の結晶を作る過程に基づいています。すなわち、十分高温でシミュレーションを始め、シミュレーションを通じて徐々に温度を下げて行き、最終的に最小エネルギー状態(結晶)に到達しようとする方法です。

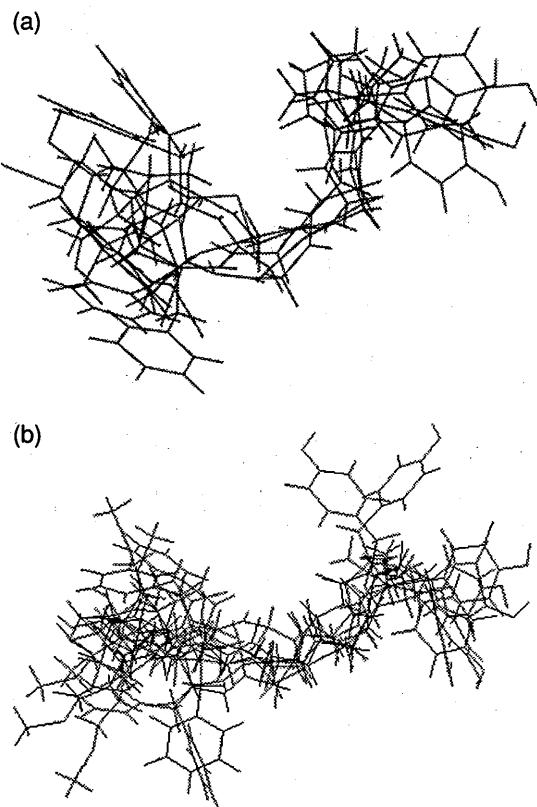


図 1 Met-enkephalin の NMR 実験のデータを精密化した 5 つの構造を重ね合わせたもの(a)と RISM によって溶媒効果を取り入れた徐冷シミュレーションの 8 回の試行で得られた 8 つの最小エネルギー構造を重ね合わせたもの(b)

拡張アンサンブル法は、エネルギー空間上的一次元駆歩を実現する手法です。よって、シミュレーションが途中でどんなエネルギー極小状態に入ってしまっても、それに留まることなく、まんべんなく配置空間をサンプルできます。拡張アンサンブル法の利点は唯一回のシミュレーションの結果から、最小エネルギー状態ばかりでなく、任意の温度における熱力学量が得られることです。

ここで、徐冷法及び拡張アンサンブル法による、筆者等の計算結果を紹介しましょう。全てのシミュレーションはランダムな初期構造から始められました。

図 2 Ribonuclease A の X 線実験で決められた構造の C-peptide の部分(a)と距離に依存した誘電率を導入したマルチカノニカル法で得られた C-peptide の最小エネルギー構造(b)

最初の例は 5 個のアミノ酸からなる Met-enkephalin です。我々は RISM で溶媒効果を取り入れて、徐冷シミュレーションを実行しました¹¹⁾。これは、京都大学エネルギー理工学研究所の木下正弘さん及び平田さんとの共同研究です。図 1 に NMR 実験の結果から示唆された 5 つの構造を重ね合わせたもの (図 1 (a)) と、8 回の独立な徐冷法で得られた構造を重ね合わせたもの (図 1 (b)) とを示しましたが、両者が非常に似ているのは自明でしょう。また、溶媒効果を取り入れると、一定構造への収束が加速されることも示唆されました¹¹⁾。

次の例は ribonuclease A の C-peptide です (アミノ酸数 13)。我々はレベル 1 の溶媒効果を取り入れて、マルチカノニカルシミュレーションを実行しました¹²⁾。

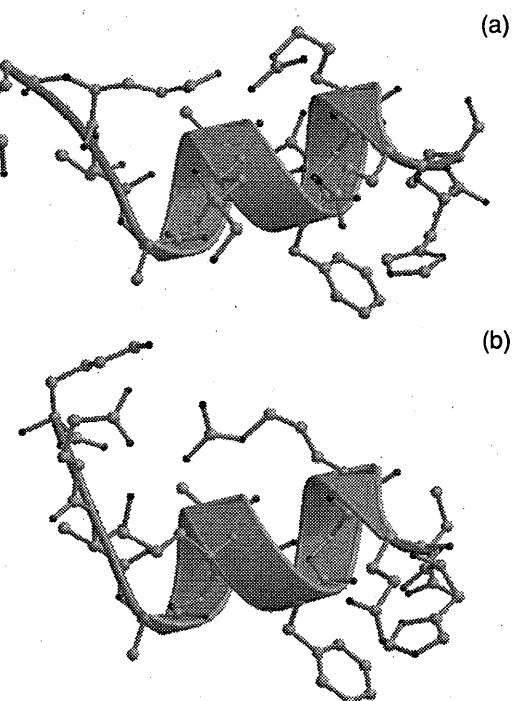


図3 BPTIのX線実験で決められた構造の残基16-36の部分(a)と溶媒接触表面積に比例する項を導入した徐冷法で得られたBPTI(16-36)の最小エネルギー構造(b)



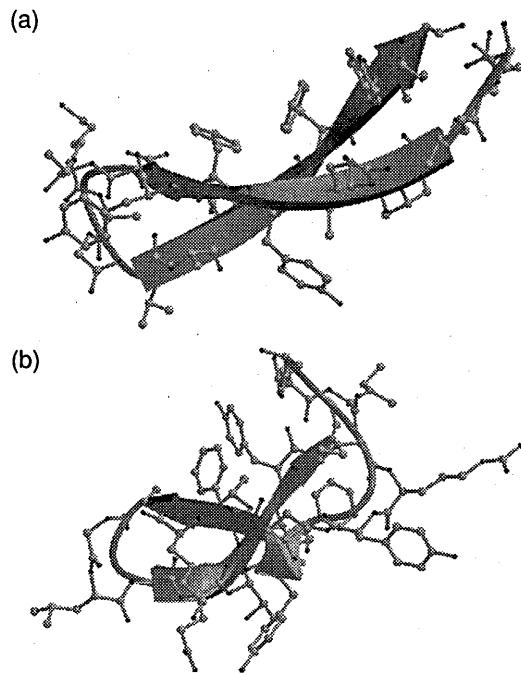
これは、Hansmannさんとの共同研究です。図2にX線構造とこの計算から得られた最小エネルギー構造を比較しますが、両者の α -ヘリックスの位置が完全に一致しています。

最後の例はウシ臍臓トリプシンインヒビターのフラグメントBPTI(16-36)です(アミノ酸数21)。我々はレベル2の溶媒効果(溶媒接触表面積に比例する項)を導入して、徐冷シミュレーションを実行し、 β -シート構造ができるかを確認しました¹³⁾。これは、升屋さん及び奈良女子大学の中沢隆さんと鍋島実穂さんとの共同研究です。図3にX線構造とこの計算から得られた最小エネルギー構造を比較します。一見、両者は上の2つの例ほど似ていないようと思われますが、実は、このフラグメントのNMR実験の結果は図3(a)のBPTI全体のX線実験よりも、図3(b)の計算結果の方に、より似ていることが判明したのです¹³⁾。

以上、筆者の分子研におけるこれまでの研究について簡単に紹介しました。未来開拓の残りの期間(4年間)で、アミノ酸数50程度の小タンパク質の立体構造予測に成功するのが目標ですが、世の中それ程甘くはないと思われる方も多いでしょうね。

References

- 1) Y. Okamoto and H. J. Maris, *Comp. Phys. Comm.* **76**, 191 (1993).
- 2) A. Mitsutake, T. Iitaka and Y. Okamoto, *Comp. Phys. Comm.* **96**, 217 (1996).
- 3) U. H. E. Hansmann, Y. Okamoto and F. Eisenmenger, *Chem. Phys. Lett.* **259**, 321 (1996).
- 4) N. Nakajima, H. Nakamura and A. Kidera, *J. Phys. Chem.* **101**, 817 (1997).
- 5) C. Bartels and M. Karplus, *J. Phys. Chem. B* **102**, 865 (1998).
- 6) Y. Okamoto, *Biopolymers* **34**, 529 (1994).
- 7) T. Ooi, M. Oobatake, G. Némethy, and H. A. Scheraga, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **84**, 3086 (1987).
- 8) M. Kinoshita, Y. Okamoto, and F. Hirata, *J. Comp. Chem.* **18**, 1320 (1997).
- 9) H. Kawai, T. Kikuchi, and Y. Okamoto, *Protein Eng.* **3**, 85 (1989).
- 10) U. H. E. Hansmann and Y. Okamoto, *J. Comp. Chem.* **14**, 1333 (1993).
- 11) M. Kinoshita, Y. Okamoto, and F. Hirata, *J. Am. Chem. Soc.* **120**, 1855 (1998).
- 12) U. H. E. Hansmann and Y. Okamoto, *J. Phys. Chem. B* **103**, 1595 (1999).
- 13) Y. Okamoto, M. Masuya, M. Nabeshima, and T. Nakazawa, *Chem. Phys. Lett.* **299**, 17 (1999).



金属酵素の作用機構を分子レベルで研究する

渡辺 芳人

私が大学院生の頃（20年以上昔?!）、三次元構造が正確に明らかにされていた酵素は、それほどの数ではなかったと思う。化学畑に身を置く者にとって、蛋白構造の解明などは遙か彼方の物語であった。我々が現在研究対象としているシトクロームP450（酸素添加反応をおこなうヘム酵素の一種）のアミノ酸の並んでいる順序（一次構造）が、DNAのシークエンスに基づいて解読されたという発表が1981年の国際学会で行われたときに、会場が大きな興奮に包まれたのを今でも記憶している。もちろん、その原理や実際の実験方法などは門外漢の私には、全く見当もつかなかった。しかし、こうした新たな研究手法の開拓が、その後の分子生物学や構造生物学の爆発的な発展に大きく寄与したことは、皆さんもご存知の通りである。こうした研究の展開が、化学に与えた影響は計り知れない。

例えば、上記のP450と呼ばれる酸素添加酵素を例にとって、具体的に紹介すると、以下のようになる。

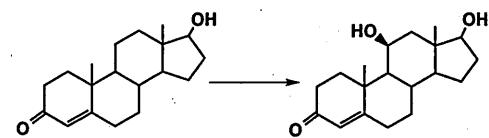
1970年代後半から、化学者によるP450のモデル研究が盛んに行われるようになった。大きな理由の一つとして、P450が行っている酸素添加反応が、合成化学的に魅力的なものであった点が挙げられる（表1）。当時の研究は、金属ポルフィリン錯体と酸化剤の組み合わせで酸化反応が進行するか否か、進行する場合の効率はどうかなどが中心であった。その後、反応活性種の捕捉・キャラクタリゼーションへと研究の中心が移った。最近では、反応中心周辺の環境までもがモデル化され、非常に詳細なモデルによる研究へと発展している。反応中心周辺の環境

表1 P450が触媒する酸化反応の代表例

1) *Hydroxylation of Aromatic Rings*



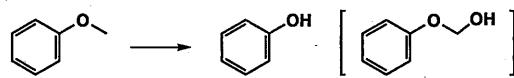
2) *Hydroxylation of Alkanes*



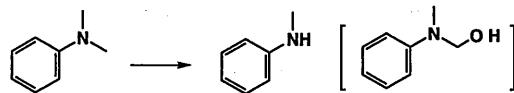
3) *Epoxidation*



4) *O-Demethylation*



5) *Hydroxylation of Aromatic Rings*



とは、実際の酵素の三次元結晶構造に基づいて有機合成した配位子に金属を埋め込み、金属周辺に適切にカルボニル基やアミノ基等を配置することである。

我々の研究グループでは、非ヘム酵素による酸素活性化機構・不安定中間体のキャラクタリゼーションの研究に、合成金属錯体モデルを用いた研究を行っている。ターゲットにしている酵素は、メタンモノオキシゲナーゼ・リポキシゲナーゼ・ヘムエリスリンなど活性中心に鉄イオンが一つ（単核）～二個（複核）含まれる酵素である。例えば、リポキシゲ

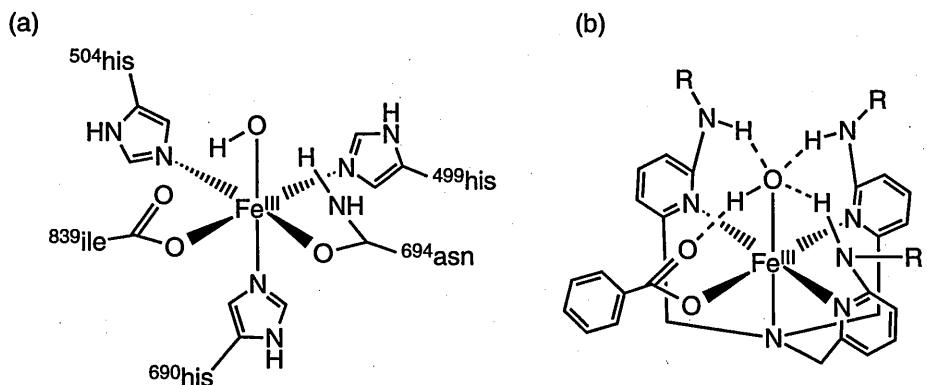
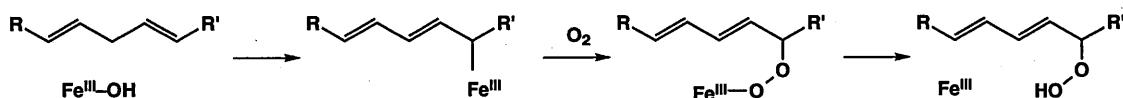


図1 a) 提案されているFe(III)状態でのSoybean Lipoxigenase-1の活性中心構造
b) 今回合成したモデル錯体



スキーム1 提案されているLipoxygenaseによる過酸化物生成機構

ナーゼの場合、Fe(II)の状態での結晶構造解析が行われているが、この酵素が反応を触媒するFe(III)状態は明らかにはなっていない。しかしながら、これまでの研究から、活性中心はFe(III)-OHだろうと考えられている（図1 a）。参考のために、リポキシゲナーゼが触媒する反応をスキーム1に示す。この酵素系のモデル研究では、図1 aを参考に窒素系配位子とカルボン酸を配位子として用い、さらに水酸基が鉄に配位している錯体の合成がポイントになる。特に、この酵素の類似単核鉄錯体で、水酸基が導入された錯体の合成例がないことから、モデル錯体の合成が研究の第一歩と考えた。名古屋工業大学との2年にわたる共同研究の結果、図1 bに示す錯体が得られ、現在、この錯体がリポキシゲナーゼ類似の反応を触媒的に行うことが可能かどうかの検討に入っている。

また、スキーム1を見ると、過酸化物が鉄イオンに配位している中間体（Fe-OOR）が仮定されている。一般に、過酸化物（R-O-OH）と鉄イオンは直

ちに反応して、RO[•]やHO[•]が生成するため、Fe-OORの構造や電子状態、反応などの詳しい研究例はそれほど多くはない。我々のグループでは、-50から-80℃程度の低温条件下で、金属錯体の有機溶液中のマススペクトルの観測が可能であり、既に種々のFe-OOR錯体の検出とキャラクタリゼーションに成功している。

活性中心に鉄イオンを使いながら、上記の例とは異なり配位子がポルフィリンであるタンパク質を総称してヘム蛋白質と呼ぶ。ヘム蛋白質は、鉄ポルフィリン錯体を共有しながら、種々の機能を分担している。例えばヘモグロビンやミオグロビンは酸素分子の運搬・貯蔵を担当し、ペルオキシダーゼ・カタラーゼ・チトクロームP-450はいろいろな酸化反応を触媒している。さらに、電子伝達を分担するシトクローム類もヘム蛋白質である。このように多様な機能の発現は、ヘムを囲んでいるアミノ酸の違いによって制御されていると考えられるが、具体的にどのアミノ酸がどのような役割を果たしているのかと

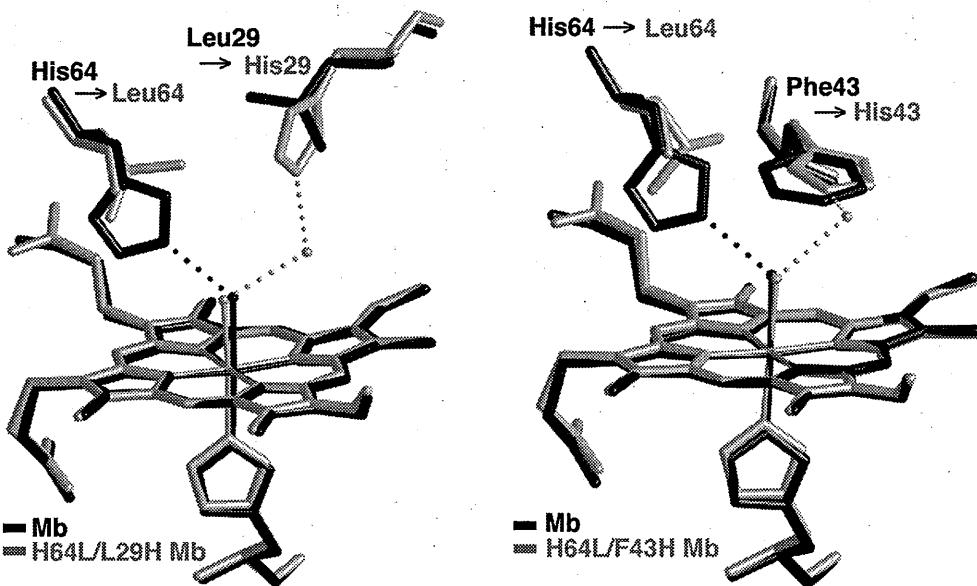


図2 当研究室で合成した二つのミオグロビンミュータント（灰色表示）の活性中心の結晶構造。比較のために天然のミオグロビン（黒色）を重ねて表示。

いう分子レベルでの疑問が山積している。

私たちの研究グループでは、ヘム蛋白質の機能を決定している構造要因、さらに酵素の分子レベルでの作用機構を解明し、人工的な蛋白質の設計を行うことを目標として研究を進めている。こうした目的達成のために、大きく分けて二つの研究グループを作っている。一つは、酵素の反応機構解明を主目的として、モデル錯体を取り扱って研究を進めるグループである。このグループでは、酵素を使った実験では観測できない不安定化学種の構造決定、反応性の検討などを行っている。さらに、a)酵素反応で推定されている連続する化学反応がモデル系で再現できるかどうか、その際、b)金属や配位子の電子状態はどうなっているのか等の詳細な検討により、反応を制御する因子の解明を行っている。また、前述のように非ヘム酵素による酸素活性化機構のモデル系による研究を最近開始した。現在、リポキシゲナーゼの構造モデルの合成や鉄-過酸化物付加体の単離に成功するなど着実な成果を挙げつつある。

第二のグループは、蛋白自身を取り扱った研究を

行っている。具体的には、酵素機能発現に本質的に必須なアミノ酸を明らかとし、そのアミノ酸を部位特異的に置換（ミューテーション）する事で、機能発現に対する役割を分子レベルで定量的に解明しようとしている。現在、ミオグロビンをヘムタンパク質の構造モデルとして利用する研究を行っている。すなわち、ヘム周辺の基本構造を構成する蛋白フレームとしてミオグロビンを利用し、ターゲットにする酵素の機能発現に必須と考えられるアミノ酸をミオグロビン内に適切に配置することによって、人工酵素の構築を目指す研究を行っている。その結果、高い光学選択制を示すペルオキシゲナーゼの合成に成功し（図2参照）、酸化活性種の直接観測にも成功している。

この様に、分子レベルでの酵素の構造と機能の解明には、モデル錯体による研究成果と酵素を用いた研究成果が総合的に取り扱われる必要があり、それを支える体制を作つて研究を進めている。

私は、生物学の基本が、分子レベルでの化学で解明される時代に突入したことを強く感じる。



分子物質開発研究センター 融合物質開発研究部（藤井グループ）

藤 井 浩

平成 10 年 3 月に分子物質開発研究センター、融合物質開発研究部の助教授として着任いたしました。岡崎に来てあつという間の 1 年でしたが、その間に伊藤前所長（現機構長）、小林前センター長、管理局の皆様にご尽力いただきまして、実験棟 5 階に合成用実験室を完成することができました。この場をお借りして、お礼申し上げます。分子研に着任する前は、札幌（北大）、ミネソタ（アメリカの中部）、山形（生物ラジカル研究所）と、冬に寒く雪の多いところを転々としていましたので、岡崎の穏やかな気候には感激します。冬に雪が降らず、快晴が続く生活環境は何年かぶりで、冬の晴天の日は 5 階の実験室から見える岡崎周辺のすばらしい眺めを楽しんでいます（まだ見ていない方は、晴れた日にぜひ実験棟の 5 階に上がってみてください。）

私が分子研のことを初めて知ったのは、私が中学 1、2 年生のころ、NHK で「分子の森の研究者たち」（たぶんこんな題名だったと思います）という分子研の研究環境、研究者を紹介する番組を見た時だと思います。岐阜の田舎の中学生には、すごい研究所があるんだなーと、ただただ驚きばかりでした。それから約 10 年後に、米澤貞次郎先生の研究室で院生をしていたとき、初めて分子研を訪れるることができました。しかし分子研で行われたセミナーに、指導教官の森島績先生が連れて行ってくださったのだと思います。それから、所内セミナー、施設利用、岡崎コンファレンスなどで幾度か分子研にお邪魔する機会をもつことができました。幸運にも昨年、このようなすばらしい研究所で常勤の研究者として研究する機会をいただくことができました。最初は、ちゃんとやっていけるのか不

安でしたが、分子研の名をけがさないようがんばろうと覚悟を決めて着任いたしました。

さて私の研究室ですが、昨年度はひとりで研究室の立ち上げを行ってきましたが、今年 3 月に助手（船橋靖弘君）と 4 月に IMS フェロー（水谷守君）が加わり、3 名になりました。研究室の整備も少しづつではありますが進んできましたので、本年度からグループとしての研究が本格的にスタートいたしました。

私たちの研究室では、生物内の金属酵素、金属タンパク質の構造と機能の関わりについて研究しています。生物は生きていく上で、金属イオンを必要とします。よくご存じのように鉄分が不足すると貧血になりますが、この現象は金属酵素、タンパク質と深く関わっています。私たちは、生物内の金属酵素の機能がいかにして発現されて、またその機能が生理的にどのような意味をもつかに興味があります。生ものを研究対象にしているという点で分子研では異端児（？）ですが、タンパク質や酵素も巨大な分子であり、その分子がいかにして機能しているかは、広い意味での分子科学であると考えています。私たちが研究対象にしている金属酵素や金属タンパク質は、アミノ酸が連なったタンパク質と活性部位の金属イオンとからなりたっています。活性部位の金属イオンは、金属錯体を形成してタンパク質内で安定に存在します。活性部位の金属イオンは先に書きましたように、鉄、銅、亜鉛などさまざまです。金属酵素の反応は金属イオンの上で起こりますので、金属イオンは酵素反応の中心的役割を果たします。一方、同じ金属イオンを活性部位にもつ酵素でも、タンパク質の構造が違うと異なった機能に

なることからも明らかなように、金属イオンを取り囲むタンパク質は、酵素機能を制御します。したがって、金属酵素の機能発現の機構を理解するためには、活性部位の金属イオンとそれを取り囲むタンパク質の特性の両方を理解することが大切であると考えます。そこで私たちの研究室では、金属酵素の研究を活性中心の金属イオンの研究とタンパク質の作る反応場の研究の両面から進めています。具体的に行っている主な研究テーマを以下に示しました。

1. 非ヘム金属酵素反応中間体の電子構造と反応性の研究
2. 磁気共鳴法による小分子の活性化機構および酵素の反応場の研究
3. 金属酵素、金属タンパク質そのもを用いた構造と機能の研究
4. 位置特異的アミノ酸置換や非天然型金属錯体による金属酵素の機能変換の研究（渡辺先生との課題研究）

研究テーマに合わせて実験室も、3分の2が活性部位のモデル金属錯体の合成を行うためのスペース、残りの3分の1がタンパク質、酵素を取り扱うスペースになっています。

活性部位のモデル金属錯体の研究（テーマ1と2）は、主に船橋君と水谷君が行っています。昨年スタートしたばかりの研究グループですので、設備の点でいろいろ不便はありますが、がんばって研究を進めています。この研究を通じて、金属イオンに配位するアミノ酸が、金属イオンの活性をどのように制御しているのかを解明したいと考えています。この研究を進めいく上で、X線構造解析による金属錯体の構造の研究は必須です。私は結晶構造解析に弱いので、これまで

に多くの構造解析の経験もつ彼らは、研究を推進していく上でたいへん頼りになります。現在、酸素分子を活性化する非ヘム鉄酵素、たこやいかの酸素運搬体であるヘモシアニン、メラニン色素の合成に関与するチロシナーゼなどの反応中間体を研究しています。

酵素やタンパク質を用いた研究（テーマ3と4）は、主に私が担当しています。現在、胆液の合成や黄疸に関与するヘムオキシゲナーゼという酵素を中心に研究を進めています。活性部位周辺のタンパク質が酵素の反応性や選択性をどのように制御しているかを、ミュータント酵素を使って研究しています。これまでにいくつかのヘムタンパク質、酵素を扱ってきましたが、生化学実験の知識や経験はまだまだです。この研究を通して、酵素の精製やミューターテーションの知見を深めていきたいと考えています。幸い、相間の渡辺芳人先生との課題研究を通して、遺伝子操作によるタンパク質、酵素のミューターテーションの手法を勉強することができます。小崎さん（現山形大）や松井さんをはじめとする渡辺先生のグループのみなさまにいろいろお世話になりながら、楽しく研究を進めています。課題研究では現在、筋肉中で酸素を貯蔵するミオグロビンというタンパク質に、ミューターテーションを導入したり、活性部位に非天然型の金属錯体を導入したりして、酸素貯蔵という本来の機能を酸化酵素、異性化酵素に変換することを試みています。

将来は、私たちのグループの研究や課題研究を通して得た成果、経験、知識を生かして、さらに窒素固定、窒素循環に関与する金属酵素の研究へと展開していきたいと考えています。今後ともどうぞよろしくお願ひいたします。



分子集団研究系 物性化学研究部門（中村グループ）

中 村 敏 和

平成 10 年 6 月に学習院大学理学部物理学科から赴任しました。その夏には分子性導体分野の大きな国際会議がありましたので、実質的には 8 月からこちらでお世話になっております。赴任にあたりましては分子研ならびに学習院大学の皆様には大変お世話になりました。特に伊藤所長には厳しい状況にも関わらず格別のご配慮いただき、この場をお借りいたしまして厚く御礼申し上げます。

これまで私は、分子性導体の電子状態を ESR や NMR といった磁気共鳴を手法とした微視的な研究を中心に行って参りました。ここで、テーマの詳細を紹介させて頂くのも何ですので、手法・対象についてお話しさせていただきます。分子研にはご専門の先生方ご多くおられることは存じ上げておりますが、ここで少しうとりとめの無いお話をさせていただく事をお許し下さい。ESR や NMR といえば有機合成の方も使われるなじみ深い実験手法ですが、固体電子物性におけるそれは全く異なったものに見えるかも知れません。分析で用いられる NMR は「分子内」の情報を得るために、「分子間」の相互作用から来る情報を極力排除しています。そして、わずかな Chemical-shift の差を識別して分子の姿を構築します。必然的に高分解能が要求されます。一方、電子物性を扱う場合には、協力現象つまり「分子間」の情報が知りたいわけですから、その情報を捨てるわけにはいきません。分子間の相互作用は線幅の broadening や吸収線の構造となって現れます。線幅が広くなると信号強度は急激に減少していきますから、分子間の情報を得ようとすると、信号の観測が困難になってきます。学習院時代の上司である高橋

利宏先生は「我々の分光器は高分解能ではなく高感度NMRである。」と良く語られておられました。この言葉は端的にその思想の違いを説明していると思います。

最近の分子性導体研究における飛躍的発展は、「同位体置換試料による $^{13}\text{C-NMR}$ 」によるところが大きいものと思われます。伝導電子密度の多い C サイトを、NMR で観測可能な ^{13}C 同位体に合成的手法により置換します。この手法により、従来の $^1\text{H-NMR}$ では議論が難しかった、超伝導ギャップの対称性、電荷状態・電子相関の定量的議論が可能になりました。現在同位体試料の $^{13}\text{C-NMR}$ 測定は、もはやスタンダードな手法となり、国内外の NMR 研究者により盛んに研究されています。さらに、その研究成果は分子性導体の分野のみならず他の分野にも影響を与え、酸化物超伝導体や量子スピン系などの理解にも役立っていることは、皆様も既にご承知のことと思います。

ESR も違った印象を受けられるかも知れません。固体の伝導電子共鳴の場合、強度はスピン磁化率、線幅はスピンの dynamics、 g 値は波動関数の対称性を反映しています。温度変化を詳細に調べると、相転移や電子状態の変化を詳細に知ることが出来ます。結晶の g 値は結晶内の独立なイオンの g 値とその配向で決まりますので、 g テンソルを詳細に解析することで伝導電子の性格を同定することが出来ます。 g テンソルの主値主軸の温度変化を調べれば、構造転移の有無や各サイトにおける電荷分布がわかります。今注目されている電荷分離などの問題へのアプローチが可能となります。

分子研におきましても、当グループのテーマとして「微視的手法による分子性導体の電子状態の研究」というコンセプトでいくつもりです。ただ、せっかく分子研に着任したのですから、新機軸を打ち出していきたいと考えています。この点につきましては、今は砂上樓閣ですので、また後日別の機会がございましたら、その時にご紹介させていただきたいと思っております。

わざわざ私が申し上げるまでも無い事ですが、分子性導体は「比較的単純な電子構造をもつにも関わらず、多彩な電子状態を取る。」といふいわばモデル物質的な要素を持っているとともに、「クリーンな系である。有機合成的に選択的同位体置換が出来る。」とい実験的に優れた特性も併せ持っています。もはや分子性導体は一つのカテゴリーを越えて、物性物理が直面している未解決な問題を理解する上で、重要な位置を占めていると考えています。また、今後合成化学者により「戦略的なデザイン」により、新機能を持った物質群はさらに登場してくるでしょうし、その中から新電子相を開拓することは我々物理屋の使命であると認識しています。さらに、分子集合体ならではの、「分子内自由度との複合物性」は、おそらく21世紀には重要な問題となってくると思います。

さてここで、研究室の状況をお話したいと思います。着任早々、何もないがらんとした部屋を前に、「さて何から立ち上げようか」と、悩みました。幸いにも学習院大時代の晩年に、有機合成室の整備・NMR分光器・超伝導磁石の導入という大きな仕事をいただきました。配電盤の配置や水回りといった

部屋の改装や、装置のスペック及びそのコストなど、とても勉強になりました。ただ1つ心残りなのは、それらの設備を使う前に分子研に来てしまつたことです。とはいいうものの、こちらに来て立ち上げにどのくらいのエネルギー・期間が必要かがわかつていたのはとても幸いでした。まずこちらでは、試料作成室の立ち上げに、真っ先に取りかかりました。本格的な合成をするにはドラフトのある部屋をお借りしないといけませんが、結晶育成・溶媒電解支持塩精製につきましては、試料調整室を整備することができました。さて、問題は大物の物性測定装置です。「早々に成果が期待できるESRを立ち上げてから、徐々にNMRを立ち上げる」か、「NMRに全力投球して、余裕が出来ればESRを立ち上げる」か、このどちらかを選択するのに1ヶ月以上悩みました。また、装置の導入に関しても「堅実に行わなければならぬのか」、「少々冒険しても良いのか」、多くの先生方に相談させていただきました。結局、諸般の事情を考えると「NMRは今立ち上げないと、当分チャンスが無いかもしれない。」と思いましたので後者を選択し、しかも初年度から積極的に導入を行うことにしました。現在、ようやく最低限必要なハードがそろってきた状況で、これから心臓部分のプローブ部分・計測ソフトの設計、測定技術の改良を行っていく予定です。

結局、ESRに関しては後回しになってしましましたが、幸いにも分子研には物質開発センターに共有の装置があります。決してマシンタイムが十分とはお世辞にも言えませんが、高いスペックなものを使って頂いており、センターの酒井技官には大変



お世話になっております。また、学習院大の高橋先生も当方がマシンタイムに関して苦慮しているのを案じて、心安くESRの装置を使わせていただいております。分子研内部も、ここのところの情勢変化でESRに関しては恵まれた状況になりつつあります。私の決断として後者を選んだのは図らずも幸運だったのかも知れません。

これまでの1年にも満たない期間ですが、研究室の立ち上げを進めてきた上で、分子研は「研究する者にとっては非常に暖かい」と何度も感じました。たとえ自分のグループが少し不利益を被っても他のグループが困っているなら尽力する、というのは分子研に長らくおられる方には当たり前のことなのかもしれません、正直申しまして驚きでした。特に分子集団研究系の諸先生には、ドラフトや電磁石の件で大変お世話になりました。

遅くなりましたが、現在の当グループのメンバーを紹介させていただきます。助手の中澤康浩さんは、前任の鹿野田先生のグループ時代から比熱測定を行っておられ、研究のほぼすべての事に関して相談にのってもらっています。また、同世代同分野の物理研究者として、日々楽しく議論させていただいています。また、平成11年4月からIMSフェローとして塚田浩君が加わりました。彼は博士課程時代にはBO系電荷移動型錯体やLB膜の¹H-NMR研究を行っていました。当グループのNMR立ち上げに尽力してくれるものと期待しています。

