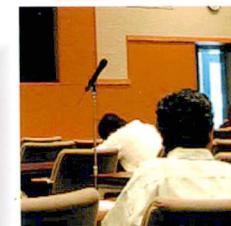
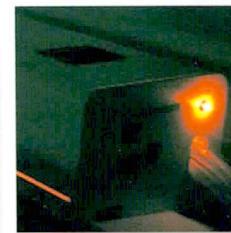
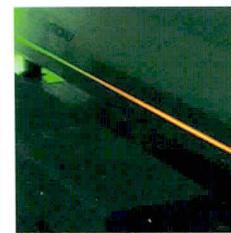


# 分子研 レターズ

All

Issue of January 2000



## 巻頭言

岡崎に着任して…………茅 幸二

## 研究紹介

分子導体と反射分光……薬師久彌  
二次元分光による凝縮相分子の振動解析  
…………谷村吉隆

## レターズ

近況報告…………木村克美

### 表紙写真説明

右上；ピコ秒・フェムト秒ダブルビーム連続波長可変光源システム

(本文 41 ページからに関連記事)

右下；岡崎コンファレンスセンター大会議室（第 20 回分子科学フォーラム）

左上；分子研正面玄関をのぞむ

岡崎に着任して

慶應義塾大学理工学部からここ岡崎に転任して、あっという間に半年が経過した。この間に、独立行政法人化問題、E地区でのプロジェクト研究計画、人事問題など、今までに経験したことのない、しかも分子研の方向に影響を与える問題に直面し、現在もそれらの問題の渦中にいる感の今日この頃である。

筆者は、特殊法人である理化学研究所で研究者としてのスタートをきり、さらには、慶應時代には理研の片隅に研究施設をいただき、研究活動を展開した経緯がある。理研では、特殊法人という利点を生かして、研究費の使い方などが、国立機関に比べ柔軟性があるなど、純粹な国立機関と違った自由度を感じ、よい意味での法人の在り方を体験することができた。今回の、独法化を規定する通則法は、学術研究の理念を取り入れる余地が少なく、特例措置によってのみ「文化としての学術研究」を認知しようとする点で、多くの問題を抱えている。他方、この機会に、学術研究発展の道を模索することは、21世紀を目前に控えた我々のなすべき責務であると受け止めることもできる。

分子科学研究所が1975年に発足して25年目を迎えていた現在、分子科学を取り巻く環境は、分子科学の急速な発展とともに大きく変化してきた。環境科学、生命科学あるいは情報科学などが、「物質」をキーワードとする分子科学の周辺分野として発展し、それらの分野にミクロな理解をあたえる科学として分子科学が大きく入り込んでいる。原子・分子の知識が、普遍化した結果であり、とりもなおさず分子科学の進歩の結果であると言える。このような分子科学の広がりは、他方分子科学自身の今後に重要な問題を投げかけている。つまり、あまりにも多くの道があるために、分子科学の先導役としての分子研がどの道を選択するかに任意性がありすぎるよう見える。分子研は、その一つとして生命科学と相互作用する方向を選択した。究極の複雑系物質として生命体は、21世紀に学ばなくてはならない重要なターゲットである。

しかし、分子研のもっとも重要な課題は、「道を選ぶ」のではなく「道を作る」ことにある。しかもその「道」は今まで分子科学が通ってきたものの単なる延長ではなく、惰性を捨てて、よじ登っていかなくてはならない方向にある。先導的学術研究の重要な課題は、当面する問題を研究し、その解を求めるだけではなく、次世代に涉って解くべき問題を発見提唱する点である。「次世代への道」を提唱し、共同利用機関として、分子科学が今まで相互作用することのなかつた分野を含めた国内外の研究者と連携しつつ、新たな挑戦をすることが、分子科学研究所に与えられた使命であるといえよう。

茅

幸

二

# 分子研レターズ 41 目次

## 巻頭言

岡崎に着任して

茅 幸二 1

## 研究紹介

- |                    |       |   |
|--------------------|-------|---|
| 分子導体と反射分光          | 薬師 久彌 | 4 |
| 二次元分光による凝縮相分子の振動解析 | 谷村 吉隆 | 8 |

## 研究室紹介

- |                   |       |    |
|-------------------|-------|----|
| 極端紫外光実験施設（繁政グループ） | 繁政 英治 | 12 |
|-------------------|-------|----|

## 流動研究部門紹介

- |                               |      |    |
|-------------------------------|------|----|
| 光の時代に生きる                      | 黒澤 宏 | 15 |
| 極端紫外光科学研究所 界面分子科学研究部門（長岡グループ） |      |    |
| 長岡 伸一                         | 18   |    |

## レターズ

- |      |       |    |
|------|-------|----|
| 近況報告 | 木村 克美 | 21 |
|------|-------|----|

## ニュース

- |                   |       |    |
|-------------------|-------|----|
| 第9回分子科学研究所オープンハウス | 岡本 祐幸 | 22 |
|-------------------|-------|----|

## 分子研を去るにあたり

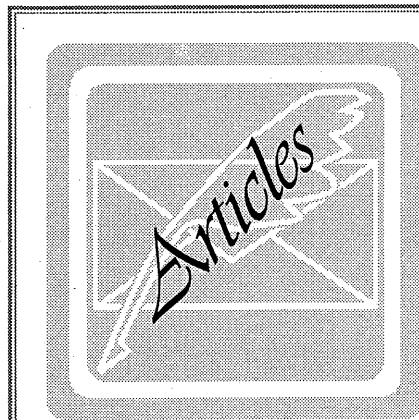
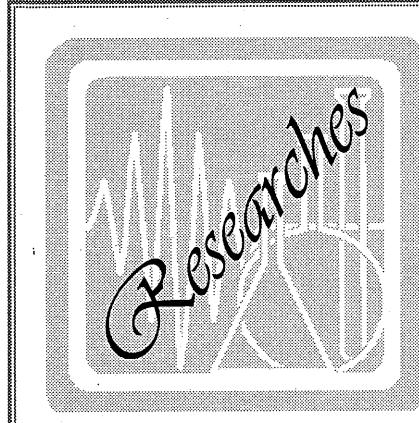
- |             |       |    |
|-------------|-------|----|
| 岡崎を去るにあたって  | 塩谷 光彦 | 23 |
| 新しい食品を作るために | 宮島 清一 | 24 |

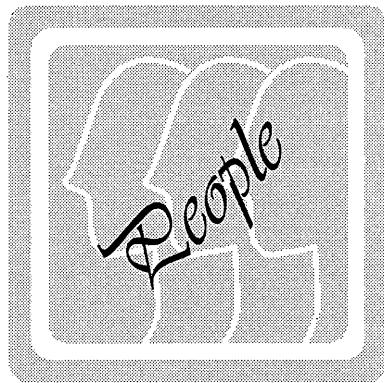
## 流動研究部門を去るにあたり

- |            |       |    |
|------------|-------|----|
| 流動四方山話     | 上野 信雄 | 25 |
| 岡崎を去るにあたって | 櫻井 誠  | 26 |

## 外国人研究員の印象記

- MY WORK AND LIVING IN OKAZAKI  
PAVLOV, Lubomir Iordanov 27





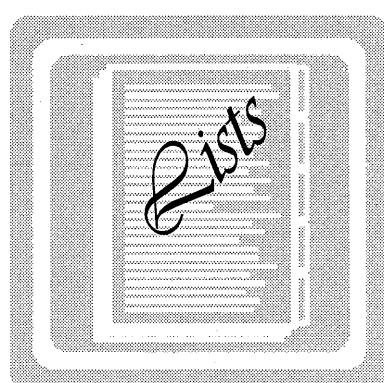
#### 受賞者紹介

平等拓範助教授にレーザー研究論文賞	29
西本史雄氏に日本化学会技術有功賞	29
客員外国人研究員の紹介	
MÜLLER-DETHLEFS, Klaus教授	32
外国人研究者の自己紹介	33
新任者自己紹介	38
総合研究大学院大学	
平成11年度9月修了学生及び学位論文名	40
平成11年度(10月入学)新入生紹介	40



#### 新装置紹介

ピコ秒・フェムト秒ダブルビーム連続波長可変光源システム 中林 孝和・西 信之	41
研究会報告	44



分子研コロキウム・分子科学フォーラム	51
共同研究実施一覧	52
海外渡航一覧	58
人事異動一覧	62

# 分子導体と反射分光

薬 師 久 弥

## はじめに

分子導体の研究は1950年の赤松・井口のビオラントロンに関する論文より始まるが、その後しばらくの模索の時代を経た後、1973年のヒーガー・ガリトーのTTF-TCNQを境に一大飛躍を遂げる。さらに1980年のジェローム・ペチガードらのTMTSF塩における有機超伝導の発見により1980年代分子導体の研究分野は黄金期を迎える。その後1991年のベル研ヘーバードらによる $K_3C_{60}$ の超伝導発見が続く。フラー・レン系と合成分子系導体は異なる研究グループによって研究されているが、私の研究は後者の系流になる。分子導体の分野は新しい物質が新しい概念を生み出すという形で発展してきた。この分野では約10年ごとにブレークスルーとなる物質が発見されているので、2000年付近に新しい物質が現れることを期待しながら研究を続けている。主な方法としては顕微反射分光法とラマン分光法である。顕微反射法は $600\text{ cm}^{-1}$ から $33000\text{ cm}^{-1}$ の全領域で微小結晶の反射率を10 Kまでの温度範囲で測定している。この領域では分子内電子遷移、分子間電荷移動遷移、分子内振動、伝導電子の電子遷移の一部が総合的に観測できる。また分子導体の結晶は黒色で熱に弱いために、ラマン分光法ではレーザー強度を極力絞り、散乱光を効率良く集めるための光学系が必要とされる。現有的顕微ラマン分光装置は5  $\mu\text{m}$ 程度の微結晶の測定を5 Kまでの温度範囲で測定できる。必要に応じて電気抵抗、熱起電力、比熱、磁気トルクなどの巨視的な物理量を測定したり、物質センターの単結晶X線回折装置、ESR、SQUID磁束計などを用いて物質評価を行なっている。