学習院大学助手在任中の6年間、優秀な院生達に巡り会え、複数の研究テーマを同時に進行するという醍醐味を味わうことができました。また一方で、

その諸々の弊害点・昨今における学生意識の変化および教育負担の増加、を感じざるを得ませんでした。最近の諸般の情勢変化により、「大学ではマンパワーによる研究、研究所では豊富な資金による研究」という図式は必ずしも成り立っていないのかもしれません、分子研在任中のしばらくは、少なくとも「少数精銳」だけ?は、思う存分楽しむつもりです。

最後になりましたが、分子研・機構の皆様ならびに関係の先生方には今後ともお世話になることと存じ上げます。どうぞ、よろしくお願ひいたします。

相関領域研究系

分子クラスター研究部門（田中グループ）

田 中 桂 一

平成 10 年 4 月に九州大学理学部から相関領域分子クラスター部門に赴任しました。現在の構成員は、田中桂一（助教授）、原田賢介（助手）、溝口麻雄（IMS Fellow）、Stéphane Bailleux（JSPS Fellow）、Sergei Belov（JSPS Fellow）の 5 人です。このうち Belov 博士は学振の短期研究員として平成 11 年 3 月から 5 月末まで滞在します。また平成 11 年 9 月から Christopher Whitham 博士が客員助教授として参加する予定です。田中は九州大学理学部の助教授を併任し九州大学でも研究と教育を続けています。

研究課題は以下です。

- a) 分子クラスターの構造の分光学的研究
- b) 分子内大振幅振動、プロトン移動運動の分光学的研究

- c) 短寿命不安定分子の生成と電子、幾何構造の分光学的研究
- d) 芳香族有機分子クラスターの超音速分子線高分解能赤外分光法の開発

分子研では、クラスターの分子間振動遷移の観測に熱を絞って研究を進めています。主にサブミリ波領域の電波分光法を用います。また九州大学では赤外レーザー分光法を用いて研究しています。ここでは分子研での我々のグループの研究の現状とこれからの抱負について紹介いたします。

1) 分子クラスターの構造の分光学的研究

クラスターは分子間振動（van der Waals vibrational mode）とよばれる特有な大振幅振動を持っていま

Energy Level Diagram of Ar-HCN

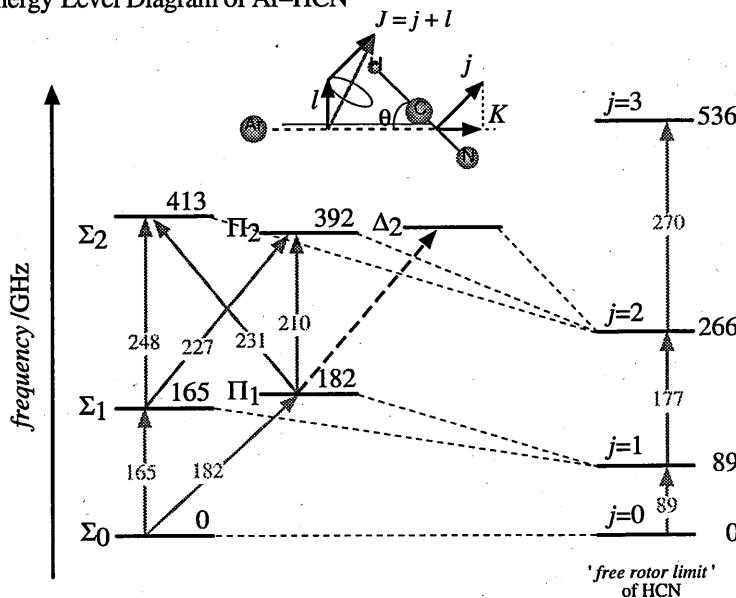
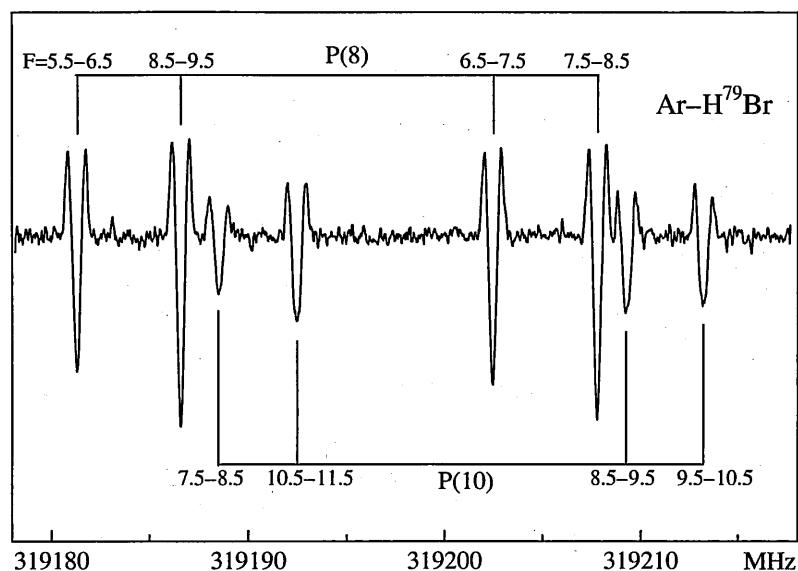


図 1 Ar-HCN の変角振動エネルギー準位図、実線は観測した振動遷移

図2 Ar-HBrの変角振動遷移の
サブミリ波スペクトル、
分裂はBr核の超微細構造



す。この分子間振動を研究することはクラスターのポテンシャル曲面を知る上で極めて重要です。分子間振動は、通常、遠赤外領域 ($100\text{-}300\text{ cm}^{-1}$) にあります。結合力の弱いクラスターではサブミリ波 ($10\text{-}100\text{ cm}^{-1}$) に、更に極めて弱い場合には、ミリ波 ($1\text{-}10\text{ cm}^{-1}$) にまで振動数が低下します。

この研究ではクラスターの分子間振動遷移を直接吸収分光法で観測する事を目的とし、超音速ジェット法を組み合わせたサブミリ波ジェット分光法を開発しました。周知の様に電波領域には極めて安定で高輝度の光源がありますから、超高感度な高分解能分光法の展開が可能です。この観測により初めてポテンシャル曲面の高精度な検証が可能となります。

またクラスターは大振幅な分子間振動をしており、プロトンスワッピングやトンネリング運動のような分子クラスターの個性ある運動がサブミリ波領域で観測されます。また、この方法で分子間振動の高励起状態を観測することにも興味を持っていました。解離極限に近い情報は、クラスターの解離や蒸発について知見を与えるはずです。

10年度は、サブミリ波 ($3\text{-}15\text{ cm}^{-1}$) 超音速分子線分光装置を製作し、Ar-H(D)CNクラスターの分子間変角振動遷移を観測しました。Ar-HCNは弱い

結合エネルギー (150 cm^{-1}) を持ち、変角振動数は 5 cm^{-1} 程です。変角振動は HCN部分の内部回転に対応しますが、この励起によるクラスターの構造変化は興味深いものです。これまでに図1に示した、変角振動遷移の基本音 ($j=1\text{-}0$) および倍音 ($j=2\text{-}1$) の多数のサブバンドの振動回転遷移を観測しました。この解析により、Ar-HCNクラスターは基底状態 ($j=0$) では直線型ですが、第一励起状態 ($j=1$) ではT型に構造を変化し、さらに第二励起状態 ($j=2$) では HCNが自由回転に近い運動をすることが分かりました。大きな電気双極子能率を持つHClのクラスター Ar-HClは基底状態で直線構造を、また HCNと等電子的で π 電子系を持ち無極性のHCCHのクラスター Ar-HCCHはT型の構造を持つ事が知られています。Ar-HCNクラスターは両者の性質を合わせ持ち、直線型とT型のエネルギーが極めて近い特異な二極小ポテンシャルを持ちます。観測されたスペクトルには特異なポテンシャルの様子が如実に反映されています。現在、三好、青柳両先生のグループと協力して、実験と理論計算の両面から Ar-HCNクラスターのポテンシャル曲面を求める研究を推進しています。

図2に示したのは Ar-HBrクラスターの変角振動

遷移のサブミリ波スペクトルの一部です。これより Ar-HBr クラスターも変角振動の励起により大きな構造変化を示し、第一励起状態 ($j = 1$) ではむしろ基底状態と逆の Ar-BrH に近い構造を持つ事が分かりました。

2) 測定領域および測定対象の拡張

後進行波管 (BWO) を用いて測定領域を THz 領域 ($\sim 33 \text{ cm}^{-1}$) まで拡大します。BWO はロシアで最近開発された発振管で、100-200 GHz の広い領域を連続的に掃引できます。また周波数を高精度で安定化でき、かつ高輝度であり、分子間振動遷移を測定する光源として理想的です。

測定領域を THz 領域まで拡大すると、水多量体クラスター (H_2O)_n の疑似リングパッカリング運動や水ベンゼンクラスターのプロトンスワッピング運動等の、特異な大振幅振動の観測が可能となります。溶液の化学で重要な水素結合を持つクラスターの会合状態や分子間振動を解明する事は大変重要なことです。多くの振動分光や電子スペクトルの観測から示唆に富む提案がされていますが、それらを検証し議論に足りる結論を出すのは、この様な回転構造の分解されたスペクトルの観測に負わねばならないと確信しています。

紫外光解離や低速電子線衝撃法と超音速ジェット法とを組み合わせたノズルを開発して、ラジカルやイオンを含むクラスターを観測したいと思っています。ラジカルやイオンクラスターを生成する効率は通常の分子クラスターに比べて圧倒的に低いですから、大容量の排気系や、多重反射光学系や共振器を

開発して検出感度を向上させます。不对電子や電荷がクラスター内にどの様に再配置され、クラスターの形成にどの様に関与するのかに強い興味を持っています。

検出感度の向上を図るために、レーザー誘起蛍光法とサブミリ波分光法を組み合わせた二重共鳴分光法を開発しています。ラジカルクラスター やイオンクラスターの蛍光を観測しながら、分子間振動遷移をサブミリ波を照射して励起します。この励起による蛍光デップをサブミリ波の周波数の関数として観測します。BWO は分子間振動遷移の励起に充分な高出力を持ち、蛍光ディップ二重共鳴分光法はラジカル やイオンクラスターの検出に有力な方法です。

装置の立ち上げに 1 年を費やしました。これから 1 年はより冒険的な面白い課題に挑戦したいと思っていますが、許された 2 年の期間ではとうてい達成不可能な計画を進めているようです。しかし以上の計画の一端でも達成できれば大きな成果です。分子研の恵まれた環境と、なによりも才能あふれるスタッフに囲まれて、出来ないはずがない、と思っています。



相関領域研究系 分子クラスター研究部門（長門グループ）

長門 研吉

平成 10 年 4 月より分子クラスター流動部門にお世話になっています。流動部門に移るにあたり伊藤前所長および電子構造系の西教授には大変お世話になりました。こちらでは西グループをはじめ電子構造研究系のみなさんおよび相関領域研究系の先生方の協力を得ながら、対流圏大気中の気相イオン反応についての実験を進めているところです。着任以来分子研の多くのスタッフにご援助いただいたことに対してこの場を借りてお礼申し上げます。

大気イオンの研究は、Coulomb が静電気の実験で空中に保持した電荷が減衰していくことから大気が非常に低い値であるがゼロでない電気伝導度を持つことを指摘したことに遡ります。現在では対流圏から熱圏まで地球のあらゆる大気層にイオンが存在していることがわかっていますが、対流圏のイオンはわれわれに最も身近でありながらその大気組成の複雑さゆえに最も解明が遅れています。地球大気の電気的特性を理解するためには電荷の担い手であるイオンについての理解が不可欠であり、このような観点から大気イオンの研究は大気電気学という分野で研究が進められてきました。こうした流れに沿って私もイオンの移動度分布測定という手法を用いて対流圏におけるイオン反応についての研究を行ってきました。平成 8 年から 9 年にかけて 1 年間、アメリカ国立大気研究センター大気化学部門で対流圏イオンの研究を先駆的に進めていた Eisele 博士の研究グループに参加しましたが、そこでは研究の焦点が対流圏イオンの化学組成の解明からイオンを利用した微量成分測定法の開発に移っており OH ラジカルや硝酸、硫酸といった大気化学において重要な成分の

濃度測定で大きな成果を上げつつありました。大気イオンを応用することにより大気化学において重要な情報がいろいろと得られることがわかつてきました。

分子研に来てから新たに質量分析計を利用した測定システムを構築し、まだ十分明らかにはなっていない対流圏におけるイオン反応の解明を目指した研究を引き続き進めて行こうとしているわけですが、上で述べたような経験からその応用として対流圏イオンと大気化学のつながりを強く意識して進めて行こうと考えています。応用のひとつはやはり大気微量成分の測定技術です。私たちのこれまでの研究から生物起源の揮発性有機化合物 (Biogenic Volatile Organic Compounds) によると思われるイオンが形成されている可能性がわかつてきました。BVOC には非常に多くの種類がありますが、その中には放出量が非常に多くかつ反応性が高いものがあり対流圏化学に大きな影響を与えています。こうした BVOC のイオン反応を用いた測定方法の開発を進めたいと思っています。検出器も現在主に使われている質量分析計の代わりにドリフトチューブを用いたイオン移動度計で最終的に実現したいと思っています。そうすれば測定システム全体がコンパクトになり、多地点での長期同時観測などが可能になると期待しています。

もうひとつの応用は大気エアロゾルとの関連です。ご存知のように地球温暖化は最も重要な地球環境問題のひとつですが、地球温暖化に対する対流圏エアロゾルの役割の重要性が近年ますます認識されつつあります。エアロゾルは直接太陽光を散乱する

だけでなく、凝結核として雲の生成に関与し間接的にも地球が受ける太陽放射強度に影響を与えます。こうしたエアロゾルの直接的、間接的影響を評価することは地球温暖化の予測精度を向上させる上で重要です。エアロゾルによる影響は粒子密度、粒径分布、化学組成などに依存するので最終的には大気中における様々なエアロゾル生成過程を理解することが必要になります。一方イオンが微粒子の生成を促進することは Wilson の霧箱などによく知られている通りです。しかしながら実際の大気中では霧箱のような大きな過飽和度が実現する可能性はなく、これまで対流圏においてイオンによるエアロゾルの生成はほとんど考えられていませんでした。ところが最近正・負イオンが大気中で再結合することによりエアロゾルが形成され得るという新しいメカニズムが提案され注目されています。また私たちの観測では大気の電離によって生成した初期のイオンがイオン-分子反応によって数秒後にはかなり大きなイオン (1-2 nm) に変化することがわかり、これらは単独でもエアロゾルへ成長し得る安定な embryo たり得るのではないかと予想しています。このような対流圏におけるイオンとエアロゾルの関連をさらに詳しく追及してみたいと思います。

分子研に来てから、これまでの研究テーマの新たな展開を具体化できつつあります。分子研における研究環境の自由度と分子研内外の研究者との交流の賜物です。何よりもエネルギーッシュな研究者集団の中にいることが大きな刺激になっています。残りの任期中に少しでも多くの成果が出せるようがんばりたいと思います。



夢のあとに

広島大学理学部 花 崎 一 郎

今年も満開の桜を見た。広島に来て3回目である。大木に溢れるような満開の花が青空のもと、日の光に輝いているのを見ると、いつもこの世ならぬ、幻想的な幸福感がいっとき心身を満たす。若いときはもっぱら幸せなだけであった。歳とともに、これを一時の幻想と感ずることが多くなり、しかも、生きているうちにあと何回見られるだろうか、という疑問が常にについてまわる。従って、歳とともに、「まほろし」としての桜花がより美しく見えるとともに、幻想の醒めたあとの胸を締め付けるような寂しさもますます強くなる。広島もあと1年で定年なので、そのあとは生まれ故郷の東京に戻るつもりでいる。歳をとるにつれ、引っ越しが身に応えるようになってきたので、再就職先などのあるなしにかかわらず生まれ故郷に身を落ちつけようと思う。来年の桜は東京で見ることになるだろうか。東京に帰ったら、あちこち歩き回って本やCDを探す、という楽しみを30年ぶりに取り戻すことができると思うと今から胸が躍る。

最近、「複雑系」という言葉が多少流行しているようである。老人の独断と偏見で云わせてもらえば、このような言い方は、複雑なことでもかまわずりますよ、という意志表示以上の意味は持っていない。学問研究の領域としてはまったく無意味な表現であると思う。科学は本来自然界を相手にする学問である。自然界は多かれ少なかれ「複雑」である。その複雑な中からできるだけ簡単な原理を抽出し、これによって自然界を理解しようというのが科学である。ある特定のアプローチの価値は取り出された原理がいかに普遍性を持つかで決まる。残念ながら、

学問分野の名称は現在のところ、その歴史を反映してまちまちである。ある場合はアプローチの方法論によって、またある場合は取り扱う系の種類によって（たとえば有機化学、無機化学というように）名付けられている。いずれにしても、「複雑系」などという言い方は方法論を規定してもいいないし、また、系の種類を特定してもいいない。

そもそも、ニュートン力学や量子力学などでも、大部分の場合、現象の線形部分を取り出してきて議論が行われている。関連する自然現象が主として線形で表現され、高次の項が単なる補正項であるかぎり、これで問題はない。極言すれば、従来の科学は線形で扱える現象のみを対象にして来たといつてもよいであろう。この背景には、高次の効果を扱おうとするときに加速度的に増加する数学的困難が控えている。これに対し、たとえば相変化というような現象が線形の範囲ではまったく扱えないものであることは周知のことである。ただし、相変化のダイナミックスに直接触れず、前後の安定相だけを問題にするのであれば、別に問題は起こらない。いわば「くさいものにふた」で済ますことができる。相変化という現象を時間的にも空間的にもきちんと追跡しようとしたとき、高次の非線形効果をとともに考えねばならなくなるのである。非線形化学反応も高次の非線形効果が第一義的に重要となる例である。ただし、一般の、線形で済むような化学反応から見れば、いわば特殊な反応である。「くさいもの」としてふたをしておけばよかったのである。ふたをして置けなくなったのは、生命体の機能などに関連して非線形の反応の重要性が認識されるようになった

ためである。いまや、「くさいもの」が大きな顔をしてのし歩こうとしているのである。

複雑というだけならば、たとえば、50個くらいの素反応からなる化学反応系のダイナミクスをまとめて解こうとすれば十分に複雑である。しかし、いかに複雑でも、そこに非線形性が含まれていなければ面白くもなんともない。ただ複雑なだけである。非線形過程があらわに重要な役目を果たすような反応系ではじめて自発的な振動、多重安定状態、カオス、そして空間的パターンの形成、といった興味深い現象が発現するのである。それでは、「複雑系」というかわりに「非線形系」といえばよいのであろうか？ たしかに、この方がはるかに正直であり、現象の本質を表している。しかしながら、学問分野をあらわす呼び名として、これは重大な欠陥を含んでいる。すなわち、「非線形」というのは「線形でない」という、否定的な呼称である。これは積極的でないからいけないというだけでなく、言葉の否定的な用法の常として、その言葉であらわそうとする事柄の範囲や描像を正確に表現しない。これでは新しい学問分野をあらわす言葉として不十分である。それで、もうすこし積極的で、正確にこの分野をあらわす呼び名として、私はとりあえず、「自己秩序形成系」という言葉を使っている。時間的な振動や多重安定状態などを時間的規則性の自発的形成と考え、これと空間的パターンの自発的形成を併せてこのように呼ぼうというわけである。どなたか、もっとよいネーミングを思いつかれたら是非ご教示いただきたい。

ところで、私としてはつぎに桜の開花を見るまで

にやって置かねばならぬことが二つある。ひとつは、広島における「自己秩序形成」化学反応の研究に決着をつけること。すなわち、学生のやった不十分な結果に対して実験をやりなおして、クビになるまでに、ひとつでも多く論文の形にまとめておく。もうひとつは、来年4月以降に何をやるかを考えて準備しておくことである。仮に、なんらかの職を得られたとしても、研究のような創造的活動を続けられる見込みは少ないと思われる。学生に講義をするというような仕事だけで満足が得られるとは到底思えない。本を書いたら、と云ってくれる人がある。たしかに、新しい分野を切り拓くような、独創性あふれる本が書ければ素晴らしいとは思うが、果たして私の力でそれが可能かどうか。また、可能だったとして、そんなものを出版してくれるところがあるかどうか、はなはだ疑問である。どれも思わしくなかつたときはどうするか？ その場合、私としては科学の世界から完全に足を洗って、まったく別種の創造的活動をはじめるしかない。40年まえ、博士課程に進学するときに、一度にできることはひとつ、と思い定めて化学以外の一切を切り捨てた。あらためて、捨てたものを拾い上げることになる。それはそれで楽しみでないこともないが。

分子研研究会 “2010年の分子科学を語る”



北川 穎 三

700回を迎えた分子研コロキウム

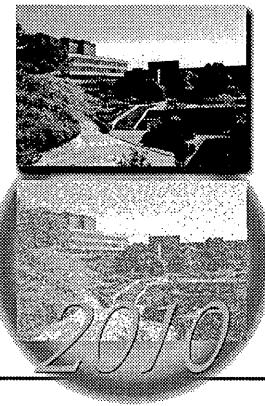
谷村吉隆・宮島清一

分子研研究会 “2010年の分子科学を語る”

分子科学研究所は創設以来24年の月日がたった。そもそも“分子科学”という言葉自体が分子研の設立に際して初めて用いられたそうであるが、その言葉でカバーする学問内容そのものが24年の間にどんどん変わってきた。一方では、日本の経済事情や研究環境が大きく変化したため、研究所のあり方や大学と研究所の違いを真剣に考えないと、研究所の存在意義が問われる時代になろうとしている。政治的には、文部省と科技庁の合併や独立行政法人化の制度改変も、現実のプログラムにのる気配が高くなっている。岡崎機構では、分子生命体研究センターを機構に設置するという一大改革を実行しようとしている。このように色々な面で、いま分子科学研究所が節目を迎えるようとしていることは確かである。それに対して、分子科学者はどう考えどう対処していくべきかを考える研究会をもってはどうかということで、標記研究会が約1年前に提案され、研究所全体の行事として、平成10年10月19日(月)の午後から21日(水)の昼過ぎまで岡崎コンファレンスセンターで開催された。

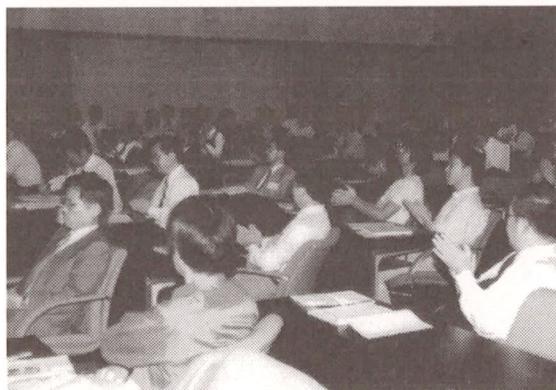
分子科学研究所研究会 – 2010年の分子科学を語る –

1998



1998年10月19日(月)～21日(水)
岡崎コンファレンスセンター

研究会は3部から成る。第1部は「分子科学これからの10年」と題する講演会である。2010年に分子科学研究を中心的に支えるであろう今の中堅の人たちが何を考えているかを知りたく、各講演者に「自分の研究の夢を語って下さい」という依頼をし



た。比較的若い新進気鋭の分子科学者13人が、自分の研究の哲学、そして“今後何が重要問題になると考え、どういう方向に自分の研究を展開していきたいと考えているか”を、25分の講演、5分の質疑応答ということで講演された。各講演者の話は大変おもしろく、質疑応答も活発で、講演者の方的発表ではなく、聴衆も自由に意見を述べる良い会であった。

第2部は19日の夕食後19:30から21:30までの部分で、約70人の参加者によるインフォーマルな討論会である。テーマは「分子研の今後のあり方について」である。分子科学の学問としての発展方向を基礎に、分子研の運営面を中心に変革の方向について所外の先生方の忌憚のない意見を聞く事が大きな目的で、この部分は分子研の点検評価の作業の一環として企画された。ビールを飲みながらインフォーマルな雰囲気で語り合う討論会であったが、全ての発言はテープに録音され、「分子研リポート'98」に詳しく記載されている。2時間の討論時間を大きく4つに分け、第1に「分子研がカバーすべき学問分野」を話題にした。分子研は設立時に考えられた研究系や部門の名前を変える事なく今も続けているが、分子科学の実質内容は大いに変わってきている。学問内容の変化にどう対応していくかについては、“研究分野よりは人物本位で人事選考を進め、研究内容はその人に任せてはどうか”という意見が強かった。第2は「研究所と大学の違い」を話題にした。目的指向の大型設備をもつ研究所はさて

おき、分子研のようなスモールサイエンスをやる研究所は、大学と連携を保ちながらも、大学とは違う結果を出せるところでないといけないので、悩み多いところである。実際の討論では、研究の道楽論の議論にかなりの時間が費やされてしまった。第3は「大学共同利用機関という名において、どういう活動が望まれるか」で、日本の経済事情の悪かった研究所設立当初は“高価な設備を分子研に設置して、それを全国の人が利用する”ということが共同利用の精神であった。今は、Center of Excellence (COE) である事が大切であるという考え方もあるが、この話題には実際に様々な意見が述べられた。第4は「分子研の研究体制」で、分子研はこれまで大勢の優れた助教授を育て、教授として全国の大学に送りだしてきた業績は誰もが認めるところである。研究体制や運営もそちら向けになっていて、COEとして大きな成果を世に出す事を必ずしも第1の重要事項としている感が強い。そうした討論が期待されたが、実際は十分に消化されずに、基礎科学を大事にする立場、計算機センターやUVSOR等の大型施設をレベルアップして欲しい等の意見が述べられた。2時間では足りないと感じさせるほど活発に討論され、有意義なひとときであった。

続いて第3部は「分子科学の境界領域」と題する講演会で、分子科学のコアと一般にいわれる領域と関連しながら少し違ったセンスで研究が展開され、その成果が最近際立っていると思われる分野と分子生命体科学領域の第一線の研究者のお話を聞く事により、分子研の研究者の視野を広めることを目的とした。各分野の代表者ともいえる9人の先生方が1



人40分の講演をされた。それぞれの講演が“さすが”とうなり声をあげる程立派な内容のもので、分子研の外でこんなにいい仕事がたくさん行われている事を知り、所内の者にとってはよい反省と勉強の機会となった。2日めの夜は懇親会が開催され、前夜の討論とは別の角度から分子研の将来について意見が交換された。

全体として非常に広い学問分野をカバーし、分子科学の研究を今後どういう方向へ展開させていくかについて各自が考えるうえで非常に良い研究会であった。

700回を迎えた 分子研コロキウム

分子研コロキウムは、分子科学最先端の話を、異なる分野の研究者や学生にインフォーマルな雰囲気で、分かり易く話して頂くことを趣旨としたセミナーであり、分子科学フォーラムと共に、分子研のアイデンティティーを形成する中心行事である。分子研の創立以来、月2回程度行われて来た分子研コロキウムが、本年度1月末に700回を迎えた。平成9、10年度のコロキウム委員であった宮島・谷村が担当したのは、このうち50回程度である（フォーラムも含む）。700回といっても、特に何の行事もなかったし、講師も出席者もめでたい感じはしていなかったが、よい機会なので、コロキウムがどの

ように運営されているかを紹介しよう。

コロキウム委員の任期は2年で、各系持ち回りで1名づつ2名の助教授が選ばれる。ちなみに11、12年度のコロキウム委員は、田原・井上である。コロキウム委員の仕事は、まず、面白そうなトピックスを話してくれる講師を探しだし、講演を依頼し、出張等の手続きをすると共に、人が集まるようにコロキウムの宣伝をし、そして、当日は、会場の準備・司会をしてセミナーを円滑にすすめる事にある。これを2年間に50回程度行うわけであるから、結構大変な仕事である。講師を選ぶにあたっては、学会や研究会での評判、学会誌の記事、さまざまな経路による推薦等をもとにしている。最新かつ大勢の人が興味を持てるトピックを選び、それを上手に話してくれる人を探すわけであるが、所内の研究者に相談すれば、結構容易に見つかるものである。分野が偏らないように心がけているがつもりであるが、コロキウム委員2人のカバーする分野は非常に狭いので、講演者の推薦はいつでも大歓迎であった。講師のあたりがついたら、講演を依頼し、スケジュールを決めるのであるが、講師に選ばれるような人は、人気者で、いろんな研究会等で引っ張りだこであり、スケジュールの調整が結構大変であった。しかしながら、お願ひした講師は、全ての人が快く引き受けてくださり、いつも感謝、感謝の連続であった。フォーラム等、特に偉い先生に講師をお願いする時は、コロキウム委員も大変気を使つたが、一方で、いろいろな人と知り合いになれるのは、コロキウム委員の役得の一つであろう。この2年、宮島・谷村でオーガナイズしたのは50回程度であるが、



98年10月に行われた第15回分子科学フォーラムの様子

講演者は米エモリー大学の諸熊奎治教授

一人あたり15回程度は、コロキウム後に飲みに行った気がする。

折角、名講義をして下さっても、何かの拍子で、所内の人間の聴講者が少ない事があるのが残念であり、大変勿体ない思いをした事もある。分子研コロキウムは、特に学生にとって、分子科学の流れを知る絶好の機会であり、総研大に入学している事の特典であると思うのだが、毎回出席している学生は少ないようだ。『優秀な学生は、何も言わなくてもコロキウム等に参加し、積極的に質問している』と言っている先生がいたが、これは本當である。経験的に言って、己の研究分野の話はいつでも聞けるが、専門外の話はそう聞く機会はないし、またあっても初心者相手でない場合が殆どである。通常、研究は誰でも同じ土俵で争っており、差がつくとしたら、専門分野外の知識が鍵になる場合が多い。学生を持つ先生方は、学生がコロキウムに参加しやすい雰囲気を作つて頂ければ幸いである。学生も、講師に呼んでほしい人を提言する等の積極性を持ってほしいものである。コロキウムのあり方等にも直接助言をしてくれれば、コロキウム委員も本望であろう。(原稿を書いている時に思ついたが、学生RAをコロキウム委員として1、2名入れるという案はどうであろう)

コロキウムの講師の旅費・滞在費等は、所長招へ

い旅費でまかなわれている。お茶菓子等は、教官のカンパ及び、分子研の創立20周年事業の収益(「新分子の世界」の印税)によりまかなわれている。平成8年度より年6回行われている分子科学フォーラムに対しては、豊田理化学研究所から資金援助を受けている。お茶や茶菓子の準備は、秘書の献身的な努力で成り立っている事も忘れてはならない。講演をして下さった先生方、旅費等の手続きをして下さった管理局の人たち、そして、会場の世話等大変な労力をおかげした秘書の方々にあらためて大感謝したい。任期の2年は長いようであるが、思い出せば楽しいものであった。

大勢の人の支えによりコロキウムは運営されているが、この支えがある限り、分子研コロキウム、そして分子科学フォーラムは分子研のアイデンティティーを形成する重要な要素として存在していく事であろう。そして、それは分子科学を進める見えない原動力となっているはずだ。



分子研UVSORでの4年半

東京大学物性研究所 木下 豊彦
(前 極端紫外光実験施設助教授)

この原稿の依頼を担当の田原さんから受けた時は、「え！」という感じでした。書類上は98年の11月1日付けで東京大学物性研究所が本務になっており、UVSORの方は併任でしたが、まだ、岡崎での業務、研究が進行中だったために、意識の中ではこの原稿を書かなければならぬということが他人事のように感じられたのです。しかし、今はもう桜の花も散る4月半ばです。今週からは、我々が物性研究所の分室を構えているつくばのPhoton Factoryの営業運転が始まっています。UVSORで行ってきたのと同様、全国各地からやってくるユーザーのための共同利用のお世話と自分自身の研究を始めるための準備を行っているところです。こちらでの事務のもう一つの柱は、東京大学が計画している柏キャンパスでの高輝度光源計画（第三世代の放射光施設）を実現することです。まだまだ厳しい状況で予算が認められておりませんが、真空紫外、軟X線分光研究の分野において世界に取り残されないためにも、ぜひ実現させる必要があると考えています。

UVSORという共同利用がメインの仕事である施設にいた私にとって、分子科学研究所が居心地のよいところであったのかどうか自問自答をくり返す4年半でありました。施設スタッフとして、所、機構等に申し上げたいことがいろいろありました。最後の教授会でもそのいくつかは申し上げさせていただきましたし、また施設出身の諸先輩方、外部評価委員の先生方もいくつかの意見を公の場で述べられておりますので、ここでは楽しかったいくつかのこととを書きたいと思います。岡崎にいた4年半を振り返るといろいろなとの出合いがあり、それが今後

の私の大きな財産になっていくものと思っています。化学の方達や、物理の分野でもSoft matterにweightをおいて仕事をされている方の多い分子科学研究所では、私の所属している固体物性、放射光分光の世界とは違った刺激がありました。

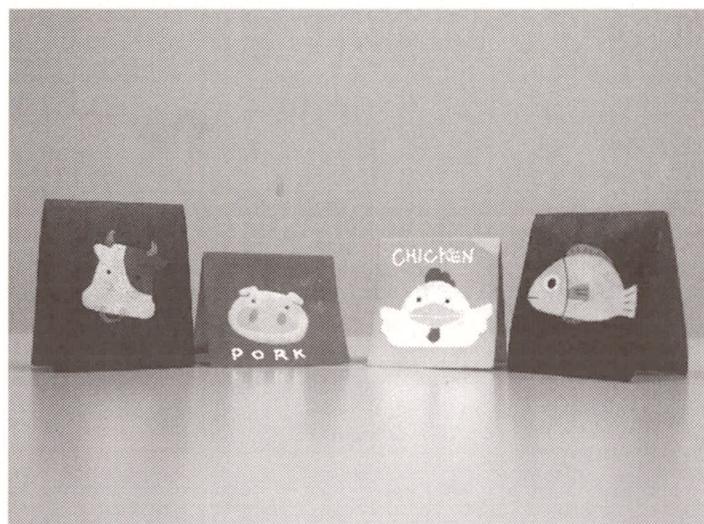
若い人たち（私も若いですが）との公私に渡る付き合いも楽しい思い出です。特に冬の「丘の上スキーサークル」主催のスキーツアーと、岡崎市内の食べ歩きが印象に残っています。UVSORを研究の中心とする独身の若手の間では「夕食俱楽部」なるものがあり、夕方6時を過ぎると皆で連れ立って、市内のうまくて安い食べ物屋にでかけたものでした。私が岡崎にいた間、家内は2度の出産を経験し、その間チョンガ一生活を強いられた私は「夕食俱楽部」に参加し、楽しい食べ歩きをしました。岡崎在住の独身の方にはいうまでもないことかも知れませんが、「夕食俱楽部」の集めた情報は鎌田さん、萩原さんが中心になって編纂されたUVSOR施設利用者ガイドブックの中に載せられており、またUVSORホームページでも見ることができます。全国から来るユーザーの皆様の役に立っていること思います。夕食俱楽部から巣立っていった若者達（胃袋の猛者達？）は官民、内外を問わず、放射光施設に関わる有力なスタッフ、ユーザーとして育っており、非常に頼もしい限りです。

私のグループでは、何人かの外国人に研究に参加してもらいました。ドイツ人、バングラデシュ人、スリランカ人、トルコ人が、その内訳です。困ったことは彼等の宗教がそれぞれに違い、パーティーや、皆で食事にでかけた時等、ヒンズー教徒のバングラ

人（牛肉がダメです）と、イスラム教徒のトルコ人（豚肉がダメです）が同じ食事をとれなかつたことです。また、サンゲリアで昼食を取る時にも、いちいちその料理に使われている肉が何かを説明しなくてはならないわけです。ユニークな料理が多いサンゲリアのメニューの中で何の肉が使われているかを我々が区別できるわけがありません。そこで店長にお願いをして、一目で使われている肉の種類が分かるようなマンガの札を作つていただくことにしました。翌日には早速皆様が現在毎日のように目にしているような牛、豚、魚、鶏の札が準備され、一同サンゲリアに感謝した次第です。ただ、彼等と一緒にいるうちに気がついたことなのですが、食べないと称している肉の味を彼等は知らないということです。従つて、もし間違つて牛肉なり、豚肉なり、戒律で禁じられている肉を食したとしてもそれが分からぬということなのです。現に私も数回ではあります、彼等がそれらの物を食している現場に居合

わせたことがあります。トルコ人にいたつては、南ロータリークラブの方達との親睦パーティーで、大きな豚肉ステーキをうまいと食べている有り様でした。（教訓＝経験にまさる財産はない。）

以上、雑駁なことばかり書き連ねてきましたが、いろいろお世話になった伊藤前所長以下分子研の皆様に感謝をしつつ終わりにしたいと思います。学会、研究会、共同利用等の際にお会いできましたら、ぜひ声をかけて下さい。一緒に飲みにいきましょう！





とても濃い分子研（ファクター 3 の違い）

北海道大学大学院理学研究科 信 定 克 幸
(前 理論研究系分子基礎理論第三研究部門助手)

三年間の分子研在任を経て、平成 11 年 1 月 1 日付けで北海道大学に転任いたしました。公私に亘りお世話になりました中村宏樹先生、伊藤光男先生そして分子研の皆様にお礼申しあげます。

我が研究を振り返ってとか、分子科学はどうあるべきかなどと大きなことを書ける程、偉くもなく、年も取っていないので、分子研とはどんなところだったのか個人的感想を述べて、執筆の責務を果たしたとさせていただきます。

生来の根無し草的な性格のため、分子研就職に至るまでの学生生活では転々と研究場所を移ってきました。東北大から出発して、東工大と高エネ研、東大と宇宙研、そして辿り着いたのが分子研でした。転々とした研究生活を送ったおかげで、各研究機関の長所短所を良く観察できました。その結果出てきた分子研に対する個人的感想が冒頭の意味不明な表題に集約されています。三年前の秋頃、博士課程を途中でほっぽり出し、めでたく分子研に就職することができましたが、噂通りの忙しい研究所で、表題のファクター 3 が如実に分子研を物語っていました。毎日どこかでやっている研究会やセミナー、滞在している外国人研究者の数、土日も無視してしまう程の仕事量など、「何もかもが他の研究機関の 3 倍程度違うで」と毎日思っていました。物議を醸し出さない方がいいのですが、予算やポジションの流動性そして論文の数もファクター 3 近く違うのではないかと勝手に思っておりました。要するに何に関しても、3 倍多く、3 倍早く、3 倍高く、あたかもオリンピックの標語以上の実体を見てしまったわけです。良いにつけ悪いにつけ密度の濃い研究生活と雑

用生活を送ったので、相応の見返りのあった三年間でした。そんな様々な長所短所の中でも、横のつながりの良さには驚きました。私の在籍した理論研究系は複数のグループから成っておりますが、他のグループとの横の壁が無く、いつでもどこでも研究談義が自由に行われておりました。この環境が優れた仕事を生み出す一つの原因になっているのは間違いないでしょう。私自身、他グループから多くのアドバイスを頂き、更には実験グループとの共同研究もさせていただきました。当然ながら面倒臭いことや辟易する雑用も多々ありましたが、そんな時も横のつながりの良さを遺憾なく発揮して、宴会の場で発散しました。公私共にこんなにも自由な雰囲気はなかなか得難いと今でも思っています。

そんな濃い分子研生活も、根無し草的性格のために出てしましましたが、「より早く」の（私が勝手に思っている）分子研の精神を引き継げたかなと思っております。現在は、分子研の目が離れた所で、少し時間のかかる仕事を一つぐらいはするかと目論んでいます。ところが、先日知ったのですが、ここ北大にも元分子研関係者が多数在任されていました。例えが悪く申し訳ございませんが、どこの国に行ってもマクドナルドとコカ・コーラがあるように、主要な研究機関には元分子研関係者がいるみたいです。どこかで分子研の目が光っているようで何となく緊張してしまいそうですが、適度なストレスになって良いかもしれません。

今後とも分子研の三拍子、多い、早い、高い、を全面にして、分子科学を先導する機関であることを願って、筆を終えさせていただきます。

心地よい思い出とともに

名古屋大学大学院工学研究科 藤 田 誠
(前 錯体化学実験施設錯体物性研究部門助教授)

3月の教授会での離任の挨拶でも述べましたが、2年前に私が分子研を選んで応募を出した理由は、単なる直感にすぎませんでした。つまり、「分子研で大きく飛躍できそうな……」という何となくの予感を頼りに応募したわけです。ですから、分子研を何も知らぬままに着任し、がらんとした実験室にポンと一人立ったときは、さすがに「ゼロからスタート」という意気込みと「早まったかな」という不安な気持ちとが複雑に交錯しました。それから2年、ずいぶんがむしゃらな時期を過ごしましたが、気がついてみれば10数人のメンバーとともに活気のある研究室をつくることができ、岡崎での成果も次々と世に出せるようになりました。自分でも良くやったものだと感心することもあります。この間、確かに時の流れはまたたく間でしたが、自分のそれまでの人生の5年10年に匹敵するインパクトがあったように感じられます。そして今にして思えば、自分の直感は正しかったと胸をはることができます。

そんな充実した時を過ごすことができ、今、なつかしく心地よい思い出とともに分子研を去れるのは、ひとえに研究グループの全員が心をひとつにして研究に取り組んでくれ、苦楽を共にしてくれたおかげと感謝しております。分子研では良くマンパワーが問題にされますが、大学のように何となく配属される学生は一人もおらず、そこに集まる人は皆研究に熱意を持った人たちなのですから、こんなに有り難いことはありませんでした。すべてを彼等の自主性にまかせ研究室を運営し、それで誰もさぼることなく着実に研究が進展する。そんな理想の研究グループを持てたことが大きな喜びと誇りでした。彼

等にとってもさぞかし激動の期間だったでしょうが、この充実した時と空間を共有できたものにしか通じない何かが一生の財産として残ることと信じております。

最初の話に戻り、私の直感ははたしてどこから来たのでしょうか。おそらく分子研諸先輩方が築き上げた歴史や、分子研から大きく羽ばたいた数多くの先人の例が、自然と「あそこへ行けば……」という思いに通じたのではないかと思います。私自身も分子研OBとなった今、今度は私を含めた先人の姿をみて後継が現れることを願っております。また、今後は分子研のさらなるご発展に、OBとして微力ながら支援させて頂く所存です。

最後になりましたが、2年間にわたって存分に研究を楽しむことができましたのも、伊藤光男所長(現機構長)、田中晃二施設長の暖かなご支援のおかげであり、ここに深く感謝申し上げます。また、錯体化学実験施設の皆様(とりわけ、秘書室の山口さん、神谷さん)、分子研諸先生方、事務官の皆様にはたいへんお世話になり、厚く御礼申し上げます。



My Stay at the Institute for Molecular Science in Okazaki

Marek J. Wójcik
(外国人客員助教授)

I spent in IMS 1 year from December 1997 to December 1998. It was not my first visit here, I have been to the Institute several times in 1991 and 1992 but my previous visits were short. I remembered Okazaki as a small town and was uneasy about spending here the whole year. My anxiety was bad founded. Living in Okazaki and working in IMS was an exhilarating and pleasant experience. I spent here half a year with my wife and we enjoyed tastes of this beautiful and hospitable country.

I was working on multidimensional proton tunneling with Professor H. Nakamura and on vibrational spectra of hydrogen-bonded systems. This work involved extensive ab initio calculations for large systems in the ground and excited electronic states. I could profit from excellent computing facilities in the computer center as well as expertise and kind collaboration with Professor S. Iwata and Dr. S. Hirata. The library of the Institutes was very convenient and well organized; despite the fact that it is shared by three very different units, it contains all most important journals in my field. The Institute is a very international institution (the number of foreign members in our group at times was 7 out of 10, and the predominant language was Russian). Also working in IMS gives opportunity to attend many conferences and workshops organized here and to meet leading scientists visiting the Institute and presenting lectures. Staff and secretaries (especially Ms. S. Adachi, H. Yamamoto and R. Kawai) were competent and helpful.

The life in Okazaki had many advantages. Mishima

Lodge where we lived is well equipped, conveniently located and inexpensive. It is quiet and well prepared to house families. My wife never felt alone. The only thing I would suggest is to arrange a coffee shop/club in the conference building which could serve as a place for meeting people, social activities, etc. Okazaki International Association organized many activities promoting Japanese culture and giving opportunities to learn the language, to take part in excursions and parties. The same concerned other organizations like Rotary Club and Japan and Eurasia Association with wonderfully hospitable Okawara-san. The most memorable was Ieyasu Parade in April and Summer Festival in August with impressive fireworks. There were also other pleasures - excellent restaurants, visits to Japanese Alps, Kyoto, Tokyo, Kanazawa and Sendai, making and meeting Japanese and international friends, moving beauty of gentle blossoming cherries in April and colourful trees in November, and a lot of kindness which can hardly be enjoyed in any other place. We remember smells, tastes and colours of Okazaki, macchas and cakes wrapped in leaves in a Tea House in Okazaki Park, beautiful women-children, unusual fashions, Teddy bears, a Lop-ear.... These memories will stay with me and my wife for ever and I want to thank the Institute and my colleagues for excellent time we had in Okazaki.

Faculty of Chemistry
Jagiellonian University
30-060 Krakow, Ingardena 3
Poland

New experiences at IMS

Stockholm University Lars G. M. Pettersson
(外国人客員助教授)

It is now time to look back on and summarize my visit to Okazaki and the IMS. It has been a very good and useful experience in many ways and I am very happy to have had the opportunity to experience Japan, both people and nature, and in particular to work in the excellent group of Prof Kosugi at the IMS. I have really enjoyed the good resources, friendly atmosphere, generosity and professional attitude of the group.

The main project that brought me to Okazaki was connected with the understanding of charge-transfer states observed in core-level spectroscopies on coordinated metals where Prof Kosugi together with Drs Takata and Hatsui had performed both the experiments and an initial theoretical analysis. The character of these states was successfully confirmed and an important connection to the ground state electronic structure was also established as a result of our joint work. A second interest was concerned with the mixing of Rydberg and valence character in excited molecular states. Here Prof Kosugi with Drs Adachi and Takata had taken excellent data on a series of molecules. It occurred to us that by freezing the molecules in a rare gas matrix it should be possible to use the enclosing cage to selectively shift the Rydberg components to higher energy since these have a larger spatial extent and should feel more repulsion against the "cage." This idea was tested in a series of theoretical model studies and, based on this, new experiments will be set up to make use of this approach. In summary, a scientifically quite successful interaction to which the enthusiasm and interesting discussions with Prof Tahara and Kato contributed greatly.

For the second half of my research visit the group was

joined by another Swede, Prof Hans Agren, who is a leading expert in the field of theoretical descriptions of inner-shell spectroscopies. We have a long-standing collaboration back home on the development and application of these techniques, but since we work in different cities we have never interacted as strongly as while sharing the office at the IMS. A lot of important discussions took place in this period.

Okazaki is a small city, but I discovered it has a big heart. Through Prof Umapathy, who was also a guest professor, I discovered the OIA and all the welcoming activities organized by these fantastic people. Through the OIA I got a start on my Japanese, discovered a bit of Japanese culture and made a lot of friends. Both I and Prof Umapathy developed a bit of a passion for karaoke as a consequence of the first OIA English seminar, but unfortunately this is not part of the European lifestyle (yet).

The Japanese countryside, especially at the turning of the leaves, is very picturesque. Our main guide was Prof. Miyoshi who took us to the top of Tateyama and introduced us to the mountain hot spas. He also took the time to organize a very successful symposium on reactivities at surfaces.

The research visit has been very beneficial and new contacts have been made. I have discovered a very lively scientific community with many very interesting ideas that are being developed. The IMS, with its large number of active researchers and foreign visitors, has a very good position to make important contributions.



My Impressions of Institute for Molecular Science

S. Umapathy
(外国人客員教授)

I visited IMS in 1993 for a day and then I had the opportunity to learn more about IMS during my subsequent meetings with Prof. Kitagawa, Prof. Ito and Prof. Yoshihara. I gladly accepted the invitation to come and spend six months as a visiting professor. It has been a highly motivating and educative experience for me in many ways. The international atmosphere of the Institute by way of interaction not only with the host professor but also with the other professors of the Institute, opportunity to listen to lectures of experts in various fields of science from Japan and around the world, the interaction with visiting professors from other countries, and the excellent library, have made me realize the secret of success and motivation of high level of research in the Institute. I personally benefited by all the above aspects of this Institute culture. I am very proud and happy that I have been able to experience the international standards of science in the Institute. In addition, my interactions with the younger scientists at the level of students and research associates have been very rewarding, their keenness to do experiments, willingness to learn new things are a good indication of great future. However, I must add that the level of English conversation of the young people has been a hindrance in good scientific communication, which I guess may be valuable for the young people when they build their career. My suggestion would be to offer them an English conversation course and presentation course (incidentally are being offered in our Institute in India) at least in the first year of their joining, so that they can discuss science with

the many well known scientists who visit IMS regularly.

On the social front, Okazaki has been an excellent place for a scientific research institute like this one, a very quite city with sufficient social activities when one wants them. I enjoyed the social events organized in the Institute and also by the Okazaki International association. Overall, I have had a very fruitful and enjoyable stay in Okazaki; I am deeply indebted to Prof. Kitagawa for his help and support and also to his group members for their extreme hospitality and kindness.

日本化学会学術賞

田中 晃二 教 授

日本IBM科学賞

鹿野田一司 助教授

松尾学術賞

森田 紀夫 助教授

井上研究奨励賞

高橋 雅樹 博 士

田中晃二教授に 日本化学会学術賞

このたび、錯体化学実験施設の田中晃二教授に、平成10年度日本化学会学術賞が授与されました。「金属錯体上で活性化された二酸化炭素の反応性に関する研究」が認められたものであり、衷心よりお祝いを申し上げます。

田中教授は酸化還元機能をもつ金属錯体の多様性・特異性に着目され、その数々の潜在的特性を掘り起こして二酸化炭素の化学変換に活用し、独創的新規性に富む有用な反応を数多くデザイン・開発されました。田中教授による二酸化炭素に関する研究は、金属上での二酸化炭素と一酸化炭素の可逆的変換反応の発見を出発点にしています。配位子中心の酸化還元反応により、金属上での二酸化炭素と一酸化炭素の反応性を制御し、複数個の炭素-炭素結合生成を伴う多電子還元反応の開拓を行われました。以下に田中教授が見出された反応を紹介します。

1. Ru金属錯体上での二酸化炭素の二電子還元反応

ポリピリジン配位子を有するある種のRu-CO錯体は、水溶液中ではRu-C(O)OHとRu-COOに変化し、



pH依存性の平衡混合物として存在することを実証した。結晶構造解析により、Ru-COO、Ru-C(O)OH、Ru-CO結合の金属-炭素間の多重結合性の相違を明らかにした。非プロトン性溶媒中でもRu-COOから二酸化炭素、および炭酸イオンからRu-CO錯体への可逆的酸素イオン移動が起こることを実証した。

2. 一酸化炭素発生制御によるフォルミルおよびアシル錯体を経由する多電子還元反応

二酸化炭素還元に必要な電子を配位子中心の酸化還元反応で供給し、金属-CO結合の還元的開裂を低温で抑制すると、プロトン性溶媒中ではカルボニ



ル基はフォルミルやヒドロキシメチル基に還元され、二酸化炭素の4電子還元生成物のホルムアルデヒドとグリオキシル酸、および6電子還元生成物のメタノールとグルコール酸の前駆体として機能することを明らかにした。また、非プロトン性溶媒では、金属-CO結合のカルボニル炭素への配位子付加により、金属-CO結合が還元的開裂を起こさずにカルボニル基が活性化され、 R_4N^+ イオンをアルキル化剤とする触媒的有機合成反応が可能となった。

3. 架橋イオウ上での二酸化炭素の活性化による炭素-酸素結合を保持した固定反応

金属-イオウクラスター化合物の酸化体と還元体のイオウ配位子の塩基性を決定する方法論を考案し、4Fe4Sクラスターと同族のFeMoSクラスターのイオウ配位子の塩基性を決定した。この成果は、架橋イオウ上での炭素-酸素結合の開裂を伴わない二酸化炭素の還元的活性化に発展し、光合成細菌同様にチオエステルのカルボニル炭素への二酸化炭素固定で触媒的なピルビン酸生成に成功している。

いずれの反応も、田中教授の独創性により構築されたものであり。その成果は国内外で高い評価を受けました。私事で恐縮ですが、筆者も数年前に二酸化炭素固定の研究で苦労していましたが、同じ頃に田中教授がRu金属上の重要中間体を次々と単離・構造決定され、反応機構を世界に先駆けて解明されたときは、大変感銘を受けたことを覚えています。

田中教授の今後の益々のご活躍をお祈り申し上げます。

(塩谷光彦 記)

鹿野田一司助教授に 日本IBM科学賞

平成10年11月に第12回日本IBM科学賞（物理分野）が現東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻の鹿野田一司助教授に授与された。受賞題目は「分子性固体の金属-絶縁体転移と超伝導の研究」である。受賞の対象となった二次元電子系 κ 型BEDT-TTF錯体の強相関に関する研究は、主に氏が平成3年から9年まで分子研物性化学研究部門在職中に行われたものである。日本IBM科学賞は、物理・化学・コンピューターサイエンス・エレクトロニクスの基礎研究の幅広い分野で、優れた研究活動を行っている独創性豊かな若手研究者に対して与えられる。

氏は、 κ 型BEDT-TTF錯体についてNMR・磁化率・電気伝導度などの測定を行い、カウンターイオンの違いにより出現する様々な電子相の電荷とスピノの状態を解明した。 κ 型錯体の強い二量体構造に着目し、多彩な電子相をバンド幅と電子間相互作用の違いによるモット絶縁相と近傍金属相の競合として理解するモデルを提案した。 ^{13}C -NMRスピノ格子緩和率測定から、これらの系の高温常磁性相において反強磁性スピノ揺らぎが強いこと、すなわち電子相関の効果が大きく現れていることを明らかにした。また、絶縁反強磁性相では、 ^{13}C -NMR吸収線の解析と磁化率の測定より、磁気構造が格子周期と整合していることを見いだしている。 κ 型BEDT-TTF錯体の競合電子相は、超伝導相と絶縁反強磁性

相が隣接するなど、酸化物高温超伝導体と問題を同じくするところが多い。

氏の今回の成果は、単に分子性固体の物性解明にとどまらず、高温超伝導発現機構の解明等にも重要なヒントを与えるものであり、物性物理の骨幹に関わるものである。

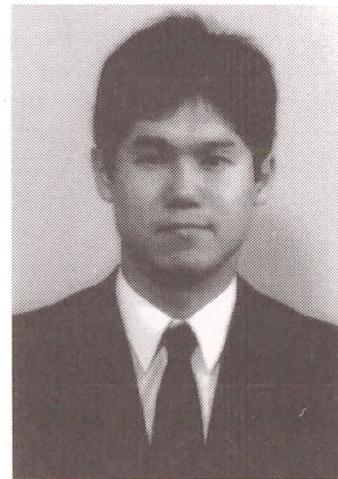
(中村敏和 記)

森田紀夫助教授に 松尾学術賞



第2回（平成10年度）松尾学術賞が分子構造研究系の森田紀夫助教授に授与された。松尾学術賞は平成9年に創設され、光量子科学に関する基礎的研究で、特に業績の顕著な研究者に授与される。森田助教授の受賞題名は「反陽子ヘリウム原子分子のレーザー分光」である。1991年に発見された液体ヘリウム中の反陽子の異常長寿命現象は、反陽子がヘリウム原子の一個の電子と入れ替わってできる

エキゾチックな原子（原子と分子の両面を備えたその特異な性格から「atomcule（原子分子）」とも呼ばれている）の準安定性によるものと推論された。もしこれが真に生成されているならば、重い反粒子を含む（準）安定なエキゾチック原子としては初めてのものである。森田助教授は、当時のわくわく感に過ぎなかった「反陽子ヘリウム atomcule」の生成の確証を得るため、およびその構造をミクロに調べるため、そのレーザー分光を考案・実行し、成功させた。森田助教授のアイディアは、準安定状態から短寿命状態へパルスレーザーで瞬間に共鳴遷移を起こさせるとその分だけ反陽子消滅が促進されることを利用してレーザー分光を実現しようというものである。具体的実験は、1991年よりヨーロッパ原子核研究機構CERNの反陽子ビームを使ってこの現象の研究を行っている国際共同実験グループの中心課題として実行された。この実験のために、強い波長可変レーザーパルスをランダムに起こる準安定 atomcule の生成と同期させねばならないことをはじめとして、数々の実験上の問題を解決しなければならなかつたが、森田助教授を中心とする実験チームは2年にわたる準備を経て、1993年10月、初めてこの atomcule の共鳴線の観測に成功した。これにより、反陽子の異常長寿命性が反陽子ヘリウム atomcule の準安定状態によることが明白となり、他の解釈は消滅した。と同時に、このレーザー共鳴実験の成功は、反陽子 atomcule の精密なスペクトロスコピーに道をひらいた。当初、このクーロン三体系の理論計算は1000 ppm程度の不確定さを持っていたが、この実験がきっかけとなって、はるかに精



密な理論計算が幾人かの理論家によって行われるようになり、理論値との比較から、束縛電子に対する相対論的補正の重要性が示唆された。現在では、さらにラムシフトの補正まで行うと、理論値は1 ppmのレベルで実験値と一致することが明らかとなっている。さらに、このレーザー分光法のおかげで、他の原子や分子がatomculeの準安定性を壊すメカニズムを、各準位の寿命の観測から解明することが可能となった。こうして、これまでに、物理化学的反応の反陽子状態依存性がきわめて大きいことなど、多くの興味ある知見が得られている。森田助教授の受賞は、このような反陽子ヘリウムatomculeの分光法の開拓によって新しい研究領域の創始に貢献したことが高く評価されたものであり、その受賞と研究の成功に、心より祝意を表したい。

(北川禎三 記)

度は全国の大学長から推薦を受けた143名の候補者の中から厳しい選考を経たのち、同氏を含む30名が選考された。受賞対象となった博士論文研究は、同氏が千葉大学大学院自然科学研究科にて行った「不斉結晶環境下での光化学反応に関する研究」であり、アキラルな化合物の結晶相光反応による不斉の発現反応が、自然界におけるキラリティーの偏りの謎を解明する大きな鍵となることを示したものである。同氏は、不斉中心を持たない様々な基質がその結晶化の際に不斉結晶を形成し、その不斉環境下に固定された基質分子に対して結晶状態のまま光反応を行うことで、光学活性体を高収率・高立体選択的に合成できることを明らかにした。この研究成果によって、結晶相光反応による不斉の発現がもはや例外的な現象ではなく、高い一般性を有するものであることが示され、さらには自然界の光学活性化合物の自然発生のメカニズムを説明する上で大きな手がかりを与えた。

高橋氏は、有機化学をはじめ無機錯体化学に至るまでその研究領域を意欲的に広げている。4月より静岡大学工学部助手に着任され、新たに生体高分子化学の世界において、その研究の幅はさらに広がりつつある。今回の受賞を関係者一同からお祝いすると共に、今後一層のご活躍を祈りたい。

(藤田 誠 記)

高橋雅樹博士に 井上研究奨励賞

平成10年4月から一年間、錯体化学実験施設に日本学術振興会特別研究員として在籍された高橋雅樹氏は、平成10年度の井上研究奨励賞を受賞された。この賞は、過去3年の間に、理学・工学・医学・薬学・農学等の分野で博士の学位を取得した35歳未満の研究者で、自然科学の基礎的研究において新しい領域を開拓する可能性のある優れた博士論文を提出した研究者に与えられるものである。今年

分子基礎理論第四研究部門 (分子エネルギー変換研究部門)

Tembe, B. L.教授

錯体触媒研究部門 (分子エネルギー変換研究部門)

Bu, Xian-He 助教授

Prof. Tembe, B. L.

Tembe さんの出会いは遠く 1978 年に遡る。私が博士研究員として New York 州、Long Island の田舎町 Stony Brook にある New York 州立大学に赴任しどき、彼は同じ研究室に在籍する大学院学生であった。初めての海外生活で右も左もわからず苦労していた私は生活の面でも研究の面でも大いに彼の助けを借りたものである。特に研究の面では、私にとっては初めてであった UNIVAC というコンピュータの使いかたを一から教えていただいた。

そのような訳で、私と Tembe さんは研究の面でかなり近い仕事をしている。すなわち、二人とも液体、溶液の理論化学的研究を行っている。Tembe さんの学位の仕事はいわゆる Fe^{2+} - Fe^{3+} の電子移動反応の理論であり、H. L. Friedman および M. Newton と一緒に行った仕事は分子レベルでの反応理論のその後の発展の先鞭をつけるものとなった。Tembe さんの名前を世に知らしめた最も有名な仕事は分子シミュレーションにより溶媒和自由エネルギーを求める有力な方法である「熱力学的摂動」法の提案である。彼が Houston 大学の客員教授として A. McCammon 教授と行ったこの仕事は、その後、蛋白質のミュー

テーションや Ligand-Receptor 結合常数の評価などに応用され、分子シミュレーションによる蛋白質研究の強力な方法論的基礎となった。

分子研における Tembe さんの研究は主に二つのトピックスに絞られる。ひとつは IMS フェローの Sethia さんと一緒に行っている「溶媒和電子の固有エネルギー計算」であり、他は学振フェローの秋山君と共同で行っている「水溶液中のイオン間の平均力ポテンシャルの計算」である。来所期間が短かつたために、仕事を完了するところまでは行かなかつたがインドに帰国した現在も仕事を継続している。

Tembe さんは 3 月の終わりに帰国したが、帰国する直前に彼の奥さんが二人の子供達を連れて来日した。奥さんも有機化学の研究者で、二人の馴れ初めは Stony Brook 時代の大学院時代に遡るそうである。山手ロッジの自宅で夕食をごちそうになった時の明るい家庭の雰囲気がとても印象的であった。

(平田文男 記)

Prof. Bu, Xian-He

Bu さんは、中国南開大学化学科の教授で、昨年



6月17日から特別協力研究員として、12月15日からは文部省外国人研究員として、私たちのグループに所属しています。本年10月まで、日本に滞在の予定です。現在は、金属イオンを用いた三次元ネットワークの構築に興味をもたれており、新しい機能の創製を目指して日々研鑽を積まれています。

Buさんは、1986年に南開大学を卒業の後、同大学院を中退して、1990～1992年に広島大学医学部総合薬学科の木村榮一教授の研究室に国費留学生として所属されました。私と同じ実験室で、「複核金属錯体を用いた光化学的二酸化炭素還元反応」および「抗HIV活性化合物の開発」に関する研究に従事されました。初めて来日されたときには、既に日本語を流暢に話されていました。たった3ヶ月の日本語研修の後だったと聞き、大変驚きました。帰国後1992年に南開大学でPhDを取得された後、1995～1996年に再び同研究室で学振研究員として滞在し、1995年には広島大学でも博士号を取得されました。その直後に、31才という異例の早さで南開大学の教授に昇進され、数名の学生とともに機能性分子の合成に関する研究を続けられています。

南開大学は天津市の中心にあります。3年近く前に南開大学を訪問したことがあります、大変広々とした美しいキャンパスが印象的でした。私が訪問したときは、名古屋から北京に飛び、高速を3時間程走らないといけませんでしたが、昨年5月に天津～名古屋の直行便が開通し片道2時間位になったので、名古屋エリアからは大変便利になりました。日本でよく見られる天津飯や天津麺はどこにも見当

たりませんでしたが、天津甘栗についてはさすが本場らしく、日本で売っているものより2倍も大きくて美味しいものを賞味することができました。

Buさんは、トータルで4年以上日本に滞在していますので、日本語も流暢ですし、日本の文化にもすっかり馴染まれています。現在、奥様と5才の息子さんと一緒に三島ロッジに滞在しておられますが、大変家族想いで子煩惱です。最初にお会いしてからはや10年近くが経ちますが、友人として、また大変頼もしい共同研究者として長くお付き合いをさせていただきたいと思っています。

(塩谷光彦 記)



Gao, Yongli

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 客員教授
(極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 宇理須グループ)

B. S. of physics from Central-south Inst. of Mining and Metallurgy (1981). Ph.D. of physics from Purdue University (1986). Research Associate in University of Minnesota (1986-1988). Assistant professor (1988 - 94) and associate professor (1994-) in Department of Physics and Astronomy, University of Rochester. Research interests in experimental surface physics. Specifically, spectroscopic studies of surface electronic structure, electronic interactions, photoluminescence and electroluminescence, and morphology of interfaces and interface formation. Subjects of studies include interface formation in organic semiconductors, ultrafast electronic dynamics in metals, semiconductors, and quantum wells, surface stability and interface formation of high Tc superconductors, low temperature Schottky barrier formation and dielectric layer formation on III-V semiconductors, surface melting, and mechanism of x-ray photoelectron and Auger electron diffraction.



Ulanski, Jacek Pawel

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 客員教授
(分子集団研究系物性化学研究部門 薬師グループ)

Graduated in Physics in 1972 from the University of Lodz, Poland. PhD in 1978, habilitation in 1991 and professor in 1997 at the Faculty of Chemistry of Technical University of Lodz.

In 1985-86 visiting scientist at the Max-Planck Institute for Polymer Research in Mainz, Germany. Recent university appointments include: visiting professor at University of Lyon I, France (1991), associate professor (from 1995) and professor (from 1997) at the Institute of Polymers, Technical University of Lodz. From 1995 head of the Division of Polymer Physics, which in January 1999 was transformed into the Department of Molecular Physics of Faculty of Chemistry, Technical University of Lodz.

Research interests: dielectric and electrical properties of polymers and of molecular crystals (dielectrics, photoconductors, conductors and superconductors); molecular relaxations, phase transitions, transport mechanisms of energy and charges; dielectric spectroscopy; Raman and micro-Raman spectroscopy; modification of polymers by physical methods (blending, doping); applications of dielectric and electrical methods for in situ monitoring of resin curing and network formation.

At IMS: spectroscopic studies of conducting organic crystals and polymer composites in the Professor Kyuya Yakushi's group.



Sutcliffe, Brian Terence

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 文部省外国人研究員

Academic Record:

1959-62: Studied at Keele and at the University of Manchester for a Ph. D. on "Theoretical studies of the properties of some atoms and small molecules" under Prof. R. McWeeny.