## フタロシアニン導体の研究

フタロシアニンの電荷移動塩は分子研に赴任して以来最も長い間つきあっている物質である。幾人の後継者に引き継ぎながら、また新しい方法を導入しながら長い間かけて少しづついろいろなことが分かってきた物質なので、古い時代のことから話さなければならない。この物質は $\pi$ バンドとdバンドの共存する2鎖2バンド系という分子導体ではユニークな電子構造をもっている。ニッケルフタロシアニンの電荷移動塩に1万気圧以上の高圧をかけると可視領域の電子遷移が消えて行く。この電子遷移の帰属を行なうために部分酸化率（あるいはバンド充填率）の異なる4種のフタロシアニン電荷移動塩の偏光反射スペクトルを比較し、この電子遷移がNHOMOの作る価電子帯からHOMOの作る伝導帯への電子遷移であることを明らかにした。その後、この帰属を元にして総研大生の比江島君が可視領域、近赤外領域、赤外領域のスペクトルの圧力依存性を総合的に行ない、高圧下ではニッケルの3d価電子帯から配位子の $\pi$ 伝導帯へ電子が連続的に流れ込むことを証明した。 $\pi$ 伝導帯のフェルミ準位直下にある状態密度の大きな3d価電子帯が圧力によって押し上げられるからである。一気に電荷流入が起こらず徐々に移動していくのは3d価電子帯のオンサイトクーロンエネルギーを考慮すれば理解することができる。さらに近赤外領域の電子スペクトルの解析から、この電荷流入にともない1万気圧付近で金属から絶縁体へ相転移するという結論を得た。昨年COE外国人研究員のSimonyan博士が電気抵抗の圧力依存性についての注意深い実験を行ない、絶縁

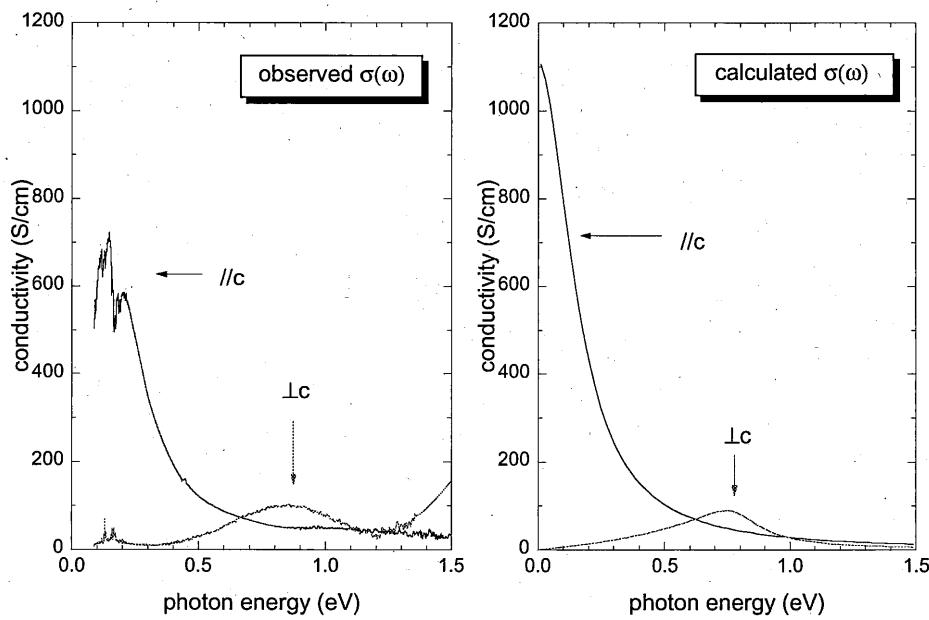


相が圧力と共に高温側に広がり、約1万気圧では室温付近まで伸びていることを明らかにした。この実験によって光吸収スペクトルから得た結論を裏付けることができた。さらに総研大の米原さんが高圧下で熱起電力の測定を行ない、この金属・絶縁体転移がアンダーソン局在であろうとの提案を行なっている。これまでの解釈が正しければ、高圧下で磁化率のキュリー成分が増大するはずであり、まだ今後の課題として残っている。これは他の分子導体には見られない新しい機構の金属・絶縁体転移である。

コバルトフタロシアニンの電荷移動塩は従来研究されていたヨウ素塩と異なって、局在d電子と遍歴 $\pi$ 電子の共存する電子系であることが分かり、またこの局在電子と $\pi$ 電子との相互作用によって金属性が失われている可能性が出てきた。この問題には以前から興味をもっていたが、昨年から混晶の研究を開始した。Simonyan博士を中心となってこの問題に取り組み、コバルトフタロシアニンを非磁性のニッケルフタロシアニンで希釈した電荷移動塩絶縁相( $T = 3.5$  K)のESR信号に超微細構造を見出した。その結果、コバルト上の不対電子は $3d_{z^2}$ 軌道にあり、配位子の $\pi$ 軌道と混成していない事が分かった。さらに金属相( $T > 50$  K)ではコバルト上のスピント遍歴性 $\pi$ 電子が交換相互作用を起こしていることが明らかになった。混晶の仕事は総研大生の米原さんが一部引き継ぎ、更に現在総研大生の丁さんが引き継いで研究を進めている。現在広い範囲で混晶を作り反射率、ラマン散乱、磁化率、熱電能、電気抵抗、比熱など系統的な実験を行なっている。

#### $\pi$ 電子系分子導体と反射分光法

従来1:1の組成をもつ電荷移動塩は金属にはなりえないと考えられていた。このような常識に反して大坪徹夫教授(広大工)のグループはDMTSA-BF<sub>4</sub>が金属的であるとの発表を行なった。大坪研から提供してもらったDMTSAを用いて実験を行なった結果、この物質は150 Kでパイエルス転移的な金属・絶縁体転移を示すこと、2000気圧以上でこの相転移が抑圧され0.23 Kまで金属性を保つことなどを明らかにした。金属性の起源を解明するために反射率の測定を行ったが、バンド構造が一次元的であること、また複数のバンドがフェルミ面を構成している可能性は低いことなど、いずれも金属性にとって不利なバンド構造をもつことが分かった。しかし、見かけのオンサイトクーロンエネルギーが極めて小さいことが分かり、この事が金属性に貢献していると考えられるが、なぜこの物質で小さいのかについてはまだ残された課題である。この研究の過程で新しい型の電荷移動吸収帯を見出し、その起源を明らかにすることができた。この物質はDMTSAがジグザグに積層した構造をとっている。このために分子中心を結ぶベクトルは積層方向とずれの方向の二成分をもつ。このために積層方向とずれの方向に2種類の電荷移動吸収帯が可能となる。積層した分子は一次元の無限鎖を形成しているので、一次元バンドでの光学吸収の定式化を行なった。その結果、積層方向の電子遷移は伝動電子のドルーデ吸収に、ずれ方向の電子遷移はジグザク構造によって折り返された伝導帯における $\Gamma$ 点( $k = 0$ )付近の電子遷移に対応することが分かった。図1が実測と計算結果