1965-98: Lecturer, Senior Lecturer, Reader and Professor in Chemistry, University of York.

1998- present: Visiting Professor, Lab. de Chimie Physique Moleculaire, Univ. Libre de Bruxelles.

Research Interests: Molecular electronic structure calculations using both non-empirical methods and density functional methods; the calculation and modelling of electronic potential energy surfaces for the study of the molecular rotation-vibration problem. The many-surface problem; inter-surface coupling and the breakdown of the Born-Oppenheimer approximation. The calculation of molecular rotation-vibration spectra both by variational and finite-element methods. The use of computer aided algebra in constructing Hamiltonians and trial functions in non-standard coordinate systems. I am at present visiting in Prof. Iwata's group and hope to undertake a study of the interaction of a pair of polyatomic fragments.



Mil'nikov, Gennady

理論研究系分子基礎理論第二研究部門 学振外国人招へい研究者

I was graduated from the Physical Department of Moscow University at 1986 and obtained PhD at 1992 from the same University. My research interests at that time were related with solid state physics and the PhD thesis were devoted to a theoretical study of semiconductor's surfaces and 2D electron gas in the magnetic field, including the influence of random potential and inter-particle interactions. I have a permanent position at the Institute of Structural macrokinetics of Russian Academy of Science. Since 1993 I have been working mostly in chemical physics. The primary research interests are the quantum dynamics of elementary chemical processes and the multidimensional semiclassical theory of tunneling. At the present time I am a post-doctoral scientist (JSPS fellowship) at the Department of Theoretical Study in the Institute for Molecular Science in Prof. Nakamura's group, carrying out a theoretical study of quantum dynamics and reaction mechanism in elementary chemical processes.



Biradha, Kumar

錯体化学実験施設錯体物性研究部門 学振外国人特別研究員

I graduated from the University of Hyderabad, Hyderabad, India in 1991 and subsequently obtained Ph.D. in Structural Organic Chemistry in 1996 from the same university. From January 1997 to August 1998, I worked as a postdoctoral fellow in the research group of Prof.



M.J. Zaworotko, Saint Mary's University, Halifax, Canada. Since October 1998 working as a Post-doctoral fellow (JSPS) in the group of Prof. Makoto Fujita at the coordination Chemistry laboratories in the Institute of Molecular Science.

My research activities are multidisciplinary as they encompass my interests in noncovalent synthesis (using coordination bonds, weak and strong hydrogen bonds and $\pi\cdots\pi$ interactions), organic synthesis and X-ray crystallography. In particular, my interests concentrated on designing of coordination polymers and organic salts with desired functional properties such as porosity and nonlinear optical activity. For further information please look at my home page: <http://www.geocities.com/athens/troy/4195/>.

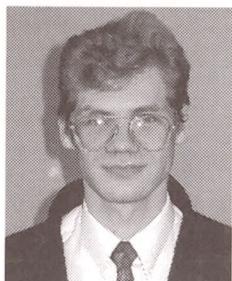


Hu Ying

分子構造研究系分子動力学研究部門 学振外国人特別研究員

I was born in 1963, in Shanghai, China. I graduated in Department of Physics, Fudan University with an associate degree (1982), East China Normal University with a B.S. degree (1989), and Analytical Research Center, Fudan University with M.S. course (1991). In 1997, I received my Ph.D. degree in physical chemistry from Faculty of Science, Kwansei Gakuin University, Japan, under the supervision of Professor Yasushi Koyama. My dissertation work involves isolation and spectroscopic characterization of cis-trans isomers of retinoids and carotenoids, which we could finally answer the question of why 11-cis carotenoids are not present in the nature. The results provided some deeper insights into the natural selection of the particular cis configurations between vision and photosynthesis. Before coming to IMS, I worked in Analytical Research Center of Fudan University, Shanghai, China (1982-1993 and 1997-1998).

I came to IMS in December of 1998 and joined Professor Teizo Kitagawa's research group as a JSPS postdoctoral fellow. My current research project is about the mechanism of protein folding in myoglobin using time-resolved UV resonance Raman spectroscopy. In this work, I will explore the protein folding mechanism in nanosecond region with a laser-induced temperature-jump setup. My hobby is swimming, tennis, music and go etc.



Arzhantsev, Sergei Yu

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 学振外国人特別研究員

Graduated in physics in 1993 and Ph.D. (Laser physics) in 1997 from M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia.

Research interests: Time-resolved laser spectroscopy, fluorescence spectroscopy, Raman spectroscopy, ultra-fast lasers.

My current work in Prof. Tahara group concerns the study of ultra-fast processes taking place in molecules (excited-state intramolecular proton transfer, for example) by using femtosecond time-resolved laser spectroscopy.



Pavel, Nicolaie Ion

分子制御レーザー開発研究センター 学振外国人特別研究員

Nicolae PAVEL was born in Stanesti-Arges, Romania in 1965, 05 December. He received a MSc degree from Faculty of Physics of Bucharest University in 1990 and a PhD in Physics from Institute of Atomic Physics, Bucharest - Romania in 1997.

In 1990 he joined Institute of Atomic Physics, Bucharest under a junior-researcher position. Between September 1996 and March 1998 he was with Fukui University of Japan under a MONBUSHO research-student scholarship. Also, between June 1998 and March 1999 he was with Mitsubishi Electric Co., Ofuna - Kamakura, under a visiting-researcher position. He is now with Laser Research Center of Institute for Molecular Science, Okazaki - Japan, under a two-years JSPS postdoctoral grant and Associate Prof. Dr. Takunori TAIRA supervising. He is keeping also a researcher position at Institute of Atomic Physics, Bucharest - Romania.

N. Pavel research subjects included study of thermal-effects induced by optical pumping and design of high-power solid-state laser (flash-lamp and diode-laser pumped, one and two-rod Nd:YAG media, MOPA system), industrial application (such as cutting, drilling, welding, surface-cleaning, etc.) and medical application (ophthalmology and lithotripsy) of 1064 nm wavelength, laser emission in diode-pumped miniature systems (Nd:YAG, Nd:YVO₄, Yb:YAG), etc. Presently, he is working for designing of a high-brightness diode-pumped Yb:YAG microchip laser for non-linear frequency conversion application. At this time he has more than 30 papers published or presented at International Conferences.

I would like to express my acknowledge to Associate Prof. Takunori TAIRA for his permanent support and help during my research period at Fukui University.



Puspita, Waheeda Jahan

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

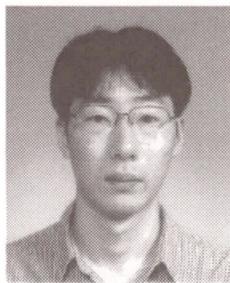
Graduated in chemistry in 1991 from the Dhaka University, Bangladesh. Ph.D. in bioinorganic chemistry in 1999 from the Nagoya University under the supervision of Prof. Osamu Yamauchi on structures and solution equilibria of copper(II) complexes involving acidic and basic amino acids and peptides.

My research interests are on coordination chemistry and bioinorganic chemistry.

At the IMS I am recently joined in Prof. Watanabe's research group (as a visiting scientist) to study molecular mechanisms of heme enzymes.

Hobbies: music, reading, travel and ikebana.





まつ い とし たか
松 井 敏 高

相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 学振特別研究員

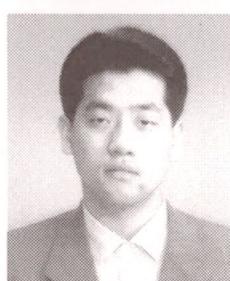
平成10年度総合研究大学院大学博士課程修了した後、引き続き渡辺研究室で学振の研究員としてお世話になっております。現在は、ヘムタンパク質による小分子の活性化メカニズムの解明、酵素反応の制御などに興味を持って研究を進めています。分子研に来て既に4年になりますが、このような文章を書かせていただいたのを良い機会として、また心機一転がんばりたいと思います。今後ともよろしくお願いします。



かわ ぐち ひろ ゆき
川 口 博 之

錯体化学実験施設錯体合成研究部門 助手

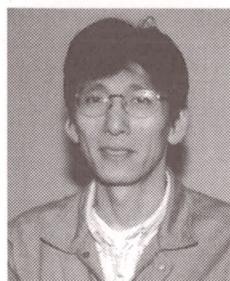
流動部門助手として名古屋大学大学院理学研究科より転任しました。生まれは大阪です。カルコゲニド錯体の合成を中心に無機化学・有機金属化学の研究を行っています。分子研への転任を機会に自分の核となる研究成果が得られるように努力しますので、よろしくお願いします。



にし かわ たけ し
西 川 武 志

理論研究系分子基礎理論第一研究部門 リサーチ・アソシエイト

富山県出身。平成10年9月慶應義塾大学大学院理工学研究科後期博士課程修了。平成9年4月より平成10年9月まで分子研電子計算機センター特別共同研究員。平成10年10月1日より現職。現在は岡本助教授のグループに属し、分子シミュレーション技法を用いて物性を予測する研究を行っております。分子研では様々な分野の最先端の研究者の方と交流を深めていきたいと思っております。よろしくお願いします。



すず い みつ かず
鈴 井 光 一

技術課第三技術班装置開発技術係 係長

平成10年10月より分子研技術課に勤務することになりました。平成7年まで分子研の古参の職員として勤務しておりましたが、その後、名古屋大学理学部に赴任し、3年間の修行を終え戻って参りました。なぜ新人なのか、と思われる方もおられますか、今後いろいろお世話になります、どうぞ宜しくお願いいたします。



こ ばやし かず ひろ
小林和宏

技術課第三技術班装置開発技術係 係員

名古屋大学理学部天体物理学研究室、装置開発室を経て平成11年10月より分子研装置開発室へ3年間の期限で人事交流となりました。趣味は仕事と言いたいところですが、四輪、二輪、オーディオ、絵画等々たくさんあります。よろしくお願ひします。



Maksimuk, Mikhail Yur'yevich

分子集団研究系物性化学研究部門 非常勤研究員

I was born 1966 in the town of Toropets, Tver region, Russia. In 1989 I graduated from Moscow Institute of Physics and Technology, faculty of General and Applied Physics, my specialization being solid state physics. Before coming to IMS, I worked in the Institute of Solid State Physics, Chernogolovka, Russia where I received my Ph.D. in 1996. My Ph.D. thesis title is "Investigation of optical breakdown in an absorbing inclusion in the volume of alkali-halide crystals." Since then I studied fullerene compounds by infrared and visual spectroscopy. My scientific interests are visual, infrared and Raman spectroscopy of solids.

From October 1998 I work as post-doctoral scientist (IMS fellow) in the group of Prof. Kyuya Yakushi. In IMS I work on the study of organic conducting materials. I am to stay here in Okazaki until October 2000.



さか い まこと
酒井誠

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 助手

早稲田大学理工学研究科博士課程中退後、早稲田大学理工学部助手を経て、平成10年11月より現職。愛知県出身。11年ぶりに愛知県で暮らすことになった現在、日常会話が名古屋弁の生活を楽しんでいます。趣味はスポーツ観戦、観劇、旅、温泉などです。どうぞよろしくお願い致します。



Zaman, Md. Badruz

分子物質開発研究センター 非常勤研究員

Position held: (a) Assistant Professor, Department of Applied Chemistry & Chemical Technology, University of Dhaka, Bangladesh. (May 1996 to-date). (b) Visiting Scientist, Institute for Molecular Science, Japan (Dec. 1996 to March 1997). (c) Lecturer, Department of Applied Chemistry & Chemical Technology University of Dhaka, (Nov 1990 to April 1996).

Academic Qualification: Ph.D. (1996) The Graduate University for Advanced Studies, Japan. M.Sc. (1990) and B.Sc. Honours (1988) Dhaka University, Bangladesh



Research interests: (a) Design, synthesis, and characterization of new organic and/or inorganic charge-transfer materials having interesting electrical, magnetic and optical properties in the solid state (b) Development of supramolecular architecture based charge transfer materials involving hydrogen-bonded network.

I am currently working in Professor Yamashita's research group studying single component conductors based on organic molecules with small HOMO-LUMO gaps. I am also trying to develop noncovalent interactions between donor-acceptor molecules to control molecular recognition.

My wife Waheeda J. Puspita assists me to enjoy the work and life in Japan.



くり むら すなお
栗 村 直

分子制御レーザー開発研究センター 助手

平成2年3月に早稲田大学理工学部物理学科で修士を修了した後、富士通研究所に3年ほど勤務しました。バブル崩壊に伴って研究テーマの打ち切りに遭い、悩んだ末会社を退社して出身研究室に戻りました。学生から助手へと身分を移しながら博士を取得し、米国スタンフォード大学での客員生活を経て、本年3月から分子研にお世話になっています。紆余曲折のあった非線形光学・固体物理もう12年になりましたので、分子研に来たのを機会に自分の領域を拡げていきたいなと思っています。よろしくお願いいたします。



ふな はし やす ひろ
船 橋 靖 博

分子物質開発研究センター 助手

平成11年名古屋大学大学院理学研究科博士課程を修了し、同年3月から分子研にきました。名大では金属酵素の構造と反応のモデル化について検討しました。今後はその手法を用いて、酵素反応における酸素活性化中間体の性質の解明に取り組み、自分自身も相当向上させたいと思います。こちらに来てから、既に様々な方からのご協力をいただいています。これからもよろしくお願いします。



い とう はじめ
伊 藤 肇

分子物質開発研究センター 助手

平成8年3月 京都大学大学院工学研究科博士課程修了、同年4月 筑波大学化学系助手を経て本年3月1日より現職。これまで、ラントニド・ケイ素・銅・金といった元素から合成される有機金属化合物を利用した、有機合成に役立つ新しい反応の開発を中心に研究を行ってきました。今後はこれまでの素反応開発の経験を生かし、光誘起電子移動をKeyとした新しい反応システムを創っていきたいと考えています。



やま とも
山 本 薫

分子集団研究系物性化学研究部門 助手

東京都秋川市出身。東京大学大学院理学系研究科博士過程修了。この四月より現職に着任致しました。これまでには一次元金属錯体の光励起状態の研究と、その制御を目指して分子配列を操作した結晶性薄膜の作製を行って参りました。今後は視点を電子物性に移して、分子性結晶の世界をより深く探求していくこうと思います。さて趣味というよりは特技になってしまった感がありますが、学部時代はよくビリヤードをしておりました。どなたかご一緒しませんか？



くろ さわ こう
黒 澤 宏

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 教授

宮崎大学工学部電気電子工学科から来ました。この2年間はリフレッシュの意味と今後の研究課題の模索を含めて、研究三昧の生活を送りたいと思っています。最近10年間は、真空紫外レーザーおよびランプなどの光源開発とそれを使ったマテリアルプロセッシングをやってきました。分子研ではナノ加工技術の確立とそれを利用してフォトニックバンドギャップ構造の製作を行う予定です。自分の専門は？と聞かれると、「興味のあること」と答えることにしています。



ふく い かず とし
福 井 一 俊

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 助教授

この4月に福井大学工学部電子工学科から流動部門に異動いたしました。二度目の岡崎常駐モードです。一回目（1985～90）のときは極端紫外光実験施設の助手をしておりました。そういう経緯から、放射光を道具として、半導体（主に化合物半導体）を対象に仕事をしております。道具自体の設計等にも関わっていますが、半導体分野での放射光の有用性を示していけたらと思っております。どうぞよろしくお願い致します。



なが おか しん いち
長 岡 伸 一

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 助教授

京都大学理学研究科出身で、北海道大学応用電気研究所、分子科学研究所分子集団研究系、愛媛大学理学部を経て、4月1日から2年間の流動教官として岡崎に常駐することになりました。趣味は下手な書道です。内殻励起後のサイト選択的な解離反応を用いて光のナイフの創成を目指します。また、励起状態における分子内プロトン移動やビタミンEの抗酸化反応にも興味を持っております。どうかよろしくお願いいたします。





たか しま よし ふみ
高嶋圭史

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 助手

4月から流動部門の界面分子科学研究部門助手になりました高嶋です。昨年の3月に広大院理学研究科物理学専攻を修了した後、1年間名古屋大工学研究科で助手をしていました。広大では、高エネルギー電子を物質に入射した時に発生するコヒーレントなX線の研究、名大に移ってからは、放射光施設における光源について研究をしています。今後ともよろしくお願い致します。



え び はら まさ ひろ
海老原昌弘

錯体化学実験施設錯体合成研究部門 助教授

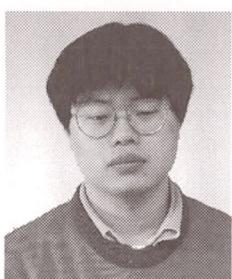
東北大学大学院博士課程のときに受託学生で2年間、1988年に学振のPDとして半年間を分子研で過ごしました。今回、辻康之先生の後任で残り1年間の流動部門の助教授として岐阜大学より参りました。研究テーマは金属原子間結合を持つクラスター錯体の合成とその物性についての研究です。現在は、ほとんど合成例のないランタン型のイリジウム錯体を合成しています。



み しま けん じ
三嶋謙二

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11年3月東京大学工学系研究科博士課程修了後、4月1日より非常勤研究員として中村宏樹先生のもとで研究させていただきました。専門はチャーピパルスを用いた化学反応のレーザー制御の理論的研究で、光解離、光脱離反応やラマンスペクトルの量子制御の研究を行ってまいりました。これからは、より解析的なアプローチによって、より広い視野から研究しようと思っています。どうぞ宜しくお願いいたします。



さ えき もり ひさ
佐伯盛久

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 非常勤研究員

平成11年東京大学大学院総合文化研究科博士課程修了。同年4月より分子研にきました。今までではクラスター負イオンの電子状態や反応性に関する研究を行ってきました。好きな食べ物はたこ焼きや広島焼きです。よろしくお願いします。

つか だ ひろし
塚 田 浩

分子集団研究系物性化学研究部門 非常勤研究員

平成11年3月京都大学大学院博士課程修了後、同年4月1日より現職。核磁気共鳴（NMR）を実験手段として、微視的な観点から有機導体の電子状態を調べる研究を行っています。いろいろな研究分野の人と交流することにより幅広い視野に立って研究を進めていきたいと思っています。趣味は、音楽鑑賞と野球観戦です。広島市民球場で見かけた時は、ぜひ声をかけてください。



お の まさ き
小 野 正 樹

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 非常勤研究員

学習院大学大学院博士課程を経て、平成11年3月に博士（理学）を取得。4月より反応動力学部門にお世話になっています。いままで芳香族炭化水素結晶中（表面も含む）における励起状態のダイナミクスを研究してまいりました。こちらではシンクロトロン放射光を用いて、気相分子の励起状態ダイナミクスについて研究を行います。よろしくお願ひします。



たけ ぞえ のり たか
竹 添 法 隆

極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門 非常勤研究員

平成11年3月宮崎大学大学院工学研究科博士後期課程を修了後、4月1日より現職。宮崎大学では真空紫外光を用いたマテリアルプロセッシングに関する研究を行っていました。こちらではフォトニックバンドギャップ構造の形成を目的とした、放射光を用いたナノ加工プロセスに関する研究を行う予定です。現在新しいラインの建設中ですが、超高真空装置の取り扱いは素人同然ですので刺激的な日々を過ごしています。趣味は野球、釣り、キャンプ等体を動かすことが好きですので何かにつけ声をおかけ下さい。短い間ですがよろしくお願ひいたします。



しょう じ いち ろう
庄 司 一 郎

分子制御レーザー開発研究センター 非常勤研究員

北海道出身。95年1月東京大学工学系研究科物理工学専攻博士課程中退後、99年3月まで東京大学工学部助手。これまで非線形光学の分野でさまざまな材料の非線形感受率の評価を行ってきました。分子研ではその経験を活かし、平等グループで開発している高出力固体レーザーを光源とした、中・遠赤外光発生用の高性能波長変換デバイスの研究・開発に精力的に取り組む所存です。どうぞよろしくお願ひいたします。





みず たに まもる
水 谷 守

分子物質開発研究センター 非常勤研究員

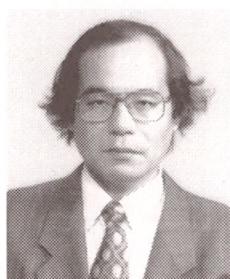
岐阜県出身。平成11年3月名古屋工業大学大学院博士課程修了。藤井助教授のグループに所属しています。大学院では、非共有結合性相互作用による分子認識能と構造制御に関する研究をしていました。分子研では、Cu(I)-酸素錯体の電子状態の研究を行っていきます。この春からは一人暮らしも始まり、新しい環境で心機一転がんばっていきたいと思いますので、どうぞよろしくお願いします。



みず の みさお
水 野 操

技術課第二技術班極端紫外光科学研究系 技術係員

平成11年3月早稲田大学大学院理工学研究科後期博士課程を1年で中退し、4月より田原グループでお世話になることになりました。おもに時間分解分光法をもつて溶液中での光化学反応過程についての研究に取り組んでいきたいと考えております。岡崎は住みやすい町なので、分子研以外でもいろいろ活動の幅を広げていきたいです。スポーツはするのも（バレーボール、水泳）、見るのも（野球、大相撲）好きです。どうぞよろしくお願ひいたします。



た なか ひで き
田 中 秀 樹

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員教授

1984年京都大学大学院工学研究科博士課程を修了後、学振研究員、分子研技官、京大工学部助手を経て、1998年4月より岡山大理学部教授。計算機の発展と研究方法の多少の進歩はありますが、12年前に分子研で大峰先生（現名古屋大教授）と行っていた液体の水も含めて水溶液、氷、包接水和物の研究を続けています。分子研では色々な刺激を受けて、今後の研究に生かしたいと考えています。



はし もと けん ろう
橋 本 健 朗

理論研究系分子基礎理論第三研究部門 客員助教授

'89年慶應義塾大学理工学研究科博士課程修了。理研基礎科学特別研究員、分子研助手を経て、'93年に都立大学に移りました。今回は理論研究系の客員としてお邪魔しますが、理論の方のみならず実験の方と議論ができるることを楽しみにしています。溶媒和クラスターの構造と電子状態を長く研究してきました。クラスターに関する興味はつきないので、この1年はクラスター相手でも視点を変えて冒険したいと思います。

あか さか たけし
赤 阪 健

分子構造研究系分子構造学第二研究部門 客員教授

筑波大時代から始めましたフラーレン化学に魅了されて6年間没頭してきました。フラーレン、金属内包フラーレンの構造と分子変換を研究主題にしております。現在フラーレンの科学は、一段落着いて研究が下火になったがごとく伝えられておりますが、金属内包フラーレン等をはじめとする新しいフラーレン系炭素クラスターの分子科学は、ここ1、2年で全く新しい展開を迎えるものと確信しております。

たま い なお と
玉 井 尚 登

電子構造研究系電子構造研究部門 客員助教授

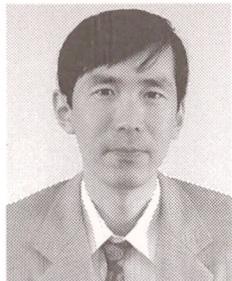
1983年大阪大学大学院博士課程中退後、分子科学研究所・機器センター助手、北海道大学工学部助手、新技術事業団・増原極微変換プロジェクト研究員(GL、技術参事)を経て1994年から関西学院大学理学部化学科助教授をしています。フェムト秒レーザーを利用した超高速現象の化学反応の研究と、SNOMやSTM等の走査型プローブ顕微鏡とパルスレーザーを組み合わせたマイクロ化学の研究を展開しています。宜しくお願ひいたします。

とく もと まどか
徳 本 圓

分子集団研究系分子集団研究部門 客員教授

広島県因島出身。1970年東京大学教養学部基礎科学科卒。同年通産省工業技術院電気試験所(現電子技術総合研究所)に入所。現在、同所材料科学部主任研究官・ラボリーダー。東京理科大学連携大学院教授(理工学部)を併任。4月より現職。1981年から通産省の次世代産業基盤技術研究開発制度のもとで約10年間、「有機超伝導体」の研究に携わりました。その後C60超伝導体の出現をきっかけに、フラーレンやカーボンナノチューブを含む π 電子系分子導体の、超伝導・磁性および磁性と導電性の相関などにも関心を持つようになりました。なるべく頻繁に分子研にお邪魔して、小林速男教授をはじめ分子研の皆様と有意義な時間を過ごしたいと思います。よろしくお願ひします。





もり 森 健彦

分子集団研究系分子集団研究部門 客員助教授

1994年3月まで10年近くを過ごした分子研に、1999年4月より客員としてお世話になっております。現在の東京のアジトの方も1999年4月より組織替えになり、東京工業大学大学院理工学研究科有機・高分子物質専攻となりましたが、実質は工学部有機材料工学科のままです。大岡山キャンパスの一番奥の、有史以前には資源研であったという伝説のある建物に住んでおります。有機導体の開発と物性に関する研究を行っております。よろしくお願ひいたします。



木村 真一

極端紫外光実験施設 客員助教授

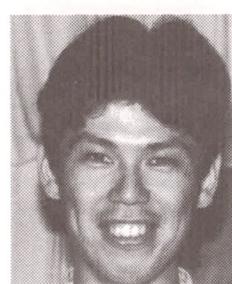
平成3年東北大学大学院理学研究科博士課程修了。学振特別研究員、神戸大助手、分子研助手を経て、平成10年より神戸大学大学院自然科学研究科助教授。分子研レターズ30号の新任者紹介を書いたと思ったら、今度は40号でした。これも何かの因縁でしょうか。第3世代放射光源が普通になりつつある今、UVSORは岐路にたっていると思います。UVSORの何かお役に立てればと考えています。よろしく。



相田 卓三

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員教授

1984年に東京大学大学院工学研究科合成化学専攻にて学位取得後、東京大学工学部合成化学科で助手・講師・助教授（井上研究室にて錯体触媒を用いる高分子の精密合成や炭酸ガスの光固定を研究）、その後、改組により同大学工学系研究科化学生命工学専攻での助教授（分子認識、超分子化学、高分子精密合成、光化学を研究）を経て、1996年より現職（東京大学大学院工学系研究科化学生命工学専攻教授）にて研究室の運営にあたっております。専門は、高分子化学、超分子化学を基礎とした生体関連機能性分子・材料の設計です。



浜地 いたる

錯体化学実験施設配位結合研究部門 客員助教授

1988年に京都大学大学院工学研究科合成化学専攻で学位取得後、すぐ九州大学工学部合成化学科で3年半助手（國武研究室で分子集合体と蛋白質との相互作用を研究）、その後同学科助教授（新海研究室でヘム蛋白質やリボヌクレアーゼ、レクチンなど生体高分子の有機・無機化学的なengineering手法の開発を研究）、現在（改組、大学院重点化などで九州大学大学院工学研究科物質創造工学専攻助教授）に至っています。



たなかひさし
田中 寿

分子集団研究系分子集団動力学研究部門 学振特別研究員

この3月に東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了し、4月から分子研で研究させていただくことになりました。設備的・人材的に恵まれた環境を十分に生かして新たな知識・技術を身に付けつつ、岡崎の生活を楽しみたいと考えています。趣味は合唱・登山。(でも山の上では歌いませんが)



すみともなり
墨智成

相関領域研究系分子クラスター研究部門 学振特別研究員

平成11年九州大学大学院工学研究科博士課程を修了し、4月から引き続き三好研究室でお世話になっております。博士課程では分子軌道法と分子動力学法を用いて、液体水銀に関する融解現象、動的特性および熱力学的性質を研究してきました。今後は液体金属の積分方程式理論に基づいた研究も行っていきたいと思っております。いろいろお世話になると思いますが、今後ともよろしくお願い致します。



ふじのたつや
藤野竜也

極端紫外光科学研究系基礎光化学研究部門 学振特別研究員

平成10年東京工業大学総合理工学研究科博士課程修了。埼玉県坂戸市出身。4月1日より現職。これまで固体表面上での振動緩和に関する研究を行ってきました。分子研では溶液分子の励起ダイナミクスを各種の時間分解の手法を用いて明らかにしたいことうと思っています。よろしくお願いいたします。



いわさきこうた
岩崎光太

極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門 学振特別研究員

一昨年の12月よりお世話になっています。博士課程は核融合研究所（総研大、平成9年修了）で過ごし、可視及び真空紫外域での高温プラズマの分光計測に携わっていました。現在は見附グループで希ガスの放射光レーザー併用光電子分光実験に従事しています。趣味はバイク、スキー等々です。これからもよろしくお願いします。



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 |
|-------------------------|--|----------|----------|
| 平野真也 | 赤外反射吸収分光法によるSi(100)表面に化学吸着した水素（重水素）の表面反応に関する研究 | 理学 | H11.3.24 |
| 荒木光典 | Microwave spectroscopy of deuterated molecular ions and structures of pyramidal XY_3 molecules | 理学 | H11.3.24 |
| 後藤義夫 | Reactive Intermediates in Catalyses by Heme Enzymes | 理学 | H11.3.24 |
| Bandyopadhyay, Pradipta | Theoretical investigation of structures and spectroscopy of molecules and clusters: a combination of electronic structure theory and multicanonical Monte Carlo simulation | 理学 | H11.3.24 |
| Nath, Krishna G. | Photoemission experiments in rare earth compounds and magnetic thin films: Study of the electron correlation effects | 理学 | H11.3.24 |
| 銘苅春隆 | 放射光励起光化学反応研究用多層膜ミラー分光器ビームラインの開発 | 理学 | H11.3.24 |
| 米原由華子 | Studies on Electronic Structures of Quasi One-Dimensional Phthalocyanine Conductors, NiPc(AsF ₆) _{0.5} and CoPc(AsF ₆) _{0.5} | 理学 | H11.3.24 |

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 |
|-------|---|----------|----------|
| 柴田武 | 時間分解画像観測法を用いたアセチルラジカル単分子解離の研究 | 理学 | H11.3.24 |
| 佐藤あかね | Development and Characterization of New Molecular Conductors Based on the Multi-Chalcogen π Molecules | 理学 | H11.3.24 |
| 寺西慶哲 | 時間依存非断熱遷移とその制御の理論的研究 | 理学 | H11.3.24 |
| 初井宇記 | ニッケル錯体の内殻X線吸収分光 | 理学 | H11.3.24 |
| 今村穰 | Theoretical Studies on Electronic Properties of Organic Conductors | 理学 | H11.3.24 |

平成11年度（4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 | 小林 克彰 | 錯体化学実験施設 | 植物によるCO ₂ 固定反応のモデル化 |
| | 佐藤 康一 | 分子制御レーザー開発研究センター | 高機能レーザー用固体素子の開発研究 |
| | 東門 孝志 | 錯体化学実験施設 | 金属錯体によるCO ₂ の活性化 |
| | 藤芳 晓 | 極端紫外光科学研究所 | 時間分解分光による凝縮相分子ダイナミクスの研究 |
| 機能分子科学 | 大窪 清吾 | 分子構造研究系 | 金属内包フラーレンのE S R測定 |
| | 千葉 順哉 | 錯体化学実験施設 | 自己集積型人工DNAの設計と合成 |
| | 坪内 雅明 | 電子構造研究系 | 時間分解光電子画像分光法による化学反応の研究 |
| | 宮下 尚之 | 理論研究系 | 分子性導体の磁気的秩序と金属絶縁体転移の理論的研究 |
| | 山崎 健 | 理論研究系 | 溶液中のNMRスペクトルに対する分子論的計算方法の開発 |

中赤外一次元検出器

吉田久史・浅香修治

平成9年度採択のIMSマシン「中赤外一次元検出器」(提案者:分子構造、小倉尚志)の開発について結果を報告する。

この装置は256素子のHgCdTe(MCT)光電導素子アレイ(浜松フォトニクス、図1)を用いた、中赤外域のスペクトロメータである。図2に製作したシステムのブロック図を示す。



図1 HgCdTe光電導素子アレイの外観。外周は液体窒素デュワーである。

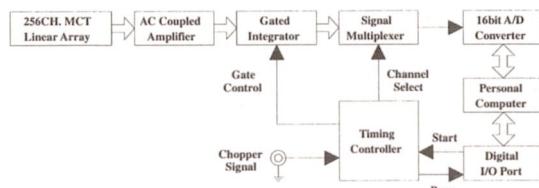


図3 検出器のブロック図

MCT光電導素子からの微弱信号は、256個のAC結合増幅器とゲート積分器で増幅・演算処理される(図3)。そしてその積分器の出力信号は、シグナル・マルチプレクサを通して1チャンネルずつコンピュータに取り込まれる。ここで問題となるのは高ゲインの増幅器を用いたことによる増幅器の温度ドリフトの影響である。われわれは光チョッパのON期間とOFF期間に同期したパルスで積分器にゲートをかけ、それぞれの積分値の差を取ることによりS/Nを向上させた。ハードウェアの負担を抑えるため、この演算処理はコンピュータ・ソフトウェアで実行する。コンピュータはDOS/V機を用い、ソフトウェアの開発はVisual BASICで行った。図4に増幅器とコンピュータの外観を示す。