図1 DMTSA-BF<sub>4</sub>の光学伝導度スペクトルの偏光依存性

左が実測の光学伝導度スペクトルで右が一次元強結合モデルで計算したバンド内遷移とバンド間遷移。実測のドルーデ型吸収は構造揺らぎのために低波数側が落ちているが、計算ではこの効果を取り入れていない。

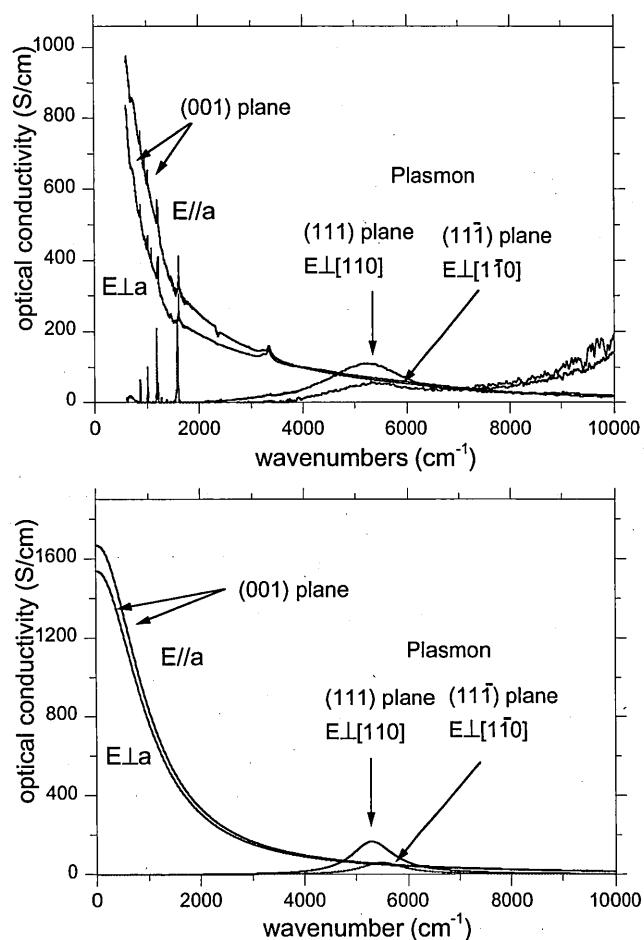
の比較であり、定量的にもよく実測のスペクトルを説明している。150 K以下の低温では折り返し点 ( $k = \pi/c$ ) でバンドの分裂が起こるが、これに伴うスペクトルの変化もこの模型は定量的に再現する。以上の結果は総研大生の欧阳建勇君、田島裕之助教授（東大物性研）、試料を提供していただいた大坪徹夫教授、瀧宮和男博士（広大工）との共同研究である。

最近、ポーランドのウジイ工科大学より Ulanski 教授を外国人客員教授として招聘した。同教授は6ヶ月間分子研に滞在されたのであるが、その間猛烈な勢いで実験をされた。以下、同教授さらに試料を提供していただいた矢持秀起助教授、齋藤軍治教授（京大院理）との共同研究の結果を紹介したい。Ulanski 教授は一連の電荷移動塩  $\text{BO}_2\text{X}\cdot(\text{H}_2\text{O})_n$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) の反射率を調べていた。これらの物質は全て2次元的な伝導面を持つ金属なので、一番広い結晶面で反射率を測定するとドルーデ型の分散が観

測される。ところが板状結晶の側面で反射率を測定すると、ドルーデ型の分散は消え、その代わりに近赤外領域（約  $5000 \text{ cm}^{-1}$ ）に帰属不明な電子遷移が現れる。この電子遷移は分子内遷移でないことは明らかであったので、どう考えるのかに少し時間を要したが、プラズモンの吸収に対応することが分かった。プラズモンは縦型の電子励起であるから通常正反射法では観測できない。しかし、この物質の異方性を考慮に入れると、伝導面に対して傾いた面では光に応答可能である。類似の現象として格子振動や励起子の横型励起が縦型励起と混成する現象がある。この場合光吸收のピーク位置は光の波数ベクトルと遷移双極子ベクトルの角度に依存する事が知られている。伝導電子に対する縦型励起はプラズモンであり、これが見えていると考えるとこの電子遷移を理解できる。定量的にこの関係を捉えるには、物質の誘電率の異方性をあらわすフレネル積円体の主



図2  $\text{BO}_2\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})_3$  の光学伝導度スペクトルの偏光依存性  
上が実測のスペクトルであり、下がドルーデ模型を用いて計算した光学伝導度。