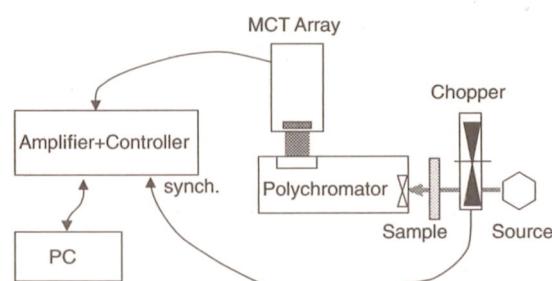


図2 中赤外域スペクトロメータのブロック図

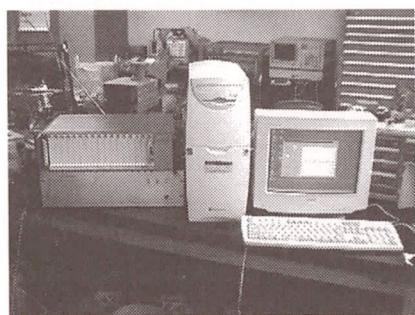


図4 増幅器とコンピュータの外観



使用したポリクロメータはリツー分光器製のMC-85型回折格子分光器である。

標準サンプルとしてポリスチレンフィルムを用い、このシステムの評価を行った。おおよそ4 μm から7 μm の波長範囲で光透過率を測定した。光源としてタンクステンランプを用いた。図5に測定結果を示す。長さ31 mmのMCTアレイ上に結像される分光器出力は波長範囲約1 μm なので、この図は分光器の中心波長をずらした4回の測定結果（一回の測定時間約1分）をつなぎ合わせたものである。ポリスチレンの分光データとして公表されているも

のと類似の透過率曲線が得られ、スペクトロメータとしての信頼性は確認された。MCTアレイの素子間隔0.1 mmと回折格子分光器の分散からこのシステムの波長分解能は約7 nmと見積もられる。しかしながら、この測定では光源の光量不足のために回折格子分光器の入り口スリットを大きく明けていたので、分解能の限界にまでは達しなかった。

提案者は現在東京大学に所属するので、新所属先でこのシステムを実用に供する予定である。

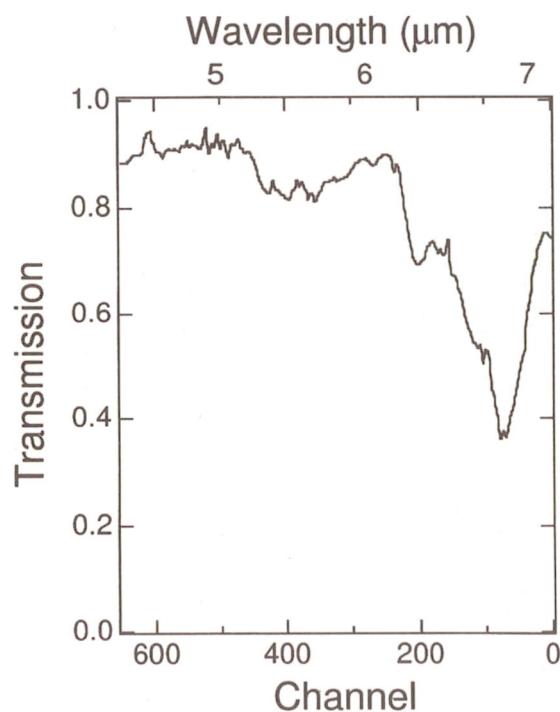


図5 ポリスチレンの透過スペクトル

第62回岡崎コンファレンス

分子科学における構造的階層：ナノ・メゾ構造からミクロ構造まで

Structural Hierarchy in Molecular Science: From Nano- and Mesostructures to Macrostructures

開催日 平成11年1月10日-13日

開催場所 岡崎コンファレンスセンター

提案代表者 東京大学大学院工学系研究科 相田卓三
分子科学研究所 藤田誠

| | | |
|---------------|--|---|
| 招待外国人講演者（講演順） | Julius Rebek, Jr. | (The Scripps Research Institute, USA) |
| | Jerry L. Atwood | (University of Missouri-Columbia, USA) |
| | Steven C. Zimmerman | (University of Illinois, USA) |
| | Achim Müller | (Universitat Bielefeld, Germany) |
| | Kimoon Kim (Pohang University of Science and Technology, S. Korea) | |
| | Jeffrey S. Moore (University of Illinois at Urbana-Champaign, USA) | |
| | Craig J. Hawker | (IBM Almaden Research Center, USA) |
| | Andrew D. Hamilton | (University of Yale, USA) |
| | David N. Reinhoudt | (University of Twente, The Netherlands) |
| | Roeland J. M. Nolte | (University of Nijmegen, The Netherlands) |
| | Virgil Percec | (Case Western Reserve University, USA) |
| | James D. Wuest | (Université de Montréal, Canada) |
| | Michael J. Zaworotko | (University of Winnipeg, Canada) |
| | Jean-Pierre Sauvage | (Université Louis Pasteur, France) |

コンファレンスの概要

本岡崎コンファレンスでは、分子構造を基盤としたナノ構造（一般に1-10 nm）、メゾ構造（10¹-10³ nm）、ミクロ構造（>10³ nm）に焦点をあて、これらの階層的構造体を構築する新概念や新手法、さらには従来の小分子には見られない、ナノ・メゾ・ミクロ構造体ならではの機能を中心に討論を行なった。自然界では小分子に始まる階層構造により生体構造までもがつくられることを考えると、我々が自然界に学びながらこのような階層的な物質構築に挑むことが、次世代物質科学における重要な課題の一

つになることは明らかである。

このような主題について、プログラムに示す7つのセッションを設け、各セッション2~4件の招待講演（計20件：外国人14件、日本人6件）を中心とし、会議を進行した。これらのテーマ別セッション講演とは別に、国内若手研究者を中心とした依頼講演（計24件：外国人5件、日本人19件）と一般参加者によるポスターセッション（86件）が行われ、コンファレンスの主旨にも唱われている「国内外第一線の研究者と国内若手研究者のひざをまじえての討議」という目的を十分に達成できたと考えている。



■ セッション1 分子認識—"Molecule-by-molecule"合成への第一歩

小分子から階層構造をつくる基本概念である分子認識をテーマに招待講演2件が行われた。

[招待講演者] Julius Rebek, Jr. (スクリプス研、米国)、新海征治 (九州大学)

■ セッション2 自己組織化ナノ構造

水素結合や配位結合に誘起され、明瞭な骨格を持ったなどのサイズの集合体が自己組織化する系を中心討論が行われた。

[招待講演者] Jerry L. Atwood (ミソウリーコロンビア大、米)、Steven C. Zimmerman (イリノイ大、米)、Kimoon Kim (POSTECH、韓)、Achim Müller (ペレフェルド大、独)

■ セッション3 ナノ構造への共有結合アプローチ: 新高分子・デンドリマー

明確なナノ構造を共有結合形成で構築する手法として、新しい精密重合法やデンドリマーの合成に関する討論が行われた。

[招待講演者] Craig J. Hawker (IBM アルマデン研究所、米)、澤本光男 (京都大学)、Jeffrey S. Moore (イリノイ大、米)、原田 明 (大阪大学)、岡本佳男 (名古屋大学)

■ セッション4 ナノ構造の機能

ナノ構造体やデンドリマーの特異な構造に着目し、これらの構造に特徴的な機能 (人工抗体、光エネルギー捕集、情報記録等) の創出を討論した。

[招待講演者] Andrew D. Hamilton (エール大、米)、David N. Reinhoudt (トゥエンテ大、蘭)

■ セッション5 ナノ構造からメゾ構造へ

メゾスケール領域の物質群は現在最も精密構造制御が困難とされている。メゾスケール構造体を構築する新概念・新手法を中心に討論した。

[招待講演者] Roeland J. M. Nolte (ナイマージエン大、蘭)、Virgil Percec (ケースウエスタンリザーブ大、米)

■ セッション6 ミクロ構造の精密制御

近年急速に展開しつつある結晶工学を中心に、ミクロ精密構造の構築手法を討論した。

[招待講演者] James D. Wuest (モントリオール大、カナダ)、Michael J. Zaworotko (ウイニペグ大、カナダ)、清水敏美 (物質研)

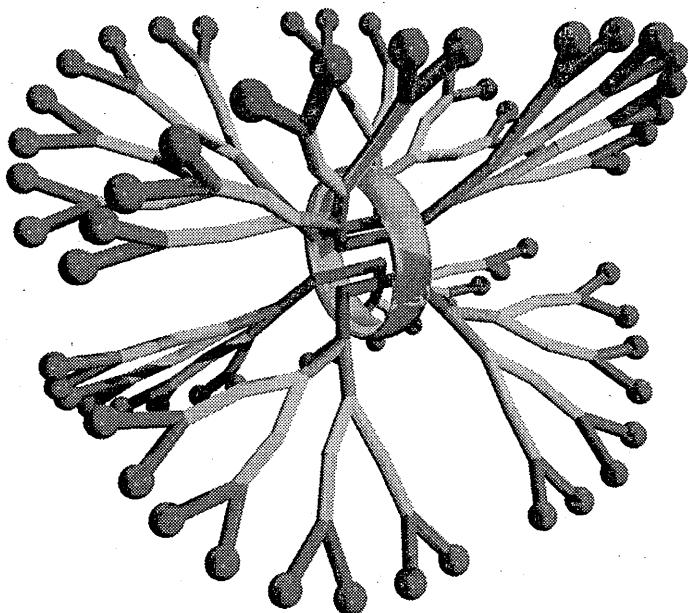
■ セッション7 展望

一分子計測や分子機械構築等、本討論会主題に関する最新の話題とともに、将来展望を討論した。

[招待講演者] 柳田敏雄 (大阪大学)、Jean-Pierre Sauvage (ルイパスツール大、仏)

招待講演者はいずれも本会議の関連領域における一流の先生方で、彼等を一目見ようと参加された方も多い多かったことと思われる。実際、講演の水準は驚くほど高く聴衆をうならせるものがあった。とりわけ最終日の半日セッションにも多くの参加者が会場を去ることなく、会場が常時満席であったことは主催者の大きな喜びであった。

会議はできる限りインフォーマルな雰囲気を心掛けた。軽装を呼び掛けるとともに、招待講演でも講演者の経歴紹介はおこなわず、懇親会では一切のセ



ポスターに用いた
コンファレンス主題のイメージ図

レモニーを行わなかった。このような雰囲気のためか、講演会場だけでなく、コーヒーブレイクや懇親会の席でも活発な討論が繰り広げられた。朝から夕刻までサイエンティフィックプログラムのみのハードな四日間ではあったが、当初の心配とは裏腹に四日間があっという間に過ぎてしまった。美しい絵画や心地よい音楽を心ゆくまで堪能できた夢のような四日間であった。会議終了後、同様の印象をもたれた多くの参加者から暖かい電子メールを頂戴した。この会議を通じて、参加者の中から新しい発想が生まれ、この領域がさらに活性化し、展開していくことがあれば主催者の望外の喜びである。

最後に本コンファレンス開催にご尽力下さった伊藤光男所長、外国人招聘に関して便宜をはかってくれた国際交流課、多大な事務作業をこなしてくれた津田芳子さん、事前準備や当日の進行に昼夜を問わず尽力頂いた主催者両研究室の若手教官、博士研究員、ならびに学生諸氏に厚く御礼申し上げます。

プログラム

January 10

12:00-13:00 *Registration*

13:00-13:20 *Opening Remarks*
Mitsuo Ito (IMS)
Takuzo Aida (The Univ. Tokyo, Japan)

Session 1 Molecular Recognition—The First Event For Molecule-by-molecule Syntheses

Chairperson: Yoshio Okahata (Tokyo Inst. Tech., Japan)

13:20-14:10 *Julius Rebek, Jr. (The Scripps Research Inst., USA)*
"Recognition in Self-Assembly and Encapsulation"

Chairperson: David Reinhoudt (Univ. Twente, The Netherlands)

14:10-15:00 *Seiji Shinkai (Kyushu Univ., Japan)*
"Transcription, Storage and Reading-out of Saccharide Structural Information"

15:00-15:30 *Coffee Break*

Contributed Tasks 1

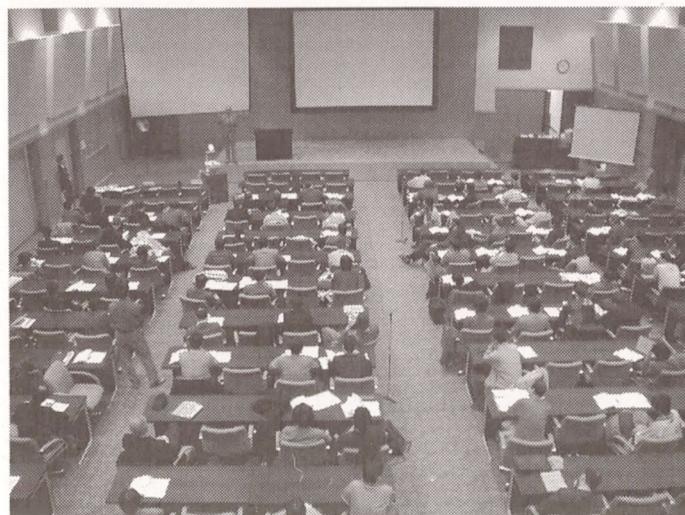
Hall A

Chairperson: Myongsoo Lee (Yonsei Univ., S. Korea)

15:30-15:50 *Tomokazu Iyoda (Tokyo Metropolitan Univ., Japan)*
"Conjugated Assemblies of Functional Redox Units and Their Interactive Properties"

15:50-16:10 *Masaaki Haga (Chuo Univ., Japan)*

メインホールにおける会議風景



"Molecular Assembly of Metal Complexes on the Surface Towards Meso Molecular Structures"

- 16:10-16:30 **Nobuo Kimizuka** (Kyushu Univ., Japan)
"Mesoscopic Supramolecular Assemblies in Organic Media Formed from Lipid-Coated Linear Pt Complexes"

Chairperson: Katsuaki Konishi (The Univ. Tokyo, Japan)

- 16:30-16:50 **Myongsoo Lee** (Yonsei Univ., S. Korea)
"Supramolecular Self-Assemblies of Rod-Coil Molecules in Melt State"

- 16:50-17:10 **Makoto Tadokoro** (Osaka City Univ., Japan)
"Cation Dependent Superstructures Built up by Self-Organization in Hydrogen-Bonded Transition Metal Complexes"

- 17:10-17:30 **Ken Endo** (Kyushu Univ., Japan)
"Optical Self-Resolution of Helical Coordination Polymers from Achiral Components in Crystals. Homochiral vs Heterochiral Interstrand Interactions"

Hall B

Chairperson: Garry S. Hanan (Univ. Waterloo, Canada)

- 15:30-15:50 **Yuji Kubo** (Saitama Univ., Japan)
"Chromogenic Receptors as Nanoscopic Molecular Sensors"

- 15:50-16:10 **Yasutaka Tanaka** (Shizuoka Univ., Japan)
"Solid State Sugar- and Amino Acid-Host Complexation Reaction and Chiral Discrimination"

- 16:10-16:30 **Kuniharu Ijiro** (Hokkaido Univ., Japan)
"Nano- and Mesoscopic Assemblies of DNA Molecules"

Chairperson: Yasutaka Tanaka (Shizuoka Univ.,

Japan)

- 16:30-16:50 **Takahiro Seki** (Tokyo Inst. Tech., Japan)
"Manipulation of Polymer Chain by a Photochromic Monolayer"

- 16:50-17:10 **Garry S. Hanan** (Univ. Waterloo, Canada)
"Bimetallic Receptors With Functionalized Pockets for Substrate Recognition"

- 17:10-17:30 **Kentaro Yamaguchi** (Chiba Univ., Japan)
"Cold Electrospray Ionization Mass Spectrometry for Characterization of the Self-Assembled Nanometer-sized Structures"

- 17:30-20:30 **Poster & Snack**

January 11

Session 2 Self-assembled Nano Structures

Chairperson: Jeffrey S. Moore (Univ. Illinois at Urbana-Champaign, USA)

- 8:40-9:25 **Jerry L. Atwood** (Univ. Missouri-Columbia, USA)
"General Principles for the Design of Nano-Scale Spherical Molecular Assemblies"

- 9:25-10:10 **Steven C. Zimmerman** (Univ. Illinois, USA)
"Supramolecular Dendrimer Chemistry"

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

Chairperson: Hideki Masuda (Nagoya Inst. Tech., Japan)

- 10:30-11:15 **Achim Müller** (Univ. Bielefeld, Germany)
"Powers of Ten" —Type Chemistry: From Clusters via Giant Clusters and Supramolecular Species to Materials"

Chairperson: S. C. Zimmerman (Univ. Illinois, USA)

- 11:15-11:50 **Kimoon Kim** (*Pohang Univ. Sci. and Tech., S. Korea*)
"Self Assembly of Interlocked Structures and Open Framework Materials using Coordination Bones"
- 11:50-12:15 **Makoto Fujita** (*IMS*)
"Construction of Nanostructures by Coordination"

12:15-13:45 **Lunch**

Session 3 **Covalent Approaches to Nano Structures: New Class of Polymers and Dendrimers**

Chairperson: Eiji Yashima (Nagoya Univ., Japan)

- 13:45-14:30 **Jeffrey S. Moore** (*Univ. Illinois at Urbana-Champaign, USA*)
"Conformational Order of Nonbiological Oligomers in Solution"
- 14:30-15:05 **Mitsuo Sawamoto** (*Kyoto Univ., Japan*)
"Multiarmed and Star Polymers by Living Radical and Cationic Polymerizations"
- 15:05-15:40 **Craig J. Hawker** (*IBM Almaden Research Center, USA*)
"Advanced 3-Dimensional Nanoscopic and Microscopic Materials for the Next Generation of Computers"

15:40-16:00 **Coffee Break**

Contributed Tasks 2

Hall A

Chairperson: Wendy Naimark (California Inst. Tech., USA)

- 16:00-16:20 **Masahiko Inoue** (*Osaka Pref. Univ., Japan*)
"Molecular Recognition of Saccharides by Synthetic Polypyridine-Macrocyclic Receptors Possessing a Convergent Hydrogen Bonding Site"
- 16:20-16:40 **Itaru Hamachi** (*Kyushu Univ., Japan*)
"Manipulation of Structure and Activity of Native Enzymes by Organic Chemistry"
- 16:40-17:00 **Kazunari Akiyoshi** (*Kyoto Univ., Japan*)
"Controlled Association between Amphiphilic Polymers and Proteins"

Chairperson: Itaru Hamachi (Kyushu Univ., Japan)

- 17:00-17:20 **Mitsuhiko Shionoya** (*IMS*)
"Molecular Design of Artificial DNAs"

17:20-17:40 **Yoshihito Watanabe** (*IMS*)
"Molecular Design of Hemoproteins: Use of Myoglobin as a Structural Frame"

17:40-18:00 **Wendy Naimark** (*California Inst. Tech., USA*)
"Elements By Design: The Precision And Specificity of Genetically Engineered Proteins"

Hall B

Chairperson: Stefan Hecht (Univ. California, USA)

16:00-16:20 **Hak-fun Chow** (*The Chinese Univ. Hong Kong, P. R. China*)
"Tuning the Solubility and Reactivity of Dendritic Catalysts"

16:20-16:40 **Takashi Kato** (*The Univ. Tokyo, Japan*)
"Self-Organization of Anisotropic Liquid-Crystalline Gels"

16:40-17:00 **Masahiko Yamaguchi** (*Tohoku Univ., Japan*)
"Chemistry of Optically Active Macrocycles Consisting of Helicene"

Chairperson: Hak-fun Chow (The Chinese Univ. Hong Kong, P. R. China)

17:00-17:20 **Keigo Aoi** (*Nagoya Univ., Japan*)
"Block Dendrimers as Molecular Objects"

17:20-17:40 **Stefan Hecht** (*Univ. California, USA*)
"Synthesis and Applications of Novel Functionalized Dendritic Structures"

17:40-18:00 **Masaya Sawamura** (*The Univ. Tokyo, Japan*)
"Synthesis of Nano Structure Metallocenes by the Use of Functionalized Fullerenes"

18:00-19:30 **Supper & Poster**

Session 3-2

Chairperson: Craig J. Hawker (IBM Almaden Research Center, USA)

19:30-20:05 **Akira Harada** (*Osaka Univ., Japan*)
"Cyclodextrin Rotaxanes"

20:05-20:40 **Yoshio Okamoto** (*Nagoya Univ., Japan*)
"Helical Polymers: Synthesis, Conformation, and Function"

January 12

Session 4 **Function of Nano Structures**



Chairperson: Takashi Hayashi (Kyushu Univ., Japan)

8:40-9:25 **Andrew D. Hamilton** (*Univ. Yale, USA*)
"Towards Artificial Antibodies: Protein Surface Recognition by Synthetic Receptors"

9:25-10:10 **David N. Reinhoudt** (*Univ. Twente, The Netherlands*)
"Self-Assembly of (Chiral) Nanostructures"

10:10-10:30 *Coffee Break*

Chairperson: Roeland J. M. Nolte (Univ. Nijmegen, The Netherlands)

10:30-10:55 **Takuzo Aida** (*The Univ. Tokyo, Japan*)
"Molecular Design of Bioinspired Dendrimers"

10:55-13:30 *Photo & Lunch*

Session 5 Toward Meso Structures

Chairperson: Andrew D. Hamilton

13:30-14:15 **Roeland J. M. Nolte** (*Univ. Nijmegen, The Netherlands*)
"Helical Molecular Programming"

14:15-15:00 **Virgil Percec** (*Case Western Reserve Univ., USA*)
"Self-Control Aided Rational Design of Single Molecule Based Nanoarchitectures"

15:00-15:20 *Coffee Break*

Session 6 Precise Control of Micro Structures

Chairperson: Kenji Kobayashi (Tsukuba Univ., Japan)

15:20-15:55 **Toshimi Shimizu** (*National Inst. Materials and Chemical Research, Japan*)
"Proton-Triggered Self-Assembly of Microtubes with Loose Solid Surfaces"

15:55-16:30 **James D. Wuest** (*Univ. Montréal, Canada*)
"Constructing Porous Ordered Materials by the Strategy of Molecular Tectonics"

Chairperson: Susumu Kitagawa (Kyoto Univ., Japan)

16:30-17:05 **Michael J. Zaworotko** (*Univ. Winnipeg, Canada*)
"From Molecules to Crystals ... and Back Again"

17:30-20:00 *Banquet*

January 13

Session 7 Perspective

Chairperson: Yoshihito Watanabe (IMS)

9:00-10:00 **Toshio Yanagida** (*Osaka Univ., Japan*)
"Imaging and Nano-Manipulation of Single Biomolecules at Work: Working Principle of Biological Molecular Machines"

Chairperson: Roeland J. M. Nolte (Univ. Nijmegen, The Netherlands)

10:00-11:00 **Jean-Pierre Sauvage** (*Univ. Louis Pasteur, France*)
"From Molecular Knots to Molecular Machines and Motors"

11:00-11:10 *Closing Remarks*
Makoto Fujita (*IMS*)

第63回岡崎コンファレンス

気相分子クラスターのレーザー分光 —構造とダイナミックスの接点— Laser Spectroscopy of Molecular Clusters — Structure and Dynamics —

| | | | |
|----------|--|---|------|
| 開催日 | 平成11年3月23日～25日 | | |
| 提案代表者 | 東北大学大学院理学研究科 | 助教授 | 江幡孝之 |
| 提案者 | 分子科学研究所 | 教授 | 藤井正明 |
| 外国人招待講演者 | Samuel, Leutwyler Hans J. Neusser Karl Kleinermanns Andreas. C. Albrecht Charles S. Parmenter Michael Topp Soritis. S. Xantheas Robert Laenen Rainer Weinkauf Claude Dedonder-Lardeux | (Universität Bern, Switzerland) (Technische Universität München, Germany) (University Düsseldorf, Germany) (Cornell University, USA) (Indiana University, USA) (University of Pennsylvania, USA) (Pacific Northwest Laboratory, USA) (Technische Universität München, Germany) (Technische Universität München, Germany) (Université de Paris-sud Orsay, France) | |

コンファレンスの趣旨

分子クラスターは分散力や水素結合等の弱い結合で結びついた分子集団であり、凝集系の局所構造や半衝突系、さらには新機能発現の可能性と言った種々の観点から多くの研究が行われてきた。これら分子クラスター固有の諸性質はクラスター内分子配置、即ち構造により支配されているが、その基礎となるクラスターの明確な幾何構造の解明が実験により研究可能になったのはここ数年のことである。つまり、凝集系のミクロなモデルといわれて久しかった分子クラスターの構造が最近ようやく明らかになりつつある。また現在コンピューターを用いた量子力学計算により、高い精度で分子クラスターの構造やクラスター内化学反応の計算が可能になっており、理論と実験との対応が可能になってきた。

一方、凝集相の分野では、分子集団すなわちクラスターをモデルとして、局所構造や緩和の初期ダイナミックスを説明しようとする試みがなされている。従って、現時点においてクラスターの構造や、ダイナミックス、凝集相との接点に関する総合的な議論が十分行える段階であり、また是非とも必要である。

そこで、本コンファレンスの趣旨は以下のとおりである。

- 1) レーザー二重共鳴振動分光法や、高分解能電子分光法など最新のクラスター分光の成果を概観し、中性、イオンクラスターの溶媒和構造、振動緩和ダイナミックス、プロトン移動反応などの研究結果を議論する。
- 2) 最新の量子力学計算と実験結果との対応から、クラスターの構造決定がどの程度可能な段階に来ているかを検討する。



3) 凝集相での諸問題（局所構造、緩和初期過程）と、
気相クラスターとの接点を探る。特に、クラスター
一分野のみならず、クラスターに関心を持つ凝集
相の研究者や、反応ダイナミックスの研究者との
議論を積極的に行う。

プログラム

March 23 (Tuesday)

12:00-13:00 *Registration*

13:00-13:10 **M. Ito** (*Director-General, IMS*)
Opening Remarks

Chairperson **T. Kondow** (*Toyota Tech. Inst.*)

13:10-14:00 **S. Leutwyler** (*Univ. Bern*)
Very low frequency vibrations of cyclic
water and microhydrated clusters

14:00-14:30 **N. Mikami** (*Tohoku Univ.*)
Size-selected vibrational spectroscopy of
hydrogen-bonded clusters and their ions

14:30-15:00 **N. Nishi** (*IMS*)
Structure of acetic acid clusters in aqueous
solution : Presence of micro phases in the
mixtures

15:00-15:40 *Group Photo and Coffee Break*

Chairperson **S. Iwata** (*IMS*)

15:40-16:30 **S. S. Xantheas** (*Pacific Northwest Lab.*)
Microhydration of halide anions: The role
of the strength of the ion-water interaction
in determining "surface" vs. "interior"
structures

16:30-17:00 **K. Fuke** (*Kobe Univ.*)
Photoelectron spectroscopy of $\text{Na}_m\text{-}(\text{NH}_3)_n$
($m < 3$): Solvation of alkali metal
aggregates in small ammonia clusters

17:00-17:30 **K. Hashimoto** (*Tokyo Metropolitan Univ.*)
Ab initio MO study of sodium-dissolution
in ammonia clusters

17:30-18:00 **C. Dedonder-Lardeux** (*Univ. Paris-Sud*)
Dynamics of charge separation of NaI in
polar solvent

18:30 *Dinner Party*

March 24 (Wednesday)

Chairperson **O. Kajimoto** (*Kyoto Univ.*)

9:00-9:50 **M. Topp** (*Univ. Pennsylvania*)
Hydrogen-bonded interactions of coumarin
dyes studied in isolated molecular clusters

9:50-10:20 **H. Sekiya** (*Kyushu Univ.*)
Electronic spectra of jet-cooled anthracene
dimer : The effects of substitution of
methyl group on the excited-state dynamics

10:20-10:50 **H. Saigusa** (*Yokohama City Univ.*)
Dynamics of excimer formation and
relaxation in the T-shaped benzene dimer

10:50-11:10 *Coffee Break*

Chairperson **H. Sekiya** (*Kyushu Univ.*)

11:10-11:40 **R. Weinkauf** (*Tech. Univ. München*)
Charge localization and delocalization in
molecular anion clusters

11:40-12:10 **T. Nagata** (*Univ. Tokyo*)
Electronic isomers in Negatively-Charged
Molecular Clusters: Coexistence and
Floppiness

12:10-13:10 *Lunch*

Chairperson **H. Takahashi** (*Waseda Univ.*)

13:10-14:00 **A. C. Albrecht** (*Cornell Univ.*)
A simple cluster model for the
thermodynamic and spectroscopic
properties of a binary liquid

14:00-14:30 **O. Kajimoto** (*Kyoto Univ.*)
Structure and dynamics of solvated
bianthryl

14:30-15:00 **K. Tominaga** (*Kobe Univ.*)
Liquid dynamics studied by ultrafast
nonlinear spectroscopy

15:00-15:20 *Coffee Break*

Chairperson **T. Tahara** (*IMS*)

15:20-15:50 **R. Laenen** (*Tech. Univ. München*)
Time-resolved spectroscopy of a hydrogen-
bonded dimer : Vibrational lifetime
shortening and spectral holes

- 15:50-16:20 **T. Ebata** (*Tohoku Univ.*)
Relaxation dynamics of OH stretch vibration of phenol and its clusters studied by time-resolved IR-UV double resonance spectroscopy
- 16:20-16:50 **K. Iwata** (*Univ. Tokyo*)
Ultrafast bimolecular reactions in solution —Observed kinetics and diffusion controlled reaction model
- 17:00-19:00 **Poster with drink**

March 25 (Thursday)

Chairperson **N. Mikami** (*Tohoku Univ.*)

- 9:00-9:50 **H. J. Neusser** (*Tech. Univ. München*)
Clusters close to the ionization limit: Ionic structure and dissociation
- 9:50-10:20 **A. Nakajima** (*Keio Univ.*)
Photoelectron spectroscopy of 7-azaindole-water clusters anions
- 10:20-10:50 **M. Nakata** (*Tokyo Univ. Agri. and Tech.*)
Dynamics of molecules and van der Waals clusters studied by low-temperature matrix isolation infrared spectroscopy combined with molecular beam technique
- 10:50-11:00 **Break**
- Chairperson **N. Nishi** (*IMS*)
- 11:00-11:50 **K. Kleinermanns** (*Univ. Düsseldorf*)
Double resonance spectroscopy of neutral and ionic hydrogen-bonded clusters
- 11:50-12:20 **M. Fujii** (*IMS*)
Structure of solvated naphthol clusters studied by IR-UV double resonance spectroscopy and ab initio MO calculations
- 12:20-12:50 **C. S. Parmenter** (*Indiana Univ.*)
The structure and dynamics of some aromatic van der Waals complexes with internal rotation
- 12:50-13:00 **T. Ebata**
Concluding Remarks

Poster session

- P1** Photodissociation of CH_2I_2 and the Subsequent Electron Transfer in Its Cluster Formed in Solution
Y. Naitoh¹, K. Saitow² and K. Yoshihara³ (*1. Inoue Photochirogenesis Project, JST, 2. Dep.*)
- Diversity Science, Chiba Univ., 3. School of Materials Science, Japan Advanced Inst. Sci. and Tech.)**
- P2** Spectroscopy of Solvated NH_4 Radical
S. Nonose, T. Taguchi and K. Fukui (*Kobe Univ.*)
- P3** Predissociation of NeNO in the C state
K. Tsuji, T. Suzuki, K. Shibuya and K. Obi (*Tokyo Inst. Tech.*)
- P4** Photoreaction and Multiphoton Ionization of Benzophenone/1,4-Cyclohexadiene Cluster
A. Kawai, T. Iimori, K. Shibuya and K. Obi (*Tokyo Inst. Tech.*)
- P5** Infrared Depletion Spectroscopy of the Aniline-Water-X Ternary Clusters
T. Nakanaga and F. Ito (*National Inst. Chemical Research*)
- P6** Autoionization-Detected Infrared (ADIR) Spectroscopy of Jet-cooled Aromatic Cations
A. Fujii, E. Fujimaki, T. Ebata and N. Mikami (*Tohoku Univ.*)
- P7** Theoretical Studies of Structures, Ionization Energies and Vibrational Frequency Analysis of Water Clusters Containing a Group 1 Metal Atom $\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n$ ($\text{M} = \text{Li}$ and Na)
T. Tsurusawa and S. Iwata (*IMS*)
- P8** Ab Initio Study of Structures and Vibrational Spectroscopies for $\text{X}(\text{H}_2\text{O})^+$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}$)
K. Satoh and S. Iwata (*IMS*)
- P9** Photoabsorption from Pyrene Excimer State in a Supersonic Jet
Y. Numata, I. Suzuka (*Nihon Univ.*)
- P10** Structures and Stability of Clusters of Sodium Atom Solvated with Nitrile Compounds: Photoionization Mass Spectroscopic Study
F. Misaizu, K. Ohshima, H. Tsunoyama, Y. Yamakita and K. Ohno (*Tohoku Univ.*)
- P11** Spectroscopic Study on the Intramolecular Charge-Transfer Reactions of (p-Cyanophenyl) pentamethyldisilane and Its Solvated Clusters
H. Ishikawa, Y. Shimanuki, M. Kira and N. Mikami (*Tohoku Univ.*)
- P12** Excimer and Exciplex Formation of Cyanoazulene in Pure and Mixed Crystals
I. Suzuka, A. Takahashi, G. Maeda and Y. Numata (*Nihon Univ.*)
- P13** Proton Tunneling and Structures of Tropolone Clusters
H. Sekiya (*Kyushu Univ.*)
- P14** Indirect Evidence of Non-Twisted TICT



Phenomenon from a Supersonic-Jet Spectroscopy:
Analysis of the Electronic Spectra of Jet-Cooled p-Cyanophenylpyrrole
K. Okuyama, Y. Aida, S. Odawara, Y. Numata and I. Suzuka (Nihon Univ.)

- P15** Large-Amplitude Torsional Potentials of 2-Phenylazulene in the Electronic Ground and the Second Singlet Excited State: π -Electron Conjugation as A Non-Alternant Aromatic Hydrocarbon
T. Masuda, K. Okuyama, Y. Numata, I. Suzuka, M. Yasude and M. Yasunami (Nihon Univ.)
- P16** The S_0 - S_1 Electronic Spectra of van der Waals Complexes of Pyrene + Benzene, Naphthalene,... in Jets: the Vibronic Coupling and the Exciplex Formation
K. Ozawa, K. Okuyama, Y. Numata and I. Suzuka (Nihon Univ.)
- P17** 3D Analysis of the Internal Rotation in the Benzene-Water Complex
R. Kanya and Y. Ohshima (Kyoto Univ.)
- P18** Microscopic Solvation and Intersystem Crossing in Acridine- and Acridone-Water Clusters
M. Mitsui, H. Yokoyama, S. Ishiuchi, M. Fujii, K. Kajimoto and Y. Ohshima (Kyoto Univ.)
- P19** Rotational Coherence Spectroscopy of 9-Cyanoanthracene Clusters with Ar Atoms
K. Egashira, K. Kajimoto and Y. Ohshima (Kyoto Univ.)
- P20** Structures and Vibrations of 2-Naphthol-(NH₃)₁₋₂, and -Piperidine Hydrogen-Bonded Clusters Investigated by IR-UV Double-Resonance Spectroscopy
Y. Matsumoto, T. Ebata and N. Mikami (Tohoku Univ.)
- P21** Vibrational Spectroscopy of 2-Pyridone, 2-Hydroxypyridine and Their Clusters in Supersonic Jets
Y. Matsuda, T. Ebata and N. Mikami (Tohoku Univ.)
- P22** Liquid Structure of Acetic Acid Studied by Temperature Dependence of Raman Spectrum and ab Initio Molecular Orbital Calculations
T. Nakabayashi, K. Kosugi and N. Nishi (IMS)
- P23** Adiabatic Theory of Laser-Induced Vibrational Predesorption of CO Physisorbed on NaCl Substrate
Y. Ohtsuki, Y. Fujimura and S. H. Lin (Tohoku Univ.)
- P24** Femtosecond Fluorescence Study of the Excited-State Proton Transfer Reaction of 7-Azaindole Dimer

S. Takeuchi and T. Tahara (IMS)

- P25** Solvation Dynamics in Cluster in Supercritical Fluids: Observation of Dynamic Stokes Shift by Femtosecond Fluorescence Upconversion
T. Tahara and M. Kayama (IMS)
- P26** Crossed Beam Ion Imaging of NO-Ar Inelastic Scattering
H. Kohguchi, C. Gebauer and T. Suzuki (IMS)
- P27** Effect of Intermolecular Hydrogen-Bond on the Proton Tunneling Potential of the Methyl Group
K. Nishi and H. Sekiya (Kyushu Univ.)
- P28** Observation of Non-Uniform Intensity Rise Among Anti-Stokes Bands of Nickel Octaethylporphyrin in the (d,d) Excited States
Y. Mizutani and T. Kitagawa (IMS)

講演および討論要旨

伊藤光男所長の挨拶の後、Leutwylerが、理論計算をもとに 小サイズ水クラスターの低振動の分子間振動スペクトルが、バルクの水の低振動赤外、ラマンスペクトルによく対応していることを示した。三上は、二重共鳴振動分光が、サイズ選別した分子クラスターの振動スペクトル測定に有効であることを示し、特に水素結合クラスターにおけるOH伸縮振動のスペクトルの広がりに注目し、振動緩和、分子間振動によるOH振動のモジュレーション、他の振動との非調和相互作用が、広がりの原因であることを説明した。西は、酢酸水溶液の低振動ラマンスペクトル、C=O伸縮振動、OH伸縮振動の測定結果を基に、それぞれ同じ分子同志の水素結合ネットワーク構造が、もう一方の分子により切られる様子を分子レベルで説明した。

第2のセッションでは、負イオンクラスターおよびイオン結合を持つ分子の溶媒和クラスターの構造や、ダイナミックスをテーマとした。Xantheasは、ハロゲン負イオンの水和クラスターの幾何構造および振動スペクトルを *ab initio* 計算で求め、Lisyらの実験結果と比較した。その結果、 $F(H_2O)_n$ クラスターでは水分子と F^- との結合が強く、クラスターは F^- が水分子に囲まれた *terior* 構造をとるが、 Cl^- 、 Br^- 、 I^- と原子番号が大きくなるに従って、ハロゲン負イオンと水分子との結合が弱くなり、クラスターの構造としてハロゲン負イオンが外側に位置する *surface* 構造がより安定になることを示した。富宅および橋本は、 $[Na(NH_3)_n]^-$ クラスターの光電子スペクトルと *ab initio* 分子軌道計算の結果から、クラスター構造として、アンモニアのN原子とNa原子が強く結合した構造が安定であり、アンモニアの分子数が増えるに従って、Na側の電子がアンモニア側に移動することを示した。また $[Na_2(NH_3)_n]^-$ クラスターでは、一方のNa原子のみが選択的にアンモニア分子で溶媒、その理由として軌道混成が重要な役割を果たしていると説明した。

2日目

午前の第1セッションは、中性クラスターの電子励起状態の緩和ダイナミックスを中心テーマとして講演、討論を行った。Toppはクマリン色素と水分子との水素結合クラスターの S_1 - S_0 吸収発光スペクトルの測定から、 S_1 状態でクラスターが大きく配向変化することを示唆した。関谷、三枝はそれぞれアントラセン、ベンゼンニ量体の S_1 状態でのエキシマー形成について論じた。特に三枝はベンゼンニ量

体のエキシマー形成収率が振電準位が上がるに従って減少し、それが始状態と終状態の振動状態密度の比に関係すると示唆した。

午前の第2セッションは負イオンクラスターの電子励起状態の緩和ダイナミックスを中心テーマとした。負イオンクラスターの特徴としては、分子が2.2デバイ以上の中極子モーメントを持つ場合、dipole bound状態が存在することがあるが、Weinkaufは核酸塩基の水和負イオンクラスターの光電子スペクトルの解析から dipole bound 状態が原子価状態と比較してクラスター形成により安定化の度合いが異なることを示した。永田は、 $(CO_2)_n(H_2O)_m$ 負イオンクラスターが $C_2O_4^-(H_2O)_m(CO_2)_{n-m-2}$ 、および $(CO_2)-(H_2O)_m(CO_2)_{n-m-1}$ の2種類安定構造を持ち、その状態間で平衡が保たれていることを示した。

午後のセッションは、凝集系の局所構造と緩和、またクラスターの振動緩和過程について講演、討論を行った。Albrechtは、近接分子クラスターモデルという概念を導入し、bulkの分子の熱力学的性質や、Ramanペクトルの巾の広がりを説明した。またincoherent光を用いたCARS分光で測定したアセトニトリル水溶液のCH伸縮振動の位相緩和速度がこのモデルで説明できることを示した。富永は非線形時間分解Raman分光を凝集相の振動位相緩和に応用した。Laneneはピコ秒赤外分光を溶液の水素結合体に応用し、水素結合したOH伸縮振動準位のpopulation減衰速度が、自由なOH伸縮振動準位の減衰速度に比べて2倍以上も速く、また振動緩和に水素結合まわりの変角振動が緩和に大きく関与することを示唆した。岩田は、ピコ秒Raman温度計をト



ンスチルベンの振動エネルギー緩和に導入し、クロロホルム溶液中において2ピコ秒以内で第1層の約6個のクロロホルム分子に振動エネルギーが移動することを示した。梶本はビアントリルクラスターの構造および電荷移動状態形成について述べた。江幡は、フェノールとそのクラスターのOH準位の振動緩和を赤外-紫外二重共鳴分光で測定し、単量体の緩和がsmall-molecule limitで説明でき、クラスターではstatistical-limitへと移行することを示した。

3日目

第1セッションで、Neusserは、高分解能レーザーとM ATI分光を用い、イオン化状態に收れんする高リュードベリ分子および分子クラスターの構造、振動前期解離について述べた。特に主量子数が50を超えるリュードベリ分子は高い軌道角運動量を持つ状態が、強く観測されることを示した。中嶋は、7-アザインドール負イオンニ量体の光励起後のプロトン移動反応および電子脱離について述べた。中田は、ArマトリックスのクラスターのFT赤外振動分光について述べた。

第2セッションでは、Klinermannsが、赤外-紫外二重共鳴分光により、フェノール水和クラスターの振動振動を行い、ab initio計算との比較から、中性とイオン状態では水和構造が大きく異なることを示した。藤井は、1-ナフトール水和クラスターの振動分光を行い、ab initio計算との比較から小サイズクラスターの構造を決定した。またS₁状態とS₀状態では構造変化が少なく、小サイズクラスターではプロトン移動反応が進みにくいことを示した。

Parmenterはベンゼン誘導体とArとのvan der Waals

クラスターの振動前期解離について講演し、メチル基導入により解離のpathが大きく開けることを示した。

最後に江幡が総括を行い、現在小サイズクラスターの構造が実験、理論両面から明確に決定できる段階に来ていることを強調した。従って、今後の問題としてこれまでの懸案であった凝集系の局所構造とクラスター構造との対応や、振動緩和のミクロなレベルでの解明の可能性について、凝集相の研究者との積極的な議論が必要であることを述べて閉会した。

今回のコンファレンスの開催にご尽力くださった伊藤所長、事務的な仕事を担当していただいた稻垣いつ子さん、鈴木優子さん、また会場の準備を引き受けてくださった分子研の若手教官、院生の方々にお礼を申し上げます。

光励起による相転移とその前駆現象

平成10年10月29日(木)、30日(金)
岡崎コンファレンスセンター中会議室

分子研UVSOR 鎌田 雅夫
高工研究機構構研 那須 奎一郎
和歌山大学システム工学部 神野 賢一
東京工業大学理学部 腰原 伸也

物質に、光を照射すると、構成原子や電子の間に、照射前とは全く異なる、新しい秩序が発生し、新しい物質に転生するという現象が、最近相次いで幾つか発見されている。例えば、光照射によって、結晶構造が変化したり、光学的性質や磁気的特性が変わることが報告されている。また、関連現象として、内殻励起によって試料表面からの脱離が生じ、新たな表面相の形成が起こったり、励起状態での多様な構造転移などが生じることも報告されている。これら一群の現象は、総称して光誘起相転移と呼ぶことができる。これらの現象は、メカニズムや発生の条件は良く分かっていないが、新しい研究分野として今後発展していくものと思われる。また、これらの現象は、ミクロな光化学反応が誘起するマクロな物質相の創成という、分子科学にとって重要な研究課題の一つでもある。

そこで、光誘起相転移が、如何なる条件下で生じるのか、また如何なるメカニズムを通じて生じるのか、を理解することを目的として、前駆現象も含めて、光誘起相転移に関連した現象に興味を持つ、理論ならびに実験研究者が、集まって議論することを

目的に標記研究会を、1998年10月29日、30日の両日に岡崎コンファレンスセンター中会議室にて開催した。

プログラムにあるように、その主な内容は以下のようく大別される。

1. 光誘起構造相転移
2. 光誘起色相転移
3. 光誘起磁気相転移
4. 光励起状態の構造転移
5. 内殻励起状態と光脱離
6. 実験手法と今後の研究展開

1では、可視領域の光と放射光によるXAFS測定から見出されたカルコゲナイト系の光誘起局所構造変化をはじめ、有機結晶の光誘起構造変化や光誘起構造相転移などを議論した。また、C60単結晶の最近の研究を基にして、励起状態とフラーレンの光誘起重合の前駆状態についての議論を行った。

2では、光照射による光学的性質の相変化に注目し、ポリマーの光誘起色相転移や半導体における高密度励起状態とコヒーレント輸送の問題などを議論した。

3では、光励起による磁気的、電気的な相転移に焦点を置き、Mn系化合物の光誘起磁気形成、擬一次元絶縁体における光誘起中性/イオン性転移、金属錯体の光誘起CDW/SDW相転移などの話題を取り上げた。

4では、光励起状態の緩和過程についての基礎的な研究展開を基にして、励起状態と基底状態の多重安定状態、電子系の相転移と格子系の新秩序、励起状態の構造変化などの問題を議論した。



5では、放射光を利用した内殻励起に伴うイオン脱離や中性原子脱離についての最近の研究発展を基に、内殻励起状態と価電子励起状態の緩和機構や脱離の前駆状態についての議論を行った。

6では、光誘起構造相転移という新しい研究分野を切り開く上で必要な、理論的ならびに実験的手法の開発や課題について、意見を交換し、将来を展望した。

分子科学研究所の暖かい支援を頂けたお陰で、約60名の参加を得て、無事研究会を行うことができた。ここに、謹んで分子科学研究所ならびに関係各位に感謝の意を表したい。

プログラム

10/29 (木)

座長： 飯田 武

8:50-9:00 はじめに
鎌田 雅夫 (分子研)

9:00-9:30 光励起相転移に於ける幾つかの基本的
問題点
那須奎一郎 (物構研)

9:30-10:00 層状結晶中励起子の光励起高密度効果
の空間情報
唐沢 力 (阪市大理)

10:00-10:30 電子・正孔空間分離型GaAs/AlAs超格子における高密度励起状態
中山正昭 (阪市大工)

座長： 唐沢 力

10:50-11:20 タイプII半導体量子井戸励起子系の秩序形成
飯田 武 (阪市大理)

11:20-11:50 半磁性半導体発光の強励起効果
中原純一郎 (北大理)

11:50-12:20 光誘起協力現象と超高速光制御
五神 真 (東大工)

昼食

座長： 那須奎一郎

13:30-14:00 マンガン酸化物の光誘起磁気変化とそのダイナミックス
中村新男 (名大総研)

14:00-14:30 磁性半導体中のキャリアー局在スピニ
交換相互作用の効果
梅原雅捷 (無機材研)

14:30-15:00 強相関系の光励起状態
高橋 聰 (山口大工)

座長： 岡本博

15:20-15:50 分子性結晶における光誘起表面分子再
配列
橋本和仁 (東大先端研)

15:50-16:20 光誘起磁気相転移物質フルシアンブル
ー型錯体の第一原理バンド計算
川本 徹 (電総研)

16:20-16:50 光誘起スピニクロスオーバー転移のダ
イナミックス
腰原伸也 (東工大理)

座長： 小川哲生

17:10-17:40 一次元有機系の光誘起相転移
谷村克己 (名大理)

17:40-18:10 内殻励起によるイオン脱離のメカニズム
田中慎一郎 (分子研)

18:20- 懇親会

10/30 (金)

座長： 栗田進

8:50-9:20 筒状有機分子シクロデキストリン中の
アントラゼンの光誘起構造転移
吉成武久 (山形大理)

9:20-9:50 ポリジアセチレンの光誘起物性制御
伊東千尋 (名大理)

9:50-10:20 ジアリールエテン単結晶のフォトクロ
ミズム
入江正浩 (九大工)

座長： 中村新男

10:40-11:10 C₆₀単結晶の光スペクトルと二量体化
秋元郁子 (京大理)

11:10-11:40 C₆₀結晶における励起子の格子緩和と
二量体化
鈴木正人 (阪市大理)

11:40-12:10 光誘起核形成の理論

| | |
|--|--|
| 越野和樹 (東北大理) | 14:35-15:05 密度汎関数法と低温アルゴンマトリックス単離法による有機化合物のコンホメーション解析 大野啓一, 松浦博厚, 吉田 弘, 原田 隆範 (広大理) |
| 昼食 | 15:05-15:15 休憩 |
| 座長： 神野賢一 | 座長： 富岡秀雄 |
| 13:20-13:50 一次元ハロゲン架橋遷移金属錯体における光誘起構造変化 岡本 博 (東大工) | 15:15-15:45 *分子軌道法による振動解析 内丸忠文 (物質研) |
| 13:50-14:20 電荷密度波状態における光誘起太域的構造変化 岩野 薫 (物構研) | 15:45-16:15 希ガスマトリックス中での光誘起原子移動反応 渋谷一彦 (東工大院理) |
| 14:20-14:50 N-I転移のダイナミックス 腰原伸也 (東工大院理) | 16:15-16:45 低温希ガス固体中の小分子の光励起と緩和 幸田清一郎 (東大院工) |
| 座長： 腰原伸也 | 座長： 中田宗隆 |
| 15:10-15:40 放射光+レーザーを用いた光誘起実験 鎌田雅夫 (分子研) | 16:45-17:15 低温マトリックス中の有機金属錯体の赤外吸収スペクトル 中嶋 敦, 茅 幸二 (慶大理工) |
| 15:40-16:10 コメント 神野賢一 (和歌山大シス工) | 17:15-17:45 水素マトリックス単離分光 百瀬孝昌 (京大院理) |
| 16:10-16:40 まとめ 中村新男 (名大総研) | 18:00-20:00 懇親会 (職員会館 2階) |

低温マトリックス単離法の新展開

平成10年11月6日(金)、7日(土)
分子科学研究所 201号室

(*印は、依頼講演)

11月6日(金)

| | |
|--|---|
| 13:00-13:05 開会 西 信之 (分子研) | 9:00-9:20 *分子線レーザー分光の立場から見た低温マトリックス単離法 藤井正明 (分子研) |
| 座長： 渋谷一彦 | 9:20-9:50 低温マトリックス単離法を用いたクラスターの構造と励起状態に関する研究 尾上 順 (理研) |
| 13:05-13:35 低温マトリックス中でのカルベン、ナイトレンの反応 富岡秀雄 (三重大工) | 9:50-10:20 Arマトリックス中におけるCOクラスターのFTIRスペクトル 阿部 恒, 山田耕一 (融合研) |
| 13:35-14:05 分離型ラジカルカチオンの生成と性質 真嶋哲朗 (阪大産研) | 10:20-10:30 休憩 |
| 14:05-14:35 低温マトリックス単離法を用いたビス(ジアゾ)化合物の光分解機構の解明 村田 滋 (東大院総合) | 座長： 中嶋 敦 |

| |
|---|
| 10:30-11:00 金属を含む分子クラスターの振動スペクトル 山北佳宏, 相澤常滋, 大野公一 (東北大院理) |
| 11:00-11:30 金属のレーザーアブレーションを利用するヘテロ二核遷移金属カルボニルの低温マトリックス単離FTIRスペクトルとDFT計算 西尾 悟, 和田隆夫, 古川浩司, 後藤 |



幸次, 梅山恵行, 大津英雄, 山口英美, 松崎章好, 佐藤博保 (三重大工), 小林久芳 (倉敷芸科大), 山邊時雄 (京大工)

11:30-12:00 低温マトリックス中での芳香族アジドのレーザーアブレーション
新納弘之, 佐藤正健, 守山雅也, 矢部明 (物質研)

12:00-13:00 昼食

座長: 幸田清一郎

13:00-13:30 低温マトリックス単離法による分子およびクラスターのダイナミックス
中田宗隆, 高柳正夫, 工藤聰 (農工大院BASE)

13:30-14:00 共役π電子系ラジカルの赤外吸収スペクトルと電子一振動相互作用
鳥居肇 (東大院理), 田嶋三生 (埼玉大理)

14:00-14:30 低温マトリックス単離した鉄化合物の
メスバウア一分光法による研究
山田康洋 (東理大理)

14:30-14:45 休憩

座長: 山田耕一

14:45-15:15 彗星の赤外観測結果と低温トンネル反応
平岡賢三 (山梨大工)

15:15-15:45 解離性再結合反応分岐比の実験的決定
根津将之, 天埜義義 (茨城大理), 川口建太郎 (国立天文台)

15:45-16:15 一重項カルベンとニトロリル化合物との
反応
内藤郁夫 (九州産業大)

16:15-16:25 閉会
中田宗隆 (農工大院BASE)

- 13:05-13:45 山内 薫 (東大理)
強光子場の化学
- 13:45-14:25 川崎昌博 (京大工)
反応ダイナミックスと環境科学
- 14:25-15:05 橋本和仁 (東大先端研)
物理化学を基礎とした材料設計
- 15:05-15:30 休憩
- 15:30-16:10 岩本正和 (北大触媒センター)
メゾ空間の構築とそれを利用した機能
材料の開発
- 16:10-16:50 福村裕史 (東北大理)
ナノスケール化学の可能性
- 16:50-18:00 全体討論「物理化学の現状と将来」
化研連物理化学専門委員会委員と出席
者全員

放射光を用いた ナノ構造の科学と工学

The 1st UK-JAPAN International
Seminar of Application of
Synchrotron Radiation to the Study
of Nano-Structured Materials

1999年3月26日(金)、27日(土)
岡崎コンファレンスセンター

March 26

18:00-19:30 *Small party*

March 27

8:00-9:00 *breakfast*

Chairperson; A. Yoshida (Toyohashi Univ. Tech.)

9:30-9:45 *Opening remark (Jpn side)*
T. Urisu (IMS)
Opening remark (UK side)
B. Hamilton (UMIST)

9:45-10:20 SR and STM: high and low energy probes
for studying electronic structure and
quantum transport in semiconductor

物理化学の現状と将来

1998年12月10日(木)
岡崎コンファレンスセンター中会議室

13:00 開会

講演(話題提供20分、討論20分)

- nanostructures
B. Hamilton (UMIST)
- 10:20-10:45 Formation and magnetic properties of MBE-grown MnAs and MnSb quantum dots
M. Oshima, K. Ono, F. Fujioka, M. Mizuguchi and H. Akinaga* (Univ. Tokyo, *JRCAT)
- 10:45-11:20 Designer surfaces - Tailoring materials using synchrotron radiation as a probe
W. R. Flavell (UMIST)
- 11:20-11:45 Quantized electronic structure in mesoscopic metal-nanofilms studied by angle-resolved photoemission spectroscopy
A. Tanaka and S. Sato (Tohoku Univ.)
- 11:45-12:10 Nano-technology using computer-generated hologram
S. Matsui (Himeji Inst. Tech.)
- 12:10-13:30 *lunch, photograph*
- Chairperson; H. Ogawa (Saga Univ.)*
- 13:25-14:00 The application of X-ray excited optical luminescence (XEOL) to the study of semiconductor nano-structures
D. Teehan (UMIST)
- 14:00-14:25 Fabrication and characterization of semiconductor nanostructures by SR process and OMVPE growth
Y. Takeda (Nagoya Univ.)
- 14:25-14:50 UPS studies of ultrathin organic films and their interfaces
K. Seki (Nagoya Univ.)
- 14:50-15:15 In-situ IR monitoring of porous Si formation on Si surfaces in HF solution
Y. Kondo, H. Mimura and M. Niwano (Research Inst. Electrical Communication, Tohoku Univ.)
- 15:15-15:30 *coffee break*
- Chairperson; I. Nishiyama (NEC Silicon System Lab.)*
- 15:30-15:55 Synchrotron radiation stimulated nanoprocess and atom level characterization
T. Urisu, T. Miyamae, Y. Gao (IMS), H. Uchida (Toyohashi Univ. Tech.)
- 15:55-16:20 Synchrotron radiation photodecomposition for microstructuring and thin film deposition
Y. Zhang and T. Katoh (Sumitomo Heavy Industries)
- 16:20-16:45 Research projects of NEW SUBARU
T. Mochizuki (Himeji Inst. Tech.)
- 17:00-18:00 *Poster Session*
- P1** Synchrotron radiation photoelectron microscopic measurements of self-organized InAs nanocrystals
Y. Watanabe, S. Heun, ** Th. Schmidt and K. C. Prince** (NTT Basic Research Lab., **Syncrotron Trieste, Elettra)**
- P2** Development of grazing-incidence x-ray scattering apparatus for in situ analysis of surface structure during MOVPE
Y. Utsumi, T. Kawamura, Y. Watanabe, K. Uwai, M. Sugiyama, J. Matsui, * Y. Tsusaka* and Y. Kagoshima* (NTT Basic Res. Lab., *Himeji Inst. Tech.)
- P3** Non-thermal epitaxial growth of ZnTe using synchrotron radiation
H. Ogawa, M. Nishio and Qixin Guo (Saga Univ.)
- P4** Mass Spectrometric Analysis for SR Induced Etching of PTFE Film
I. Nishiyama (NEC Silicon System Lab.)
- P5** SR beamline and OMVPE system for semiconductor nanostructure fabrication
Y. Nonogaki, H. Hatake, H. Noda, * T. Urisu, * S. Yamamoto, Y. Fujiwara and Y. Takeda (Nagoya Univ., *IMS)
- P6** Apparatus for surface reaction analysis using synchrotron radiation at BL23SU in SPring-8
A. Yoshigoe and Y. Teraoka (Japan Atomic Energy Research Inst.)
- P7** Digitally controlled scanning tunneling microscope for surface science studies
H. Uchida and M. Arimitsu (Toyohashi Univ. Tech.)
- P8** Micromachining processes of fluoride thin films using synchrotron Radiation
J. Kamiiisaka, M. Ito, M. Hiramatsu, * M. Hori and T. Goto (Nagoya Univ., *Meijo Univ.)
- P9** Initial stage of excitation process by VUV-light using scanning tunneling microscope
H. Sato, M. Uchida, T. Hayakawa, A. Wakahara, A. Yoshida, A. Hoshino* and H. Machida* (Toyohashi Univ. Tech., *TRI CHEMICAL LABORATORY Inc.)



有機固体の伝導および 光伝導に関する 第6回日中合同シンポジウム

平成10年10月22日より24日まで、上記のテーマに関する日中シンポジウムを岡崎コンファレンスセンターにおいて開催した。日中シンポジウムは1983年より3年ごとに日中双方で場所を変えて開催しており前回の杭州での会議に続き、これが6回目にあたる。今回は中国より10名の若手研究者を含む32名が参加し、日本からは若手を含む55名の参加者を得た。口頭発表40件、ポスター発表50件が発表された。

討論内容は機能性有機固体全般に及んだが、それらを分類すると①分子性導体の電子物性に関するものが6件、②フラーレンおよびカーボンナノチューブの物性ならびに電子状態に関するものが8件、③オリゴチオフェン等の低分子有機ガラスを用いた電界発光素子などのデバイス材料に関する講演が2件、④新しい分子磁石やキラルな分子磁石などに関するものが4件、⑤電子供与性、受容性分子の合成に関するものが4件、⑥強相関系物質の光吸収スペクトル、強相関電子系の電子状態、負性誘電率および分子磁性の理論の講演が4件、⑦ポリアニリンなどの導電性高分子に関する講演が2件、⑧機能性高分子や形態の揃った高分子の合成などの講演が3件、⑨高分子を用いる発光ダイオードデバイスの材料に関するものが4件、⑩高分子を用いる有機非線型材料に関する講演が2件である。特筆すべき論文

としては量子収率が1に近い発光性高分子の合成、強磁性金属、超伝導、反強磁性絶縁体、常磁性金属など多彩な電子相を有する分子性導体 λ -(BETS)₂-Fe_xGe_{1-x}Br_yCl_{1-y}の研究、キラルな分子磁石の合成、水素原子を含む三元系C₆₀化合物における超伝導などがあげられる。ポスター発表の内容を分類すると、分子性導体の電気・光・磁気物性に関するものが15件、フラーレンの物性が5件、薄膜の作成およびその機能が5件、新しい分子性導体の合成が8件、有機非線型光学材料が3件、高分子を用いる電界発光素子が4件、分子磁性1件、理論3件、有機・無機物質の界面物性2件、有機ガラス1件、導電性高分子1件であった。口頭発表、ポスター発表全体について言える事は中国側に応用志向の研究が多く、日本側に基礎研究が多かった。口頭発表のプログラムを添付する。

翌日より両国の研究者の交流と親睦を図るために信州へ遠足に出かけた。10月27日に分子科学研究所の大型計算機センター、レーザーセンター、物質開発センター、極端紫外光研究施設と有機固体の研究室（小林研、薬師研）の実験設備の見学と研究活動の説明を行なった。

（薬師久彌 記）

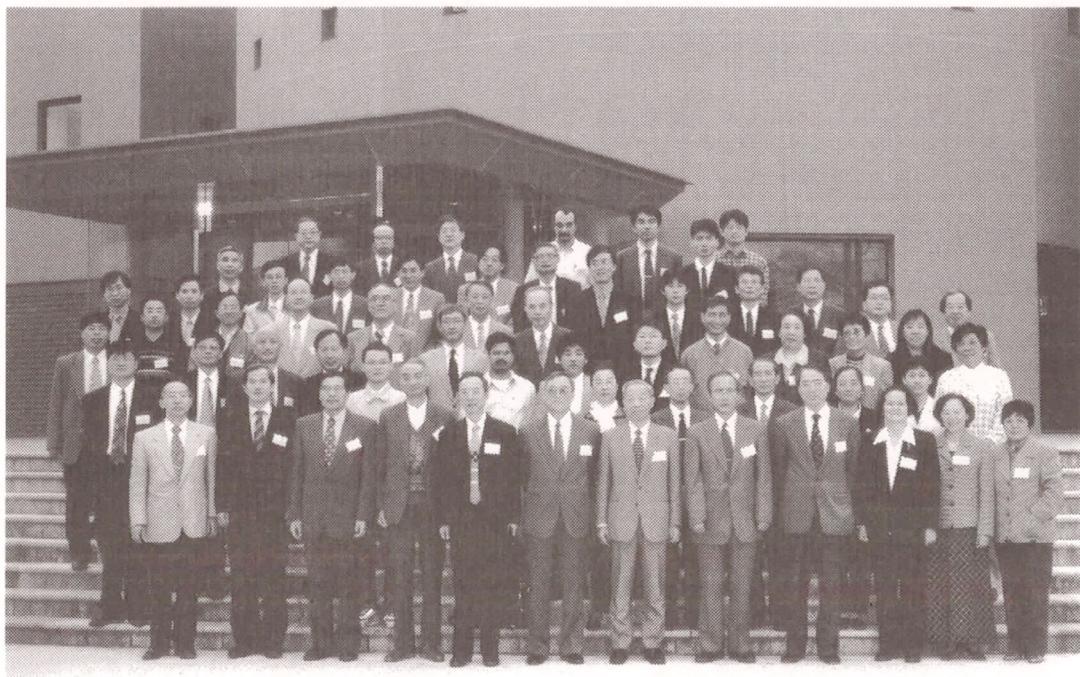
プログラム

Oct. 22 (Thursday)

9:00-9:10 *Opening address*
Yakushi, Kyuya (IMS)

Chairperson: Yakushi, Kyuya (IMS)