軸と主値を決定し、フレネル方程式を解いてやればよい。今回は二軸性の物質であるため、すでに知られている一軸性結晶における励起子の解析より複雑になるが、原理は同じである。図2に実測のスペクトルと上の手続きを経て計算したスペクトルの比較して示す。定量的によく合っており、プラズモンの励起という解釈が正しいことを示している。正反射法によるプラズモンの観測例はおそらくこの実験が初めてのものであろうと考えている。

このほかにも研究グループ内外の共同研究者の協力を得てここでは紹介できなかった物質について分光法を用いた電子物性の研究を行なっている。この場を借りてこれら共同研究者に感謝の意を表したい。

## 二次元分光による凝縮相分子の振動解析

谷 村 吉 隆

化学の本質は、化学反応であるといって、過言ではないだろう。重要な化学反応の多くは、溶液内や蛋白質といった、凝縮相中で生ずる。これは、凝縮相を構成する分子が、化学反応をおこす分子に、その最適な環境を提供しているという事であろう。この事実は、化学反応を理解するためには、単に反応分子系だけを研究するのでは片手落ちであり、凝縮相まで含めた多体系を、真正面から取り扱う必要性を示唆している。我々のグループは、統計力学や場の理論を基礎として、溶媒等、凝縮相分子の性質を調べ、それが化学反応や電子移動反応等の動力学性質に、どのように影響を及ぼすかを、モデル化、定式化、場合によっては数値計算等も行い研究している。我々のグループの強みは、解析的な理論を展開する能力にあると思っているのだが、化学を物理するという立場を基本にとらえており、実験家の解析の役に立ち、指針を与えるような理論を構築することを目標としている。そのため、研究の少なからぬ部分を、実験について勉強する事にも費やしている。様々な研究を行っているが、ここでは我々がその理論的可能性を提唱し、近年実験の進展が目覚しい、2次元分光について紹介しよう。我々のグループは、奥村剛（助手）、鈴木陽子（技官）、宮崎州正（IMS フェロー）、日野理（総研大）のメンバーと私からなっている。このうち2次元分光は、奥村剛、鈴木陽子と私が研究を行っている。

2次元分光を説明する前に、1次元分光の話をしあおこう。わかり易い例として、溶媒中の2原子分子の非共鳴ラマン分光を例として示そう。2原子分子は、図1のように、モース・ポテンシャルによく

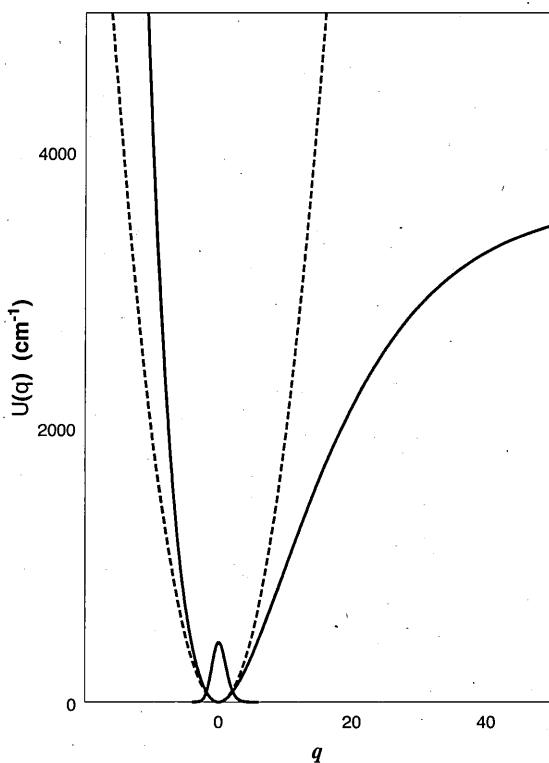
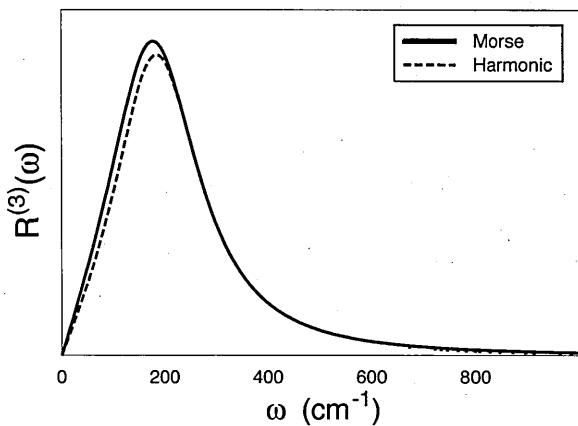


図1 モース・ポテンシャルと調和振動子ポテンシャル。基底状態での曲率を一致させた。

近似される事が知られている。分子が軽い原子からなる場合、その基準振動数は高く、常温では、殆ど基底状態に局在する。この場合、モースポテンシャルは、調和振動子でよく近似される事が知られている。その振動数を  $\Omega$  としよう。非共鳴ラマンは、もともと分極のない分子でも、レーザーを加える事で分極がおこり、それがさらにレーザーが相互作用する過程である。その相互作用は分極率を  $\alpha(Q)$ 、レーザーの電場を  $E(t)$  とすると、 $H_E = (\alpha(Q)E(t)) \times E(t)$  と

図2 モース・ポテンシャル（実線）と調和振動子ポテンシャル（点線）に対する1次元ラマン信号のフーリエ成分。緩和が比較的大きい場合を選んだ。



表される。溶質分子とレーザー相互作用をまとめると、ハミルトニアンは

$$H_{sys} = \frac{P^2}{2M} + \frac{1}{2} M\Omega^2 Q^2 + E^2(t)\alpha(Q) \quad (1)$$

と書ける。上記のハミルトニアンは、外力駆動された調和振動子系のものと等価である。レーザーパルスとして、フェムト秒のパルスを考えるなら、それは分子の基準振動数Ωに比較して非常に短いと考えられるから、 $E^2(t)$ はδ関数で近似される。この場合のハミルトニアンは、激力で駆動された調和振動子にはかならない。物理的観測量は、誘起された分極の期待値であり、その期待値を始めの励起パルスの相互作用で展開する事により、具体的な表式を得る事が出来る。帯磁率等、物理的観測量の多くが相関関数で表されるが、この場合も例外ではなく、分極P及び、それより計算される応答関数Rは

$$\begin{aligned} P(t) &= i \int_0^t dt' E_T(t') E^2(t') \langle [\alpha(Q(t)), \alpha(Q(t'))] \rangle \\ &\longrightarrow R^{(3)}(t) \approx i \alpha_1^2 \langle [Q(t), Q(0)] \rangle \end{aligned} \quad (2)$$

と表される。ここで、 $\alpha(Q(t))$ は、レーザー相互作用を抜いたハミルトニアンで駆動される、分極のハイゼンベルク演算子である。(2)式を導くにあたり、レーザーパルスが非常に短くδ関数で近似されるという事と、 $\alpha(Q) = \alpha_0 + \alpha_1 Q + \alpha_2 Q^2 \dots$ を用いた。ハイゼンベルク演算子内ハミルトニアンに熱浴を加え

れば、溶媒効果についても定性的だが考慮可能である。溶質系のポテンシャルが調和振動子であるから、上記の相関関数は、量子プラウン調和振動子の位置の相関関数にほかならない。この問題は、散逸系の量子力学として、よく知られたものであり、その結果は解析的に計算され

$$C''(t) \equiv \langle [Q(t), Q(0)] \rangle = \int d\omega J(\omega) \sin(\omega t) \quad (3)$$

となる。ここで $J(\omega)$ は、振動モードの分布である。図2にCS<sub>2</sub>に対するラマン信号のフーリエ成分を、(a) モース・ポテンシャル系と(b) 調和振動子系の2つの場合について示した。

溶媒分子の振動解析は、実験的に $C''(t)$ を求め、そのフーリエ変換を $J(\omega)$ と同一視する事により行われる。これは、溶媒の振動分布を調和振動子の分布に射影している事に相当する。分子動力学的計算結果を、調和振動モードに射影して、 $J(\omega)$ を評価するという事もよく行われる。このようにして求めた $J(\omega)$ は、化学反応率や、励起状態等ダイナミックス等、より複雑な物理過程を計算する基礎として使われる。この議論は、溶媒の振動モードを調和振動子的と仮定する点が鍵なのであるが、実際の溶媒では、さまざまな短距離・長距離力の影響で、非調和振動子性や、分布の不均一性等、ここで考慮していない様々な効果があり、それらが重要な場合も多い。

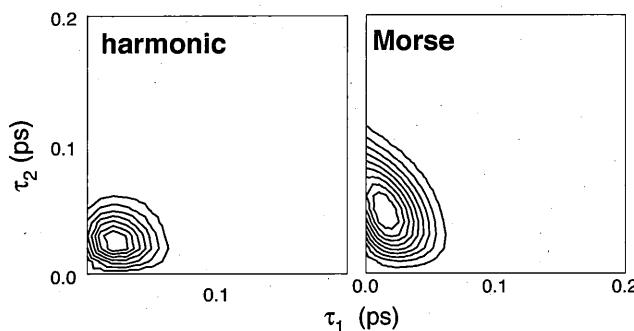


図 3 調和振動子ポテンシャル（左）とモース・ポテンシャル（右）に対する、5次の2次元ラマン分光の信号。パラメーターは図2と同じに選んだ。

問題は、ラマン等の通常の分光では、その効果を抽出して見えないので、それを評価するためには、比較する実験が必要となる。そのために考案したのが、高次光学過程を利用した2次元分光である。<sup>1)</sup> 着想は非常に単純で、通常のラマン分光だけでは、その対象としている系が、調和振動子近似がよいか悪いかわからないので、そのリファレンスとなるような実験を行い、比較しようというものである。リファレンスとして、レーザー相互作用の回数を上げた実験を行えば、溶質とレーザーが何回も相互作用する事から、系の違いが増強される事が期待される。また、異なる時間に励起された振動が、複雑に干渉する事になり、調和振動子からのずれを観察できるであろう。このような実験は、通常のラマン（1次元ラマン）に、もう一組のレーザーパルスを加える事により可能となる。これは、5つのレーザーパルスを用いた5次光学過程の実験である。始めのパルスと新たに加えたレーザーパルスの時間間隔を $\tau_1$ 、それとプロープパルスの時間間隔を $\tau_2$ としよう。5次の高次ラマン光学過程の信号は、ブラウン運動モデルの高次の位置相関関数と等価であり、経路積分等を用いれば計算できる。その結果は、

$$\begin{aligned} P(t) &= \int dt' \int dt'' E_r(t) E^2(t') E^2(t'') \\ &\times \langle [\alpha(Q(t)), \alpha(Q(t'))], \alpha(Q(t''))] \rangle \quad (4) \\ &\rightarrow R^{(5)}(\tau_1, \tau_2) \approx \alpha_1^2 \alpha_2 C''(\tau_2) [C''(\tau_1) + C''(\tau_1 + \tau_2)] \end{aligned}$$