9:10-9:35 Wang, Fosong (Chinese Academy of Sciences)
Synthesis of Polymers with Different Light Emitting Behaviours



| | | | |
|-------------|--|---|---|
| 9:35-10:00 | Maruyama, Yusei (<i>Hosei Univ.</i>) Electronic Properties of Some Fullerene or Carbon Nanotube Charge Transfer Complexes | 14:50-15:15 | Mitani, Tadao (<i>JAIST, Hokuriku</i>) Superstructure of proton-lattice in metallic CT complex, $[\text{Pd}(\text{H}_{2-x}\text{EDAG})(\text{HEDAG})]\cdot\text{TCNQ}$ |
| 10:00-10:25 | Jing, Xiabin (<i>Changchun Inst. Applied Chemistry</i>) Polyaniline as Marine Anti-fouling Agent | 15:15-15:40 | Ye, Cheng (<i>Inst. Chem.</i>) The Thermal Stability and Nonlinear Optical Property of Polyimide Synthesized by Addition Polymerization of 4-(N,N-Bis(<i>p</i> -aminophenyl)-amino-4'-nitrodiphenylamine and 4,4'-Maleimido diphenylmethane under Corona Poling |
| 10:25-10:45 | <i>Coffee Break</i> | 15:40-16:00 | <i>Coffee Break</i> |
| | <i>Chairperson: Seki, Kazuhiko</i> (<i>Nagoya Univ.</i>) | | <i>Chairperson: Jing, Xiabin</i> (<i>Changchun Inst. Applied Chem.</i>) |
| 10:45-11:10 | Shirota, Yasuhiko (<i>Osaka Univ.</i>) Synthesis, Properties, and Applications of Novel Oligothiophenes and Polymer Containing Pendant Oligothiophenes | 16:00-16:25 | Murata, Keizo (<i>Osaka City Univ.</i>) Transport and Magnetic Properties of the Organic τ -Conductors, $(\text{EDO-(S,S)-DMEDT-TTF})_2(\text{AuBr}_2)(\text{AuBr}_2)_y$ and $(\text{P-(S,S)-DMEDT-TTF})_2(\text{AuBr}_2)(\text{AuBr}_2)_y$, $y \approx 0.75$ |
| 11:10-11:35 | Liu, Yunqi (<i>Inst. Chem.</i>) Synthesis and Characterization of Novel Light-Emitting Copolymers Containing Phenylene and TPD Units | 16:25-16:50 | Hino, Shojun (<i>Chiba Univ.</i>) Ultraviolet Photoelectron Spectra of Metallofullerenes |
| 11:35-12:00 | Kojima, Norimichi (<i>Univ. Tokyo</i>) Search on Multi-functional Properties of Spin Crossover Complexes $[\text{Fe}(\text{NH}_2\text{-trz})_3](\text{RSO}_3)_2$ | 16:50-17:15 | Li, Yongfang (<i>Inst. Chem.</i>) Electrochemical Properties of Luminescent Polymers and Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells |
| 12:00-12:25 | Bai, Fenglian (<i>Inst. Chem.</i>) Synthesis and Characterization of New and High Efficiency Light Emitting Alternating Copolymers | 18:00-19:30 | <i>Dinner</i> |
| 12:25-14:00 | <i>Lunch</i> | 19:30-21:30 | <i>Poster Session</i> |
| | <i>Chairperson: Zhu, Daoben</i> (<i>Inst. Chem.</i>) | Oct. 23 (Friday) | |
| 14:00-14:25 | Kobayashi, Hayao (<i>IMS</i>) Electric and Magnetic Properties of Highly Correlated Organic Conductor with Magnetic Anions, λ -(BETS) ₂ Fe _x Ga _{1-x} Br _y Cl _{4-y} | <i>Chairperson: Saito, Gunzi</i> (<i>Kyoto Univ.</i>) | |
| 14:25-14:50 | Tian, He (<i>East China Univ. Sci. and Tech.</i>) Conductivity of H/K Acid Azo Dyes and Metallized Azo Dyes | 9:00-9:25 | Shirakawa, Hideki (<i>Tsukuba Univ.</i>) Poly(2,5-dialkoxy- <i>p</i> -phenylene-butadiynylene)s —Novel rigid conjugated polymers with liquid crystalline property— |



| | | |
|-------------|---|--|
| 9:25-9:50 | Sun, Xin (<i>Fudan Univ.</i>) A New Photoinduced Phenomenon in Polymer | Determination of electronic states in organic ferromagnet |
| 9:50-10:15 | Frankevich, Eugene L. (<i>Visiting Prof., Nagoya Univ.</i>) Polaron Pairs as Intermediate States in the Process of Photogeneration of Free Charge Carriers in Semiconducting Polymers | 16:50-17:15 Yonemitsu, Kenji (<i>IMS</i>) Competition among Different Charge or Magnetic Orderings in Quarter-Filled Molecular Conductors |
| 10:15-10:35 | Coffee Break | 17:15-17:40 Kanoda, Kazushi (<i>Univ. Tokyo</i>) Absence of Brinkman-Rice mass enhancement in the Mott transition of the BEDT-TTF salts |
| 10:35-11:00 | Chairperson: Kobayashi, Hayao (<i>IMS</i>) Zhu, Daoben (<i>Inst. Chem.</i>) Study on the Physical and Chemical Properties of [60] Fullerene Derivatives | 18:30 - Banquet |
| 11:00-11:25 | Saito, Gunzi (<i>Kyoto Univ.</i>) Formation of C ₆₀ Charge Transfer Complexes with Organic Donors and Superconductivity by Alkali-metal Doping | Oct. 24 (Saturday) |
| 11:25-11:50 | He, Pingsheng (<i>Chinese Univ. Sci.</i>) C ₆₀ Molecule Arrangement in Mixed C ₆₀ /Arachidic Acid Langmuir-Blodgett Films | Chairperson: Matsumoto, Mutsuyoshi (<i>National Inst. Materials and Chemical Research</i>) |
| 11:50-12:15 | Imaeda, Kenichi (<i>IMS</i>) Three Component C ₆₀ Superconductor | 9:00-9:25 Zhang, Deqing (<i>Inst. Chem.</i>) Magnetic LB Films of α -Nitronyl Nitroxide Compounds with Long Alkyl Chain |
| 12:15-14:00 | Lunch and Photo | 9:25-9:50 Ishida, Naoyuki (<i>The Univ. Electro-Communications</i>) Intermolecular Ferromagnetic Interaction of π -Conjugated Nitroxide Radicals |
| 14:00-14:25 | Chairperson: Yang, Mujie (<i>Zhejiang Univ.</i>) Wang, Xianhong (<i>ChangChun Inst. Applied Chem.</i>) Water-borne Conducting Polyaniline and Its Polyblends | 9:50-10:15 Yang, Mujie (<i>Zhejiang Univ.</i>) π -Conjugated Soluble Metal-Polyyne Copolymer: Synthesis and Third-Order Optical Nonlinearity |
| 14:25-14:50 | Tajima, Hiroyuki (<i>Inst. Solid State Phys.</i>) Reflectance spectra and electrical resistivities of (DMe-DCNQI) ₂ Li _{1-x} Cu _x | 10:15-10:35 Coffee Break |
| 14:50-15:15 | Wang, Ce (<i>Jilin Univ.</i>) 2D Assembly of the Nano-sized Particles with Optoelectrical Property | Chairperson: Li, Yongfang (<i>Inst. Chem.</i>) |
| 15:15-15:40 | Tokumoto, Madoka (<i>Electrotechnical Lab.</i>) Scanning Probe Microscopy Study of New Carbon Architectures | 10:35-11:00 Yamashita, Yoshiro (<i>IMS</i>) Preparation and Properties of Novel TTF Vinyllogues |
| 15:40-16:00 | Coffee Break | 11:00-11:25 Shen, Zhiqian (<i>Zhejiang Univ.</i>) Studies on Synthesis, Fluorescence Properties of Eu Complexes and Eu-polymer Complexes |
| 16:00-16:25 | Chairperson: Sun, Xin (<i>Fudan Univ.</i>) Nasu, Keiichiro (<i>Inst. Structural Sci.</i>) Non-Grassman Path Integral Theory for One-Dimensional Ni-Br Complex | 11:25-11:50 Nakamura, Takayoshi (<i>Hokkaido Univ.</i>) Monovalent Ni(dmit) ₂ Salts of Diaza-18-Crown-6-Included Cations |
| 16:25-16:50 | Fu, Rongtang (<i>Fudan Univ.</i>) | 11:50-12:15 Wan, Meixian (<i>Inst. Chem.</i>) Effect of Molecular Structure of Sulfonic Acids as dopants on the Morphology and Physical Properties of the Doped Polyaniline by in-situ Doping Polymerization |
| | | 12:15-14:00 Lunch |
| | | Chairperson: Sato, Naoki (<i>Kyoto Univ.</i>) |

- 14:00-14:25 **Inoue Katsuya (IMS)**
Construction and Magnetic Properties of Molecular Magnets made by high-spin Oligo(aminoxy)radicals and Transition metal ions
- 14:25-14:50 **Wang, Lixiang (Changchun Inst. Applied Chem.)**
Design and Synthesis of Novel Electroluminescent Polymers Containing Hole-and/or-electron-transporting Units
- 14:50-15:15 **Sugimoto, Toyonari (Osaka Pref. Univ.)**
Synthesis and Electrical Conducting and Magnetic Properties of Neutral Copper, Cobalt, Iron, and Manganese Complexes Substituted with Tetrathiafulvalenyl-dithiolate Groups
- 15:15-15:25 **Closing Remark**
Zhu, Daoben (Inst. Chem., CAS)

後も本事業を継続していきたい旨の強い決意が表明された。次いで、伊藤所長より挨拶があり本会議の開催に対する主催者の努力に謝意が表明された。これらの挨拶に次いで、次に掲載したプログラムに基づく講演と討論が日韓両国の研究者によって行われた。会議の主題は「スペクトルと理論」であったが、講演内容は分子クラスターの実験と理論計算、重原子の相対論的量子化学計算、固体-液体界面のスペクトル、液体のダイナミックス、液体中の高次光学過程の理論、固体のスペクトルなど、分子科学のほとんどの領域におよんでおり、日韓両国の研究レベルの高さを示すものであった。

テジョン市はソウル市から約160キロの遠隔地にあり、また、日本側代表団が福岡から札幌にいたる全国各地から異なる時刻に到着したため、主催者側はそれぞれの参加者に出迎えをつけるという甚大な労をとて下さった。これらを含めて主催者のいきとどいたお世話にこの場を借りて深く感謝いたします。

(平田文男 記)

日韓協力事業 第8回日韓合同シンポジウム

主題 Molecular Spectroscopy & Theoretical Chemistry

日韓協力事業の一環として2年毎に開催されている合同シンポジウムが標記の主題のもとに1999年1月8日-9日の2日間にわたって韓国テジョン(Taejon)市のKAIST (Korean Advanced Institute for Science and Technology)において開催された。韓国側は韓国科学アカデミー会長のMushik Jhon博士をはじめとする22名、日本側からは派遣団長の伊藤光男分子科学所長をはじめとする12名が参加した。韓国側の世話人は分子科学研究センターのRyong Ryoo教授である。

初日は、まず、Mushik Jhon博士より日韓協力事業に関するこれまでの経緯について報告があり、今

プログラム

January 7 (Thu), 1999

7:00-9:00 **Reception**

January 8 (Fri), 1999

9:00-9:05 **Opening Remarks**
Kyung-Hoon Jung (KAIST)

9:05-9:20 **Congratulatory Remarks**
Mitsuo Ito (IMS), Mu Shik Jhon (KAIST)

Chairperson: Hosung Sun (Sungkyunkwan Univ.)

9:20-9:50 **Suehiro Iwata (IMS)**
Analytical Derivative Methods in ab initio
1D Crystal Orbital Theory



9:50-10:20 **Yoon Sup Lee (KAIST)**
Spin-Orbit Calculations for Molecules
Containing Heavy or Superheavy Atoms

10:20-10:40 **Coffee Break**

Chairperson: Kyoung Tai No (Soongsil Univ.)

10:40-11:10 **Eisaku Miyoshi (IMS)**
Recent Development of Model Core
Potentials and Their Applications

11:10-11:40 **Bon Su Lee (Inha Univ.)**
Ab Initio MO Studies on the Gas-Phase
Competitive Reactions

11:40-12:10 **Koichi Yamashita (Univ. Tokyo)**
Path Integral Monte Carlo Study of
Sodium-Doped Quantum Helium Clusters

12:10-13:30 **Lunch**

Chairperson: Sehun Kim (KAIST)

13:30-14:00 **Seung C. Park (Sungkyunkwan Univ.)**
Classical and Quantum Mechanical Studies
of the CO Vibrations in CO/Cu(100)

14:00-14:30 **Masatoshi Osawa (Hokkaido Univ.)**
Time-Resolved Surface-Enhanced Infrared
Study of the Electrochemical Interface

14:30-15:00 **Jihwa Lee (Seoul National Univ.)**
Mechanism and Dynamics of the Gas-
Phase Hydrogen Abstraction of Adsorbed
D Atom on Pt(111)

15:00-15:20 **Coffee Break**

Chairperson: Dongho Kim (KRISS)

15:20-15:50 **Hirohiko Kono (Tohoku Univ.)**
Adiabatic and Diabatic Responses to Laser
Fields: From H_2^+ to Porphyrin Dimer

15:50-16:20 **Yoshitaka Tanimura (IMS)**
Fifth and Seventh Order Two-Dimensional
Raman Spectroscopy for Brownian
Oscillator System with Frequency
Modulation

16:20-16:50 **Kwang Soo Kim (POSTECH)**
Theoretical Studies on the Photochromic
Activity of Diarylethylene Photoswitch
Molecules

16:50-17:10 **Coffee Break**

Chairperson: Minhaeng Cho (Korea Univ.)

17:10-17:40 **Kook Joe Shin (Seoul National Univ.)**
Kinetics Theory of Bimolecular Reactions
in Liquid

17:40-18:10 **Fumio Hirata (IMS)**
Collective Density Fluctuations in Polar
Liquids and Their Response to Ion
Dynamics

18:10-18:40 **Yoo Hang Kim (Inha Univ.)**
Classical Trajectory Study on Gas Atom-
Solid Adsorbate Reaction

18:40-20:30 **Dinner**

January 9 (Sat), 1999

Chairperson: Seong Keun Kim (Seoul National Univ.)

9:00-9:30 **Minyung Lee (Ewha Womans Univ.)**
Luminescence Probing of Excited-State
Photophysics and Dynamics in AOT
Reverse Micelles

9:30-10:00 **Du-Jeon Jang (Seoul National Univ.)**
Photochemistry and Photophysics of Some
Nanoparticle Systems

10:00-10:30 **Hiroshi Sekiya (Kyushu Univ.)**

Coupling of Low Frequency Vibrations
with Proton Transfer in Aromatic
Molecules and van der Waals Clusters

10:30-10:50 *Coffee Break*

Chairperson: **Hyuck Cho** (Chungnam National Univ.)

10:50-11:20 **Jong-Jean Kim** (KAIST)
Low Frequency Dielectric Relaxation
Spectra of Dipole Glass

11:20-11:50 **Tomoyuki Mochida** (Toho Univ.)
Quantum Paraelectricity,
Antiferromagnetic Proton Ordering and
Deuteration-Induced Incommensurate
Phase in Hydrogen-Bonded Solids

11:50-12:20 **Nobuyuki Nishi** (IMS)
Charge Delocalization and Charge
Hopping in Benzene Cation Clusters and
Neat Liquid

12:20-13:30 *Lunch*

Chairperson: **Ja Kang Ku** (POSTECH)

13:30-14:00 **Seong Keun Kim** (Seoul National Univ.)
Photoelectron Spectroscopy of Pyridine
Cluster Anions: Simultaneous Observation
of Dipole-Bound and Valence Electron
States

14:00-14:30 **Tadashi Okada** (Osaka Univ.)
Energy and Distribution Relaxation
Dynamics in the Course of Solvation in
Polar Solvents

14:30-15:00 **Masahide Terazima** (Kyoto Univ.)
Ultrafast Energy Conversion Process from
the Electronic Energy to the Thermal
Energy in Solution

15:00-15:30 **Daisik Kim** (Seoul National Univ.)
Femtosecond Control of Absorption by
Coherent Phase

15:30 *Closing Remarks*

口チエスター大学との 共同研究

口チエスター大学に併設されている全米科学財団の科学技術センター、「光誘起電子移動研究センター」と分子科学研究所が、研究テーマ①光誘起分子内及び分子間電荷移動、②光誘起水素原子移動、③分子性固体におけるプロトン移動、④光増感作用、⑤電荷移動理論及びこれらに関連のある研究を掲げて共同研究を行う計画を立て、1993年12月に事前共同研究が分子科学研究所において口チエスター大学側から11名が参加して開催された。この結果をもとに1994年度は2名の研究者を派遣した。1995年12月からは日本学術振興会の重点研究国際協力事業として正式にスタートした。1996年2月に分子研側から7名が参加して研究会を口チエスターにおいて開催し、これまでの双方の研究成果の発表・討議を行うと共に、具体的な研究課題の実施に関する検討も行った。その結果、「超高速分光による凝縮相電荷移動ダイナミクス」「生体関連電荷移動反応」「新物質の開発」「凝縮系中分子の動力学の理論的研究」の主要4テーマを中心に関連する広範な研究者が本プロジェクトに参加し、平成10年11月の事業終了までに延べ89名が口チエスター大学において共同研究の実施・成果の討議等を行った。

主な研究成果を以下に挙げる。

① フェムト秒レーザーを用いた五次の倍音位相緩



和法の理論的・実験的研究を進めた。この手法では異なる振動モード間の遷移周波数の揺らぎの時間相関を求めることができることが利点であり、米国側は多モードブラウン振動子モデル（Multi-mode Brownian Oscilaltor Model）を用いて五次の応答関数の表式の導出を行った。日本側は色素レーザーを用いてクロロホルムやその重水素置換体について実験を行い、精度の高い信号を観測することに成功した。

②カーボン13含有La金属内包フラーレン（ $^{13}\text{C-La@C}_{82}$ ）を用いた ^{13}C -ENDOR測定を行い、 ^{13}C -ENDOR測定に成功した。③西洋ワサビペルオキシダーゼやチトクロームP-450によるアミン類の酸化反応に関する研究では、酵素の酸化活性種である高原子価状態を直接観測することに成功した。活性種とアミン類の反応の素過程の速度論的解析により、反応機構の詳細を解明した。④ I_3^- は気相中では高い対称性（ D_{3h} ）を持ち、非対称伸縮モードは禁制である。溶液中での共鳴ラマンスペクトルの測定から、この非対称伸縮モードがアルコールなどの溶液中で観測されることを見出し、最近開発したRISM-SCF/MCSCF法を用いて、水・メタノール・アセトニトリル中における I_3^- の自由エネルギー面を非経験的に計算した。その結果、このモードの観測される本質が非対称構造を持つ分子種の増加に起因することを明かとした。⑤フォッカー・プランク方程式を用いてトンネル過程の介在する分子の2次元ラマン分光を計算し、2次元ラマン分光を化学反応の解析に用いる可能性について検討を行い、散逸効果が量子現象に及ぼす効果を解析可能な事を明かとした。

（渡辺芳人 記）

平成10年度（後期）

分子研コロキウム・分子科学フォーラム

| コロキウム | フォーラム | 開催日時 | 講演題目 | 講演者 |
|-------|-------|----------|---|----------------|
| 第694回 | | 98年10月7日 | 複素光学-顕微鏡の超分解能とX線回折の位相決定 | 永山 国昭 |
| 第695回 | | 10月14日 | 巨視的量子現象 | 高木 伸 |
| | 第15回 | 10月21日 | 複雑分子の正確な計算にチャレンジする | 諸熊 奎治 |
| 第696回 | | 11月11日 | 小型固体レーザー | 平等 拓範 |
| | 第16回 | 11月18日 | 有機フォトクロミズムの化学 | 入江 正浩 |
| 第697回 | | 11月25日 | Molecular Architecture: Design and Self-Assembly of Metallacyclic Polygons and Polyhedra via Coordination | Peter J. Stang |
| 第698回 | | 12月9日 | 光合成モデル化合物の研究と今後の課題 | 永田 央 |
| | 第17回 | 12月16日 | あまのじやくは技術革新の母 | 霜田 光一 |
| 第699回 | | 99年1月13日 | 遷移金属錯体における光・磁気相乗効果 | 小島 憲道 |
| 第700回 | | 1月27日 | レーザー冷却された中性原子気体のボーズ・アインシュタイン凝縮 | 上田 正仁 |
| 第701回 | | 2月24日 | 準安定ヘリウム原子のレーザートラッピング | 熊倉 光孝 |
| 第702回 | | 3月3日 | キラルスマクティック液晶における反強誘電性の起源-NMRによるアプローチ- | 宮島 清一 |
| | 第18回 | 3月25日 | 漫談III | 伊藤 光男 |

平成10年度（後期）共同研究



協力研究

| | | |
|--|----------------------------|-------------------------|
| 溶媒和NH ₄ ラジカルの解離ダイナミックス | 神戸大学理学部 | 富田喜代一 野々瀬真司 |
| 溶媒効果を考慮したタンパク質立体構造予測法の開発 | 奈良女子大学理学部 | 中沢 隆 渡邊 華奈 |
| 溶液内化学反応についての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 |
| 紫外共鳴ラマン分光法によるヘモグロビンの高次構造解析 | 金沢大学医学部 | 長井 雅子 |
| 共鳴ラマン分光法によるヘムオキシゲナーゼの構造解析 | 東北大学反応化学研究所附属有機資源・材料化学センター | 富田 育 |
| 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 | 東京工業大学理工学研究科 | 金森 英人 熊谷 基弘 |
| ヘテロフラーレンの構造と特性 | 新潟大学大学院自然科学研究科 | 赤阪 健 大窪 清吾 |
| マススペクトル法によるヘキサフルオロイソプロピルアルコール水溶液のクラスター構造 | 福岡大学理学部 | 山口 敏男 吉田 亨次 |
| マススペクトル法及びX線回折法によるトリハロゲノエタノール水二成分溶液のクラスター構造 | 佐賀大学理工学部 | 高椋 利幸 松尾 大輔 |
| トルエン誘導体のPFI-ZEKEスペクトル測定 | 東京工業大学大学院理工学研究科 | 市村禎二郎 小島 博 |
| 赤外-紫外二重共鳴分光法によるアザインドールクラスターの振動分光 | 早稲田大学理工学部 | 伊藤 紘一 横山 裕 |
| PFI光電子分光法によるフェノール誘導体溶媒和クラスター中の振動分光 | 早稲田大学理工学部 | 高橋 博彰 吉田 圭吾 |
| 赤外-紫外二重共鳴分光法による溶媒和クラスターの構造解明 | 京都大学大学院理学研究科 | 大島 康裕 三井 正明 |
| フェムト秒パルスレーザーによる真空紫外光の発生と光電子分光への応用 | 横浜市立大学理学部 | 木下 郁雄 |
| ベンゾフェノン誘導体の電子状態に与える溶媒効果 | 信州大学工学部 | 田中 伸明 |
| 孤立カルボニル分子の一重項-三重項相互作用の研究 | 京都大学総合人間学部 | 馬場 正昭 |
| ピコリンのメチル基ねじれ振動のポテンシャル解析 | 東京農工大学大学院生物システム応用科学研究科 | 中田 宗隆 工藤 智一 増子 栄一 |
| Mn _{0.86} PS ₃ (bipy) _{0.56} 強磁性体のXPS | 熊本大学大学院自然科学研究科 | 市村 憲司 |
| BEDT-TTF系有機伝導体のラマンスペクトル | 山口東京理科大学基礎工学部 | 井口 真 |
| (Me ₂ DCNQI) ₂ Li _{1-x} Cu _x のラマンスペクトル | 東京大学物性研究所 | 田島 裕之 山本 貴 |
| ダイヤモンドアンビルセルによる単結晶4端子高压電導度測定 | 富山大学理学部 | 宮崎 隆文 |
| 分子性伝導体の構造と物性 | 東京大学大学院理学系研究科 | 小林 昭子 |
| 有機伝導体における相転移機構の解析 | 大阪大学理学部ミクロ熱研究センター | 齋藤 一弥 坪 広樹 |
| 金属錯体導電体の構造と物性 | 北海道大学大学院理学研究科 | 稻辺 保 松田 真生 |
| 液晶MHPBCにおける反強誘電性の出現機構の解明 | 日本大学文理学部 | 藤森 裕基 |
| β-ジケトン類化合物の結晶内互変異性ダイナミックスの解析 | 東邦大学理学部 | 持田 智行 |

| | | |
|---|------------------|-------------|
| 金属酵素モデルによる酸化反応系の研究 | 九州大学有機化学基礎研究センター | 谷 中山 文都 慎也 |
| カテコールジオキシゲナーゼ型酸素化機能を発現する金属錯体の設計と反応機構研究 | 京都大学大学院工学研究科 | 船引 隆三 松井 元 |
| 有機ラジカルを用いた機能性分子磁性体の開発 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 石黒 勝也 |
| リング構造をもつ分子磁性体の創製 | 九州大学理学部 | 浅野 貴行 |
| 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 |
| 高压下におけるセシウムの分子動力学計算 | 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ポテンシャルの開発とその応用 | 九州大学大学院総合理工学研究科 | 酒井 嘉子 茂木 孝一 |
| 原子の原子状態の精密計算 | 青森大学経営学部 | 長内 有 |
| 分子クラスター分子間振動遷移の直接遷移の観測 | 九州大学理学部 | 田中 石黒 武彦 正純 |
| 超音速ジェット中に生成する不安定分子のミリ波分光法による検出 | 九州大学理学部 | 今城 尚志 |
| ビフェニルのフェムト秒けい光減衰挙動の精密測定 | 東京大学大学院理学系研究科 | 岩田 耕一 石井 邦彦 |
| 反応計測用STMの製作 | 豊橋技術科学大学 | 内田 裕久 八木 徳和 |
| 高分解能斜入射分光器用差動排気装置の調整及び分光器の性能評価 | 広島大学理学部 | 吉田 啓晃 |
| 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 長巳 達雄 夏生 |
| ホスフィン等の低温燃焼素反応の計算 | 物質工学工業技術研究所 | 近藤 重雄 |
| ZEKE光電子分光法によるカチオン分子の水素結合とプロトン移動の研究 | 九州大学理学部 | 関谷 森永 博希 |
| 可視ポンプ・遠赤外プローブ時間分解分光の開発とその化学反応への応用 | 神戸大学理学部 | 富永 圭介 |
| 錯体形成能を有する新規有機酸化還元系の開発 | 信州大学理学部 | 太田 和氣 裕司 |
| キノリン誘導体およびキノリノール金属錯体に関する研究 | 姫路工業大学工学部 | 北村 千寿 |
| 導電性高分子修飾電極の光二次電池への応用 | 静岡大学工学部 | 昆野 昭則 |
| ポルフィリン環の非平面化に伴うヘムの物性変化 | 東邦大学医学部 | 中村 幹夫 大胡 恵樹 |
| フラー・レン錯体の磁性の研究 | 法政大学工学部 | 丸山 育成 弓削 亮太 |
| ヘテロ金属フラー・レンの電子状態に関する研究 | 東京都立大学大学院理学研究科 | 菊池 耕一 児玉 健 |
| μ -アルコキソ鉄二核錯体バーオキソ付加体の光反応性 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 廣田 奥野 俊貴士 |
| d-f元素系二核錯体の磁気的性質 | 山形大学理学部 | 坂本 政臣 |
| 金属錯体複合化ペプチドの設計と核酸相互作用の解析 | 東京工業大学生命理工学部 | 三原 久和 |
| ポリカルボン酸系ビスマス錯体の水溶液化学 | 琉球大学理学部 | 安里 英治 |
| 自己集合性高分子錯体の構築と機能発現 | 宮城教育大学 | 笠井香代子 |
| NO _x 分解、CO ₂ 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 |



| | | |
|----------------------------------|--------------|----------------|
| C-H...π相互作用を有する有機結晶の極低温下における構造解析 | 電気通信大学電気通信学部 | 岩崎不二子 橋爪 大輔 |
| X線リソグラフィを用いたフォトニックバンドギャップ構造の製作 | 宮崎大学工学部 | 黒澤 宏 竹添 法隆 |

研究会

| | | |
|-------------------|----------------------------|-------|
| 光励起による相転移とその前駆現象 | 分子科学研究所 | 鎌田 雅夫 |
| 低温マトリックス単離法の新展開 | 東京農工大学大学院生物システム応用 科学研究所 | 中田 宗隆 |
| 物理化学の現状と将来 | 北陸先端科学技術大学院大学 | 吉原經太郎 |
| 放射光を用いたナノ構造の科学と工学 | 分子科学研究所 | 宇理須恒雄 |

施設利用 (I) 分子制御レーザー開発研究センター

| | | |
|-------------------------------|------------------|-------|
| 赤外光による新有機材料の非線形性の測定 | (財) 神奈川科学技術アカデミー | 腰原 伸也 |
| 高圧力下での半導体の構造相転移 | 大阪大学大学院基礎工学研究科 | 半沢 弘昌 |
| 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 |
| 分子性液体の遠赤外吸収スペクトルの研究 | 千葉大学大学院自然科学研究科 | 齋藤 健一 |
| 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 |
| レーザー蒸発法による超微粒子生成のレーザー波長依存性の研究 | 東北大学大学院理学研究科 | 美齊津文典 |

施設利用 (II) 分子物質開発研究センター

| | | |
|--|--------------------------|-------|
| 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 |
| 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 |
| 金属錯体の反応とフォトクロミズム | 愛知教育大学 | 中島 清彦 |
| 超微粒子磁性 (磁化量子トンネル効果) | 三重大学教育学部 | 佐光三四郎 |
| 半導体薄膜の評価 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| 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 |
| 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 |
| 生体機能分子性固体の光電子分光 | 北陸先端科学技術大学院大学材料科学 研究科 | 北川 宏 |
| 金属アルコキシド単結晶の構造解析 | 福井工業高等専門学校 | 豊田 昌宏 |
| 水素及び窒素ドープしたアモルファスカーボン膜の研究 | 大阪大学大学院基礎工学研究科 | 半沢 弘昌 |
| S O R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 |
| アルカリ金属をドープしたC60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 |
| 準結晶の磁性 | 名古屋大学情報文化学部 | 松尾 進 |
| 鉄基ホイスラー型化合物の電気的, 磁気的性質 | 名古屋工業大学大学院工学研究科 | 加藤 雅章 |
| 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磁気特性 | 名古屋工業大学 | 安達 信泰 |
| 金属原子を含んだ新規炭素ナノ集合体の研究 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 小塙 明 |

| | | |
|--|------------------------|-------|
| ゼオライトと交流電場との相互作用 | 豊橋技術科学大学 | 大串 達夫 |
| ナノチューブ状物質の電子・磁気物性の研究 | 科学技術振興事業団 | 坂東 俊治 |
| 強相関電子系低次元ハロゲン架橋ニッケル（III）錯体の電子状態制御 | 名古屋大学大学院人間情報学研究科 | 眞鍋 敏夫 |
| リチウムイオン電池用電解液内のイオン及び分子の拡散係数測定 | 名古屋大学情報文化学部 | 佐野 充 |
| 施設利用 (I) 装置開発室 | | |
| 主鎖型液晶性高分子の非線形光学的性質とその光波マニピュレーション・デバイスへの応用 | 京都大学大学院工学研究科 | 浅田 忠裕 |
| UVSOR 協力研究 | | |
| AlGaNのXANES | 福井大学工学部 | 福井 一俊 |
| ニトリル化合物の光解離ダイナミクスの研究 | 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 | 東北大學科学計測研究所 | 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原子・分子の光電子分光 | 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所 | 伊藤 健二 |
| MPt ₃ (M=Cr, Mn, Fe, Co) のM3p-3d共鳴光電子分光 | 広島大学理学部 | 佐藤 仁 |
| 光電子分光によるシリコン上のフタロシアニンの研究 | 筑波大学物質工学系 | 秋本 克洋 |
| 層状アルカリ金属複合酸化物の光電子放出の角度依存性 | 富山大学理学部 | 宮崎 隆文 |
| フラー・レン類の光電子分光 | 千葉大学工学部 | 日野 照純 |
| ARUPSによる水素終端Si上のPTCDA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 |
| 角度分解紫外光電子分光による機能性有機薄膜／金属単結晶界面の膜構造及び電子構造の研究 | 名古屋大学大学院理学研究科 | 石井 久夫 |
| UVSOR 招へい協力研究 | | |
| 観測系ソフトウェアの改良 | 神戸大学理学部 | 木村 真一 |
| UVSOR 施設利用 | | |
| 元素添加非晶質SiO ₂ ならびに非晶質Si ₃ N ₄ , Ta ₂ O ₅ の光吸収および発光特性 | 早稲田大学理工学部 | 大木 義路 |
| 真空紫外レーザー用誘電体多薄膜鏡の光学特性 | 宮崎大学工学部 | 黒澤 宏 |
| タンゲステン酸塩の光物性 | 海上保安大学校 | 藤田 正実 |
| 半導体結晶の内駆動起子2光子分光 | 岡山大学理学部 | 有本 收 |
| 放射光とレーザーを組み合せた駆動起子の2光子分光 | 大阪歯科大学 | 辻林 徹 |
| 水素結合型強誘電体PbHPO ₄ とその重水素化物のVUVスペクトル | 大阪電気通信大学工学部 | 大野 宣人 |
| B1LBの整備 | 分子科学研究所 | 鎌田 雅夫 |
| 遷移金属酸化物の真空紫外反射分光 | 東京大学工学系研究科 | 十倉 好紀 |
| 脱ミオシン線維の時間分解蛍光分光 | 名古屋大学理学研究科 | 谷口美恵子 |



| | | |
|--|-------------------|--------|
| 新フッ化物結晶の吸収端の測定 | 分子科学研究所 | 猿倉 信彦 |
| 粒子線照射を受けたシリカに生成する欠陥種に関する研究（光吸収及び光励起発光スペクトルによるキャラクタリゼーション） | 名古屋大学理工科学総合研究センター | 武藤 俊介 |
| 低次元磁性体の偏光反射、偏光励起スペクトル測定 | 京都大学大学院理学研究科 | 白井 正伸 |
| 電子一イオン・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 |
| 電子一イオン・コインシデンス分光研究の新展開 | 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 ₂ 表面からのイオン脱離機構の研究（II） | 分子科学研究所 | 田中慎一郎 |
| NEA F Sを用いた吸着酸素の分子配向の密度依存 | 北海道大学触媒化学研究センター | 松島 龍夫 |
| Pd(110)表面上に吸着したC ₂ H ₄ 分子の表面超構造形成時における分子配向と電子状態変化の研究 | 理化学研究所 | 川合 真紀 |
| 不純物オージェフリー発光を利用した光増幅の検証 | 信州大学工学部 | 伊藤 稔 |
| 放射光照射による半導体表面反応のSTMによる観察 | 豊橋技術科学大学 | 吉田 明 |
| ハロゲン化鉛化合物の脱離機構と支配的要因 | 福井工業高等専門学校 | 北浦 守 |
| 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分子分光 | 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 |
| Zn-Mg-Ho及びAl-Ni-Co準結晶の高分解能光電子分光 | 名古屋大学大学院工学研究科 | 曾田 一雄 |
| 物理吸着分子および多層膜分子の光電子分光（II） | 分子科学研究所 | 田中慎一郎 |
| B L 5 A の整備 | 分子科学研究所 | 鎌田 雅夫 |
| GaAs(100)の低温作成NEA表面からの光電子スピン偏極 | 分子科学研究所 | 鎌田 雅夫 |
| シリコン表面上の1次元物質の電子状態 | 東京大学物性研究所 | 吉信 淳 |
| アモルファス半導体の光黒化現象に関する研究 | 岐阜大学工学部 | 林 浩司 |
| 磁気線二色性によるGd薄膜の磁性の研究 | 分子科学研究所 | 木下 豊彦 |
| Co(100)上のNi薄膜の膜厚に依存したNi6eVサテライトにおける多重項の共鳴効果 | 分子科学研究所 | 木下 豊彦 |
| 水素ライマン α 線吸収セルの吸収率の測定 | 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 |
| 軟X線反射型マスクのコントラスト測定 | 姫路工業大学高度産業科学技術研究所 | 新部 正人 |
| X線光学系の評価研究 | 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II | 学習院大学理学部 | 荒川 一郎 |
| B L 5 B の整備 | 分子科学研究所 | 木下 豊彦 |
| SnO ₂ /SiO ₂ 多層膜の軟X線反射特性の評価 | 東京学芸大学教育学部 | 並河 一道 |
| 高分散多層膜グレーティングの開発 | 国立天文台太陽物理学研究系 | 原 弘久 |
| ミリ波および遠赤外領域におけるリチウムイオン2次電池材料LiNiO ₂ の反射測定 | 神戸大学理学部 | 太田 仁 |
| セリウムモノブニクタイトの赤外磁気円偏光二色性 | 神戸大学大学院自然科学研究科 | 木村 真一 |