となる。<sup>1)</sup> ここで、 $C''(t)$ は（3）式で与えられる調

和振動子の反対称の2次相関関数である。（4）式は、 $\tau_1$ と $\tau_2$ の関数として2次元面にプロット可能であり、それゆえ、2次元ラマン分光とも呼ばれる。2次元ラマン分光は、実験系とモデル系（特に調和振動子系）が一致しているかどうか検証するのに有用な方法である。その手順は

- ①非共鳴ラマン分光（通常の1次元のラマン分光）を行う。
- ②観測対象が、調和振動子系で記述されると仮定して、（3）式より $J''(\omega)$ を求める。
- ③それを用いて、2次元ラマン信号を（4）式より計算する。
- ④2次元ラマン分光の実験を行い、③の結果と比較する。モデルが僅かでも調和振動子とずれていたら、2者は大きく異なる結果を示すので、これより、モデルの妥当性を検証する。

2次元ラマンの敏感さを示すため、モース振動子系の2次元ラマンを図3に示す。<sup>2)</sup> 図3を計算するにあたり、ポテンシャルを、基底状態で図3の場合の振動数に一致するように定め、それ以外のパラメーターは同じにした。加味している非調和振動子性は、わずか1%程度なのであるが、図2と比較して、信号が大きく変化する事が見てとれる。図3（b）のケースは、通常の分光法では、ピークが広がってしまい、解析不能となるような、強い緩和の場合の結果である事を注意しておこう。実際、同じ系に対する1次元ラマンの信号は、図2のように調和振動



子系の場合と、殆ど変化がなく、実験上区別する事は不可能である。

このように、2次元ラマンは、その概観を使って、系の違いを解析する方法で、系の違いを判別するには、大変強力な手法である。しかし、どの系に対し、どのような概観になるかは、計算してみないとわからない部分があるので、いろいろな系に対し、計算を行っておき、博物学的に分類する必要がある。実験、解析ともに、手数がかかるが、他の実験方法では得ることの出来ない情報が得られる点、非常に有用な手法である。初期の2次元ラマン分光の実験は、カスケーディング効果と呼ばれる、一つの分子の吸収・放出した光を、周囲の分子が再吸収してしまう過程の信号で、覆い隠されてしまう問題があったが、レーザーの方向を工夫する事や、レーザーの位相を固定して感度を増す等の工夫が行われ、最近ではトロント大のミラーグループや、バークレーのフレミング・グループ等により、新たな結果が報告され始めた。<sup>3, 4)</sup>また、同等の実験を、遠赤外レーザー2本を励起、ラマンを検出分光として行った例や、<sup>5)</sup>赤外パルス3本用いて行った例等も報告される等、<sup>6)</sup>多様性も増してきた。実験手法を開発すると同時に、その測定対象も広がってきてている。2次元分光の可能性として、特に注目されているのは、たん白質等の生体分子の構造解析である。2次元分光を用いれば、特定の分子モード同士の相互作用を容易に検出する事が可能である。<sup>7)</sup>この性質を用いて、たんぱく質等生体分子の分子鎖同士の相互作用を解析する事が可能で、これよりどの鎖と鎖が近いか等を解析する事が可能である。2次元NMRと比較し、

レーザーを用いれば、核スピンがなくても、ラマンか赤外応答さえあれば解析可能であるし、フェムト秒というタイムスケールでの構造変化を追う事もできる。レーザーによる測定には、位相、波数空間、周波数、強度等を組み合わせた測定が可能で、バラエティーに富んだ実験が出来るというメリットもある。我々が理論的に示した事は、高次相関関数が系の違いに非常に敏感だという理論的な事実であり、レーザー以外の観測量についても、同様な議論を展開する事が可能である。実験的にも理論的にも高次の相関関数を求める事は易しい事ではないが、それだけのご利益があるというのが、我々の主張である。

#### 文献リスト

- 1) Y. Tanimura and S. Mukamel, *J. Chem. Phys.* **99**, 9496 (1993).
- 2) Y. Tanimura, *Chem. Phys.* **233**, 217 (1998).
- 3) V. Astinov, K. Kubarych, C. Milne and R. J. D. Miller, *Opt. Lett.* 投稿予定.
- 4) D. Blank, G. Fleming, *J. Chem. Phys.* 投稿予定.
- 5) W. Zhao and J. C. Wright, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1950 (1999).
- 6) P. Hamm, M. Lim, W. F. DeGrado and R. M. Hochstrasser, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **96**, 2036 (1999).
- 7) K. Okumura, A. Tokmakoff and Y. Tanimura, *J. Chem. Phys.* **111**, 492 (1999).

## 極端紫外光実験施設（繁政グループ）

繁政英治

平成11年5月1日付けで、高エネルギー加速器研究機構、物質構造科学研究所、放射光研究施設（Photon Factory；通称PF）よりUVSORに赴任いたしました。ご存じのように、UVSORでは他と異なり研究主体の研究グループという体制は取りにくくなっています。それは施設の職員全員で年間100人近くにも達するユーザーを1週間単位で研究支援しなければならないからです。ここでは執筆依頼のあった研究室紹介の代わりとして、前任地のP Fや留学先のフランスの放射光実験施設（LURE）とUVSORを比較をしながら、今後の研究計画などについて自分の見解を雑感的に記させて頂きます。（少々くどいですが、あくまでも自分の個人的な意見であることをお預けお断りしておきます。）