| | | |
|---|--|--|
| B L 6 A 1 の整備 | 分子科学研究所 神戸大学理学部 神戸大学理学部 福井大学工学部 北海道大学大学院理学研究科 名古屋大学大学院工学研究科 分子科学研究所 東京学芸大学 | 鎌田 雅夫 難波 孝夫 岡村 英一 中川 英之 河村 純一 吉田 朋子 木下 豊彦 長谷川貞夫 |
| 希土類3元化合物の赤外-遠赤外反射スペクトル Fe _{3-x} V _x Al及びNi _{1-x} Sの低エネルギー励起 | | |
| 電子分極・分子振動間のエネルギー変換と振動緩和過程の研究 α-AgI微結晶分散ガラスのミリ波・遠赤外スペクトル | | |
| 照射損傷を受けたシリカ表面の観察 | | |
| B L 7 A の整備 | | |
| Fe及び硫酸を添加したジルコニア触媒のXAFSスペクトルの測定 | 名古屋大学大学院工学研究科 鳴門教育大学 工業技術院大阪工業技術研究所 福岡大学理学部 京都大学大学院エネルギー科学研究科 豊橋技術科学大学 名古屋大学理工化学総合研究センター | 吉田 寿雄 松川 徳雄 梅咲 則正 脇田 久伸 八尾 健 若原 昭浩 田辺 哲朗 |
| シリカアルミナ光触媒のXAFSによる構造解析 | | |
| アルカリハライドのSR照射二次X線励起スペクトル測定 | | |
| Ni-Pめっき膜中微量不純物の存在形態の研究 | | |
| XAFS測定による機能材料の構造解析 | | |
| リチウム2次電池正極活物質中の遷移金属の酸化状態 | 京都工芸繊維大学工芸学部 | 塩野 剛司 |
| 不純物添加多元化合物半導体の結晶構造の解析 | | |
| 水素イオン照射を受けたシリコンのXAFSによるキャラクタリゼーション | 京都工芸繊維大学工芸学部 神戸大学理学部 名古屋大学大学院理学研究科 琉球大学教育学部 名古屋大学工学研究科 名古屋大学工学部 佐賀大学理工学部 名古屋大学大学院工学研究科 京都大学大学院エネルギー科学研究科 京都教育大学 分子科学研究所 分子科学研究所 | 有谷 博文 河本 洋二 山下 広順 石黒 英治 後藤 俊夫 森田 慎三 小川 博司 正畠 宏祐 内本 喜晴 伊吹 紀男 下條 竜夫 下條 竜夫 |
| セラミック前駆体およびセラミック粉末の物理化学的性質に及ぼす粉碎の効果と構造変化 | | |
| アルカリイオン添加酸化マグネシウムの触媒活性種の構造解析 | | |
| ZrF ₄ 系ガラス中のNaの存在状態の研究 | | |
| SORを用いたX線反射鏡の光学特性評価実験 | | |
| ダイヤモンドの放射光励起エッ칭 | | |
| SRを用いた量子構造体形成プロセス | | |
| 放射光励起プラズマによるナノメータ加工エッ칭に関する研究II | | |
| 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 | | |
| 放射光励起表面反応脱離種の質量分析法による研究 | | |
| リチウムマンガンスピネル酸化物の酸化状態 | | |
| K殻励起による多原子分子の反応制御 | | |
| B L 8 B 1 の整備 | | |
| 光電子をエネルギー選別した内殻励起光解離フラグメントのTOFスペクトル測定 | 東北大科学計測研究所 広島大学理学部 福井大学工学部 東京工業大学工学部 | 羽田野 忠 平谷 篤也 山本 晃勇 大塚 潔 |
| 内殻磁気旋光分光の研究 | | |
| 有機酸などの内殻励起による光解離過程の研究 | | |
| 窒化物半導体混晶の窒素K内殻吸収測定(II) | | |
| Ni触媒上に生成した炭素質の構造解析 | | |

| | | | | |
|-------|------------------------|-----------------------|---------------|--|
| 猿倉信彦 | 分子制御レーザー開発研究センター 助教 | 10.10.3 ～10.10.14 | 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及び研究成果発表のため |
| 奥村剛 | 理論研究系 助手 | 10.10.8 ～10.10.19 | 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 |
| 谷村吉隆 | 理論研究系 助教 | 10.10.19 ～10.10.26 | 韓国 | 韓国化学会, ソウル大, 高麗大での招待講演及び高麗大Cho教授との議論 |
| 宇理須恒雄 | 極端紫外光科学研究系 教 | 10.10.31 ～10.11.6 | アメリカ | 重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する共同研究打ち合わせおよび国際会議出席 |
| 松本益明 | 極端紫外光科学研究系 助教 | 10.10.31 ～10.11.11 | アメリカ | 国際会議における研究成果の発表 |
| 大竹秀幸 | 分子制御レーザー開発研究センター 助手 | 10.11.1 ～10.11.6 | アメリカ | 励起子国際会議出席のため |
| 大竹秀幸 | 分子制御レーザー開発研究センター 助手 | 10.11.7 ～10.11.14 | 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 |
| 鈴木優子 | 技術課 技官 | 10.11.9 ～10.11.19 | アメリカ | 重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する最終成果報告会議出席及び情報収集 |
| 谷村吉隆 | 理論研究系 助教 | 10.11.9 ～10.11.19 | アメリカ | 重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する最終成果報告会議出席及び研究打ち合わせ |
| 北川楨三 | 分子構造研究系 教 | 10.11.11 ～10.11.16 | 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」分野における日米情報交換セミナー「プロトン移動にカップルした電子移動」参加 |
| 川口博之 | 錯体化学実験施設 助手 | 10.11.14 ～10.11.29 | イギリス | カルコゲニド錯体に関する共同研究実施 |
| 平田文男 | 理論研究系 教 | 10.11.16 ～10.11.29 | アメリカ | 学振重点国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する最終成果報告会議出席のため |
| 渡辺芳人 | 相関領域研究系 教 | 10.11.16 ～10.11.22 | アメリカ | 重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する米国Pennsylvania大学およびRochester大学での研究打ち合わせ |
| 加藤立久 | 分子構造研究系 助教 | 10.11.16 ～10.11.21 | 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 |
| 田原太平 | 極端紫外光科学研究系 助教 | 10.11.16 ～10.11.23 | アメリカ | 日本学術振興会重点研究国際協力事業「光誘起電荷移動」に関する最終成果報告会議出席及び研究打ち合わせ |
| 岡本祐幸 | 理論研究系 助教 | 10.11.18 ～10.11.26 | ブラジル | セミナー及びFirst Brazilian School on Emergent Sciencesにおいて招待講演 |
| 下條竜夫 | 極端紫外光実験施設 助手 | 10.11.20 ～10.12.6 | フランス | フランス放射光研究所における共同研究に参加するため |
| 緒方啓典 | 分子集団研究系 助手 | 10.11.29 ～10.12.5 | アメリカ | MRS fall meetingに出席, 講演を行う |
| 宇理須恒雄 | 極端紫外光科学研究系 教 | 10.11.30 ～10.12.5 | イギリス デンマーク | 共同研究及び実験装置の修理改造に関する打ち合わせ |
| 猿倉信彦 | 分子制御レーザー開発研究センター 助教 | 10.12.5 ～10.12.14 | アメリカ | 国際レーザー会議に出席のため |
| 上野信雄 | 極端紫外光科学研究系 教 | 10.12.11 ～10.12.20 | イスラエル イギリス | 研究課題「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」実施及び研究打ち合わせ |
| 猿倉信彦 | 分子制御レーザー開発研究センター 助教 | 10.12.14 ～10.12.20 | 台湾 | IPC'98に出席のため |
| 西信之 | 電子構造研究系 教 | 10.12.15 ～10.12.23 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における共同研究 |

| | | | | |
|-----------|------------------------------|-----------------------|--------|--|
| 佐 藤 信一郎 | 分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授 | 10.12.15 ～10.12.23 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における共同研究 |
| 中 村 孝 和 | 電子構造研究系 助 手 | 10.12.15 ～10.12.23 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における共同研究 |
| 藤 井 浩 | 分子物質開発研究センター 助 教 授 | 11.1.6 ～11.1.14 | アメリカ | ヘムオキシゲナーゼによるヘムの分解機構の研究打ち合わせを行うため |
| 西 信 之 | 電子構造研究系 教 授 | 11.1.7 ～11.1.10 | 韓 国 | 第8回日韓シンポジウムにて講演・討論 |
| 三 好 永 作 | 相 関 領 域 研 究 系 教 授 | 11.1.7 ～11.1.10 | 韓 国 | 第8回韓日合同会議「分子スペクトルと理論」の講演発表及び研究打ち合わせ |
| 平 田 文 男 | 理 論 研 究 系 教 授 | 11.1.7 ～11.1.10 | 韓 国 | 第8回分子科学に関する日韓合同シンポジウム「分子スペクトルと理論」に出席のため(溶解イオンダイナミクス等に関する報告・討論及び情報収集) |
| 岩 田 末 廣 | 理 論 研 究 系 教 授 | 11.1.7 ～11.1.11 | 韓 国 | 第8回韓国・日本分子科学会セミナー国際会議において招待講演(研究成果発表及び世界の動向の情報収集) |
| 伊 藤 光 男 | 分 子 科 学 研 究 所 所 長 | 11.1.7 ～11.1.9 | 韓 国 | 第8回日韓分子科学合同シンポジウムに出席のため |
| 谷 村 吉 隆 | 理 論 研 究 系 助 教 授 | 11.1.7 ～11.1.13 | 韓 国 | KAISTでの招待講演及び高麗大Cho教授との議論 |
| 永 園 充 | 技 術 課 技 術 官 | 11.1.8 ～11.3.18 | スウェーデン | 軟X線発光分光および光電子分光技術の修得および第三世代放射光リングに関する情報収集 |
| 平 等 拓 範 | 分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授 | 11.1.30 ～11.2.10 | アメリカ | 新型固体レーザー、非線形波長変換関連の国際会議ASSL99への参加及び発表 |
| 猿 倉 信 彦 | 分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授 | 11.1.30 ～11.2.7 | アメリカ | ASSL99に出席 |
| 藤 田 誠 | 錯 体 化 学 実 験 施 設 助 教 授 | 11.2.3 ～11.2.6 | 韓 国 | ソウル大学、韓国科学技術研究所(KAIST)、浦項工科大学(POSTECH)にて講演及び研究討議を行うため |
| 小 崎 紳 一 | 相 関 領 域 研 究 系 助 手 | 11.2.10 ～11.4.1 | アメリカ | スクリップス研究所のDavid Goodin教授と蛋白質の電気化学ならびに結晶構造解析に関する共同研究を行う |
| 内 田 純 | 分 子 構 造 研 究 系 非 常 勤 研 究 員 | 11.2.13 ～11.2.26 | 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」分野における共同研究実施のため |
| 森 田 紀 夫 | 分 子 構 造 研 究 系 助 教 授 | 11.2.14 ～11.2.28 | ス イ ス | 科研費・創成的基礎研究「反陽子を用いた反物質科学」の研究課題のうちの反陽子原子分光実験の準備のため |
| 岩 田 末 廣 | 理 論 研 究 系 教 授 | 11.2.25 ～11.3.5 | アメリカ | サニベル会議招待講演研究成果発表の為 |
| 天 能 精 一 郎 | 理 論 研 究 系 助 手 | 11.2.26 ～11.3.7 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野グループ共同研究に係る研究成果発表 |
| 桑 原 大 介 | 分子物質開発研究センター 助 手 | 11.2.27 ～11.3.13 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における共同研究及び研究成果発表 |
| 井 口 佳 哉 | 電 子 構 造 研 究 系 助 手 | 11.3.15 ～11.3.24 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野におけるグループ共同研究実施 |
| 井 上 克 也 | 相 関 領 域 研 究 系 助 教 授 | 11.3.19 ～11.3.24 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における共同研究実施 |
| 藤 田 誠 | 錯 体 化 学 実 験 施 設 助 教 授 | 11.3.20 ～11.3.27 | アメリカ | 日米科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギーの転換」分野における共同研究実施 |
| 岡 本 祐 幸 | 理 論 研 究 系 助 教 授 | 11.3.26 ～11.4.3 | アメリカ | 「生物学、化学と物理学におけるモンテカルロ最適化法」ワークショップにて講演の為 |



| | | | | |
|----------|-----------------|-------|--------------------------------------|--------------------------------------|
| 10.10. 1 | 川 口 博 之 | 転 入 | 錯体化学実験施設錯体合成研究部門助手 | 名古屋大学大学院理学研究科助手 |
| 10.10. 1 | 鈴 井 光 一 | 転 入 | 技術課第三技術班装置開発技術係長 | 名古屋大学理学部・理学研究科・多元数理科学研究科技術専門職員 |
| 10.10. 1 | 小 林 和 宏 | 転 入 | 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・多元数理科学研究科技術官 |
| 10.10. 1 | 栗 原 一 嘉 | 採 用 | 分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部非常勤研究員 | 東京大学大学院理学系研究科リサーチ・アソシエイト(未来開拓事業) |
| 10.10. 1 | 西 川 武 志 | 採 用 | 理論研究系分子基礎理論第一研究部門リサーチ・アソシエイト(未来開拓事業) | 慶應義塾大学大学院理工学研究科後期博士課程院生 |
| 10.10. 1 | 堀 米 利 夫 | 転 出 | 名古屋大学理学部・理学研究科・多元数理科学研究科技術専門職員 | 技術課第三技術班長 |
| 10.10. 1 | 鳥 居 龍 晴 | 転 出 | 名古屋大学理学部・理学研究科・多元数理科学研究科技術官 | 技術課第三技術班装置開発技術係員 |
| 10.10. 1 | 保 坂 将 人 | 併 任 | 総合研究大学院大学数物科学研究科助手 | (極端紫外光実験施設助手) |
| 10.10. 1 | 柘 植 清 志 | 併 任 | 総合研究大学院大学数物科学研究科助手 | (錯体化学実験施設錯体物性研究部門助手) |
| 10.10. 5 | 王 利 | 採 用 | 電子構造研究系電子状態動力学研究部門非常勤研究員 | 電子構造研究系電子状態動力学研究部門特別協力研究員 |
| 10.10.16 | 辻 康 之 | 転 出 | 北海道大学触媒化学研究センター分子触媒化学研究部教授 | 錯体化学実験施設錯体合成研究部門助教授 |
| 10.10.29 | Maksimuk, M. Y. | 採 用 | 分子集團研究系物性化学研究部非常勤研究員 | ロシア科学アカデミー固体物理研究所リサーチ・ウォーカー |
| 10.11. 1 | 酒 井 誠 | 採 用 | 電子構造研究系電子状態動力学研究部門助手 | 早稲田大学理工学部化学科助手 |
| 10.11. 1 | 丸 山 豊 | 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 | 理論研究系分子基礎理論第二研究部門特別協力研究員 |
| 10.11. 1 | 木 下 豊 彦 | 転 出 | 東京大学物性研究所附属軌道放射物性研究施設助教授 | 極端紫外光実験施設助教授 |
| 10.11. 1 | 木 下 豊 彦 | 併 任 | 極端紫外光実験施設助教授 | (東京大学物性研究所附属軌道放射物性研究施設助教授) 11.3.31まで |
| 10.11.13 | Zaman, M. B. | 採 用 | 分子物質開発研究センターバイ電子開発研究部非常勤研究員 | バングラデッシュ国ダッカ大学応用化学部門助教授 |
| 10.12. 1 | 渡 邊 一 雄 | 配 置 換 | 分子制御レーザー開発研究センター分子位相制御レーザー開発研究部助手 | 技術課第一技術班電子構造研究系技術係員 |
| 10.12. 1 | 廣 津 昌 和 | 採 用 | 電子計算機センター非常勤研究員 | 電子計算機センター特別協力研究員 |
| 10.12. 1 | 田 中 桂 一 | 併 任 | 九州大学理学部助教授 | (相關領域研究系分子クラスター研究部門助教授) 11.3.31まで |
| 10.12.31 | 服 部 秀 男 | 辞 職 | (株)日東技術情報センター豊橋事業所所属員 | 技術課第二技術班極端紫外光科学研究系技術係員 |
| 10.12.31 | 春 山 雄 一 | 辞 職 | 姫路工業大学高度産業科学技術研究所助手 | 極端紫外光実験施設非常勤研究員 |
| 11. 1. 1 | 阪 元 洋 一 | 採 用 | 分子物質開発研究センター分子配列制御研究部助手 | 錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員 |

| | | | | |
|----------|---------|------|---------------------------------|-------------------------------------|
| 11. 1. 1 | 信 定 克 幸 | 転 出 | 北海道大学大学院理学研究科助手 | 理論研究系分子基礎理論第三研究部門助手 |
| 11. 2.28 | 栗 原 一 嘉 | 辞 職 | (財) 神奈川科学技術アカデミー光科学重点研究室常勤研究員 | 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非常勤研究員 |
| 11. 2.28 | 廣 津 昌 和 | 辞 職 | 群馬大学工学部助手 | 電子計算機センター非常勤研究員 |
| 11. 3. 1 | 栗 村 直 | 採 用 | 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助手 | 米国スタンフォード大学博士研究員(日本学术振興会特別研究員) |
| 11. 3. 1 | 船 橋 靖 博 | 採 用 | 分子物質開発研究センター融合物質開発研究部助手 | 名古屋大学大学院理学研究科博士後期課程院生 |
| 11. 3. 1 | 伊 藤 肇 | 転 入 | 分子物質開発研究センター機能探索研究部助手 | 筑波大学化学系助手 |
| 11. 3. 5 | 齋 藤 有 紀 | 辞 職 | 科学技術庁金属材料技術研究所研究員 | 分子構造研究系分子動力学研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 伊 藤 光 男 | 任期満了 | 岡崎国立共同研究機構長 | 分子科学研究所長 |
| 11. 3.31 | 齋 藤 修 二 | 停 年 | | 分子構造研究系分子構造学第一研究部門教授 |
| 11. 3.31 | 宮 島 清 一 | 辞 職 | 宮島醤油(株) | 分子集団研究系分子集団動力学研究部門助教授 |
| 11. 3.31 | 尾 閔 博 之 | 辞 職 | 宇宙開発事業団招聘研究員 | 分子構造研究系分子構造学第二研究部門助手 |
| 11. 3.31 | 永 園 充 | 辞 職 | スウェーデン国ルント大学MAX-Lab博士研究員 | 技術課第二技術班極端紫外光科学研究系技術係員 |
| 11. 3.31 | 木 下 豊 彦 | 併任終了 | (東京大学物性研究所附属軌道放射物性研究施設助教授) | 極端紫外光実験施設助教授 |
| 11. 3.31 | 陳 飛 武 | 退 職 | | 理論研究系分子基礎理論第一研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 丸 山 豊 | 退 職 | | 理論研究系分子基礎理論第二研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 内 田 豪 | 退 職 | 日本学术振興会特別研究員 | 分子構造研究系分子動力学研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 安 達 隆 文 | 退 職 | 分子集団研究系分子集団動力学研究部門特別協力研究員 | 分子集団研究系分子集団動力学研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 熊 谷 等 | 退 職 | 日本学术振興会特別研究員 | 相関領域研究系相関分子科学第一研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 速 水 真 也 | 退 職 | (財) 神奈川科学技術アカデミー専任研究員 | 相関領域研究系相関分子科学第一研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 宮 前 孝 行 | 退 職 | 通商産業省工業技術院物質工学工業技術研究所研究員 | 極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 杉 本 秀 樹 | 退 職 | 大阪市立大学大学院理学研究科助手 | 錯体化学実験施設錯体物性研究部門非常勤研究員 |
| 11. 3.31 | 小 野 恭 子 | 退 職 | | 分子制御レーザー開発研究センター事務補佐員 |
| 11. 3.31 | 高田橋 昇 | 退 職 | | 技術課第四技術班分子制御レーザー開発技術係研究支援推進員 |

| | | | | |
|----------|---------|------|-------------------------------------|--------------------------|
| 11. 3.31 | 池 田 研 介 | 併任終了 | (立命館大学理工学部教授) | 理論研究系分子基礎理論第三研究部門教授 |
| 11. 3.31 | 季 村 峰 生 | 併任終了 | (山口大学医療技術短期大学部助教授) | 理論研究系分子基礎理論第三研究部門助教授 |
| 11. 3.31 | 谷 本 光 敏 | 併任終了 | (静岡大学理学部教授) | 分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授 |
| 11. 3.31 | 高 柳 正 夫 | 併任終了 | (東京農工大学大学院生物システム応用科学研究所助教授) | 電子構造研究系電子構造研究部門助教授 |
| 11. 3.31 | 野 上 隆 | 併任終了 | (電気通信大学電気通信学部教授) | 分子集団研究系分子集団研究部門教授 |
| 11. 3.31 | 武 田 定 | 併任終了 | (群馬大学工学部助教授) | 分子集団研究系分子集団研究部門助教授 |
| 11. 3.31 | 田 中 均 | 併任終了 | (理化学研究所) | 極端紫外光実験施設助教授 |
| 11. 3.31 | 足 立 吟 也 | 併任終了 | (大阪大学工学部教授) | 錯体化学実験施設配位結合研究部門教授 |
| 11. 3.31 | 飛 田 博 実 | 併任終了 | (東北大学大学院理学研究科助教授) | 錯体化学実験施設配位結合研究部門助教授 |
| 11. 3.31 | 北 川 穎 三 | 併任終了 | (分子構造研究系分子動力学研究部門教授) | 総合研究大学院大学数物科学研究所教授 |
| 11. 4. 1 | 茅 幸 二 | 採 用 | 分子科学研究所長 | 慶應義塾大学理工学部教授 |
| 11. 4. 1 | 黒 澤 宏 転 | 入 | 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門教授 | 宮崎大学工学部教授 流動研究部門 |
| 11. 4. 1 | 福 井 一 俊 | 転 入 | 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授 | 福井大学工学部助教授 流動研究部門 |
| 11. 4. 1 | 長 岡 伸 一 | 転 入 | 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授 | 愛媛大学理学部助教授 流動研究部門 |
| 11. 4. 1 | 海老原 昌 弘 | 転 入 | 錯体化学実験施設錯体合成研究部門助教授 | 岐阜大学工学部助教授 流動研究部門 |
| 11. 4. 1 | 山 本 薫 | 採 用 | 分子集団研究系物性化学研究部門助手 | 東京大学大学院理学系研究科博士課程院生 |
| 11. 4. 1 | 高 嶋 圭 史 | 転 入 | 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助手 | 名古屋大学大学院工学研究科助手 流動研究部門 |
| 11. 4. 1 | 三 嶋 謙 二 | 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 | 東京大学大学院工学系研究科博士後期課程院生 |
| 11. 4. 1 | 佐 伯 盛 久 | 採 用 | 電子構造研究系電子状態動力学研究部門非常勤研究員 | 東京大学大学院総合文化研究科博士後期課程院生 |
| 11. 4. 1 | 塙 田 浩 | 採 用 | 分子集団研究系物性化学研究部門非常勤研究員 | 京都大学大学院人間・環境学研究科博士後期課程院生 |
| 11. 4. 1 | 小 野 正 樹 | 採 用 | 極端紫外光科学研究系反応動力学研究部門非常勤研究員 | 学習院大学理学部助手 |
| 11. 4. 1 | 竹 添 法 隆 | 採 用 | 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門非常勤研究員 | 宮崎大学大学院工学研究科博士後期課程院生 |
| 11. 4. 1 | 庄 司 一 郎 | 採 用 | 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非常勤研究員 | 東京大学工学部助手 |

| | | | | |
|----------|---------|-------|--|-------------------------------------|
| 11. 4. 1 | 水 谷 守 | 採 用 | 分子物質開発研究センター融合 物質開発研究部非常勤研究員 | 名古屋工業大学大学院工学研究 科博士後期課程院生 |
| 11. 4. 1 | 伊 藤 正 勝 | 採 用 | 理論研究系分子基礎理論第一研究部門 リサーチ・アソシエイト(未来開拓) | 電子計算機センター非常勤研究 員 |
| 11. 4. 1 | 水 野 操 | 採 用 | 技術課第二技術班極端紫外光科 学研究系技術係員 | 早稲田大学大学院理工学研究科 博士後期課程院生 |
| 11. 4. 1 | 佐 藤 敦 子 | 採 用 | 技術課第二技術班相関領域研究 系技術係研究支援推進員 | |
| 11. 4. 1 | 禿 子 瞳 | 採 用 | 技術課第三技術班電子計算機技 術係研究支援推進員 | |
| 11. 4. 1 | 加 納 聖 子 | 採 用 | 技術課第三技術班電子計算機技 術係研究支援推進員 | |
| 11. 4. 1 | 山 本 尚 代 | 所 属 換 | 技術課事務補佐員(外国人対応 担当) | 分子構造研究系事務補佐員(外 国人対応担当) |
| 11. 4. 1 | 杉 山 加余子 | 所 属 換 | 技術課事務補佐員(受付担当) | 分子集団研究系事務補佐員(受 付担当) |
| 11. 4. 1 | 上 野 信 雄 | 転 出 | 千葉大学工学部教授 | 極端紫外光科学研究系界面分子 科学研究部門教授 |
| 11. 4. 1 | 塩 谷 光 彦 | 転 出 | 東京大学大学院理学系研究科化 学専攻教授 | 錯体化学実験施設錯体触媒研究 部門教授 |
| 11. 4. 1 | 櫻 井 誠 | 転 出 | 神戸大学理学部物理学科物性物 理学講座助教授 | 極端紫外光科学研究系界面分子 科学研究部門助教授 |
| 11. 4. 1 | 藤 田 誠 | 転 出 | 名古屋大学大学院工学研究科物 質化学専攻教授 | 錯体化学実験施設錯体物性研究 部門助教授 |
| 11. 4. 1 | 渡 邊 一 也 | 転 出 | 総合研究大学院大学先導科学研 究科助手 | 電子構造研究系基礎電子化学研 究部門助手 |
| 11. 4. 1 | 松 本 益 明 | 転 出 | 東京大学生産技術研究所助手 | 極端紫外光科学研究系界面分子 科学研究部門助手 |
| 11. 4. 1 | 野々垣 陽 一 | 転 出 | 名古屋大学大学院工学研究科材 料プロセス工学専攻助手 | 極端紫外光科学研究系界面分子 科学研究部門助手 |
| 11. 4. 1 | 楠 川 隆 博 | 転 出 | 名古屋大学大学院工学研究科物 質化学専攻助手 | 錯体化学実験施設錯体物性研究 部門助手 |
| 11. 4. 1 | 西 信 之 | 併 任 | 分子構造研究系研究主幹 | 13. 3.31まで |
| 11. 4. 1 | 小 林 速 男 | 併 任 | 分子集団研究系研究主幹 | 13. 3.31まで |
| 11. 4. 1 | 藤 井 正 明 | 併 任 | 分子制御レーザー開発研究セン ター長 | 13. 3.31まで |
| 11. 4. 1 | 渡 邊 芳 人 | 併 任 | 分子物質開発研究センター長 | 13. 3.31まで |
| 11. 4. 1 | 薬 師 久 弥 | 併 任 | 装置開発室長 | 13. 3.31まで |
| 11. 4. 1 | 田 中 晃 二 | 併 任 | 京都大学大学院理学研究科教授 (大学院教育連携協力) | (錯体化学実験施設錯体物性研 究部門教授) 12. 3.31まで |
| 11. 4. 1 | 田 中 秀 樹 | 併 任 | 理論研究系分子基礎理論第三研 究部門教授 | (岡山大学理学部教授) |

| | | | | |
|-----------|-------------|-----|--------------------------|--------------------------------------|
| 11. 4. 1 | 赤 阪 健 併 | 任 | 分子構造研究系分子構造学第二研究部門教授 | (新潟大学大学院自然科学研究科教授) |
| 11. 4. 1 | 徳 本 圓 併 | 任 | 分子集団研究系分子集団研究部門教授 | (通商産業省工業技術院電子技術総合研究所主任研究官) |
| 11. 4. 1 | 相 田 順 三 併 | 任 | 錯体化学実験施設配位結合研究部門教授 | (東京大学大学院工学系研究科教授) |
| 11. 4. 1 | 茅 幸 二 併 | 任 | 総合研究大学院大学数物科学研究科教授 | (分子科学研究所長) |
| 11. 4. 1 | 北 川 稔 三 併 | 任 | 総合研究大学院大学先導科学研究科教授 | (分子構造研究系分子動力学研究部門教授) |
| 11. 4. 1 | 谷 村 吉 隆 併 | 任 | 京都大学大学院理学研究科助教授(連携大学院協力) | (理論研究系分子基礎理論第二研究部門助教授) 12. 3. 31 まで |
| 11. 4. 1 | 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研究部門助教授) 11. 9. 30 まで |
| 11. 4. 1 | 鎌 田 雅 夫 併 | 任 | 京都大学大学院理学研究科助教授(連携大学院協力) | (極端紫外光実験施設助教授) 12. 3. 31 まで |
| 11. 4. 1 | 橋 本 健 朗 併 | 任 | 理論研究系分子基礎理論第三研究部門助教授 | (東京都立大学大学院理学研究科助教授) |
| 11. 4. 1 | 玉 井 尚 登 併 | 任 | 電子構造研究系電子構造研究部門助教授 | (関西学院大学理学部助教授) |
| 11. 4. 1 | 森 健 彦 併 | 任 | 分子集団研究系分子集団研究部門助教授 | (東京工業大学工学部助教授) |
| 11. 4. 1 | 木 村 真 一 併 | 任 | 極端紫外光実験施設助教授 | (神戸大学大学院自然科学研究科助教授) |
| 11. 4. 1 | 濱 地 格 併 | 任 | 錯体化学実験施設配位結合研究部門助教授 | (九州大学大学院工学研究科助教授) |
| 11. 4. 1 | 猿 倉 信 彦 併 | 任 | 総合研究大学院大学先導科学研究科助教授 | (分子制御レーザー開発研究センター放射光同期レーザー開発研究部助教授) |
| 11. 4. 1 | 佐 藤 信 一 郎 併 | 任 | 総合研究大学院大学先導科学研究科助教授 | (分子制御レーザー開発研究センター分子位相制御レーザー開発研究部助教授) |
| 11. 4. 1 | 鈴 木 敏 泰 併 | 任 | 総合研究大学院大学数物科学研究科助教授 | (分子物質開発研究センター分子配列制御研究部助教授) |
| 11. 4. 1 | 齋 藤 修 二 併 | 任終了 | | 分子構造研究系研究主幹 |
| 11. 4. 1 | 薬 師 久 弥 併 | 任終了 | | 分子集団研究系研究主幹 |
| 11. 4. 1 | 齋 藤 修 二 併 | 任終了 | | 分子制御レーザー開発研究センター長 |
| 11. 4. 1 | 小 林 速 男 併 | 任終了 | | 分子物質開発研究センター長 |
| 11. 4. 1 | 北 川 稔 三 併 | 任終了 | | 装置開発室長 |
| 11. 4. 12 | 鬼 武 尚 子 採 用 | | 技術課極端紫外光実験技術係事務補佐員 | |

新緑が青空に美しく映える季節になりました。分子研レターズ第40号をお届け致します。お忙しい最中ご執筆をお引き受けいただいた皆様には編集委員一同心より御礼申し上げます。分子研に様々な新風を吹き込み、6年間にわたって分子研の発展にご尽力いただいた伊藤光男所長もこの3月で任期を終えられました。本号は伊藤所長時代の分子研の活動をお伝えする最後の号となります。4月から新たに慶應義塾大学より、茅幸二所長をお迎えする事になりました。新たな船出となります、今後ともこの分子研レターズが日本の分子科学研究者との交流のお役に立てるよう内容を充実させて行かなければならぬと思います。最後に企画調査係の桑原博明さんと分子研広報担当の佐藤敦子さんには原稿の整理校正等の実務を担当してもらいました事をお伝えします。

分子研レターズ編集委員

塩谷光彦（委員長）

薬師久彌（本号編集担当）

田原太平

藤井正明

森田紀夫

米満賢治

分子研レターズ No. 40

発行年月 平成 11 年 7 月

印刷年月 平成 11 年 7 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

この印刷物は再生紙を使用しています。

岡崎国立共同研究機構
分子科学研究所

444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38番地
<http://www.ims.ac.jp/>