平成9年12月から平成11年3月までの1年3ヶ月間、フランスのOrsay（有名な美術館のあるパリ市内の場所とは別、パリ南郊外の町）にある南パリ大学内のLUREで研究する機会を得ました。LUREの蓄積リングの一つであるSuper-ACOの規模及び性能は、世界的に見ると、ドイツのBESSY-IやUVSORのものとほぼ同じカテゴリーに属します。蓄積リングの電子（或いは陽電子）のエネルギーが $1\text{ GeV}$ を少し下回るこれらの施設では、真空紫外から軟X線にかけてのエネルギー領域が放射光利用の中心となります。PFの蓄積リングは、X線領域にかなり重点が置かれていましたので、これらの施設とはいよいろと趣が異なります。例えば実験ホールとリングとの間のコンクリート遮蔽壁、これの有無は実験ホール内の雰囲気をがらりと変えてしまいます。この遮蔽壁は、PFとSuper-ACOにあつ

てUVSORにはないモノの一つです。UVSORの実験ホールへ足を踏み入れてホールの中心側に視線を移すと、多数のビームラインや実験装置の隙間から蓄積リングの電磁石や挿入光源などが直に見えてきます。利用可能なビームポートがほぼ占有されていることやリングやホールの規模が小さいことが相まって、UVSORの実験ホールは、かなり混雑した空間という印象があります。

自分のホームグラウンドとなったUVSORの実験ホールの現状についてもう少し説明しましょう。UVSORの職員が外部ユーザーの施設利用のために整備したビームラインの総数は11本です。それらを見ると、赤外領域から軟X線まで光エネルギー領域の切れ間なくカバーすると言う方針で建設された様子が伺えます。これ以外に、極端紫外光研究系に属する研究者が各研究グループ独自の興味で研究するための専用ビームラインが9本、合計20本のビームラインがおよそ $35\text{ m} \times 35\text{ m}$ の実験ホール内に所狭しと並んでいますから、上記のような印象を受けるのも致し方ないところだと思います。一方、Super-ACOは実験ホールが $35\text{ m} \times 60\text{ m}$ の長方形で、全長が比較的長めのビームライン（20m程度）を設置する十分なスペースが確保されています。真空紫外から軟X線領域の光を効率良く供給するためには、鏡や回折格子に対して光をすれすれに入射する、斜入射分光器を建設する必要があります。高分解能を最も手っ取り早く実現するには、大きな分光器を建設すればよいのですが、精度良く加工できる光学素子の大きさには限りがありますし、スケールアップに伴う照射エリアの広がりは収差の増加を生



みますので、無闇に分光器を大きくしても、思ったほど集光特性や分解能が向上しないという現実に直面することになります。角度発散の小さい光を使えば、これらの問題は一挙に解決されることになるので、いわゆる第3世代の高輝度光源の建設が待望されるわけです。一方で、近年の放射光に関連する分光技術の進歩は目覚ましく、通常の偏向電磁石部からの放射光でも（高輝度の光でなくても）、炭素、窒素、酸素と言った分子科学で重要な役割を果たす元素を含む分子の内殻励起状態の振動分光が比較的容易に行える、高分解能斜入射分光器が世界各地の放射光施設で次々と建設されています。このような分光器の登場により、分子の内殻励起後の脱励起過程を共鳴ラマン的な2次光学過程として捉え直す研究が報告されるようになって、内殻励起分子の研究は新たな局面を迎えていました。このような研究を実現できる分光器を含むビームラインは、その殆どが全長20m以上です。UVSORの場合、20m近くのビームラインが建設できる場所は1カ所しかありませんが、残念ながら他のビームラインが存在しています。また、実験ホールの拡張は最初から考えずに地下に設計されていますので、次期計画では拡張の余地を残した実験ホールが実現できればと願っています。その前に、現存のビームライン構成や実験ホールの使い方を見直して、区画整理を行う必要があるかもしれません。

内殻励起分子の解離ダイナミクスの詳細の解明を、UVSORでは是非とも展開して行きたい実験テーマの一つと考えていますが、これには振動分光が可能な高性能分光器が必要不可欠です。しかし残念な

がら、現在のUVSORには、他の同規模の施設で装備されるようになった100eVを越える領域での高分解能斜入射分光器が存在しません。自分自身の研究の展開は勿論ですが、まずはそのような分光器を開発することで、UVSORに於ける内殻分光に関する研究を活性化することを目指したいと思っています。ただし、現状のUVSORでは、高輝度を前提にできないので、分解能と強度を高い次元で両立することは不可能です。つまり、高分解能を得るために犠牲にした光強度を補なう高効率の検出系を開発しない限り、最先端の他施設と同等以上の研究成果を上げる事は絶望的だと言うことになります。自分自身の研究をUVSORで素早く軌道に載せて行くためには、高性能斜入射分光器と高効率の実験装置の開発をある程度同時進行する必要がありますが、一人で出来ることは高が知っています。幸いなことに、UVSORの下條竜夫助手とは年齢も研究分野もほとんど同じなので、研究のみならずいろいろな事で、相互に協力して行けるのではないかと期待しています。

以上のように、内殻励起状態の寿命幅以下を狙って共鳴X線散乱過程における内殻励起状態の崩壊ダイナミクスの詳細な研究を実行するための研究環境の整備が当面の課題と考えています。このような実験条件下では、多原子分子でもある程度振動モードを選択励起することが可能ですから、脱励起過程（共鳴オージェ電子）と生成イオンとを同時計測することによって、内殻励起後の解離過程における原子移動（分子振動あるいは分子変形）と結合切断との関係の詳細を解明出来るはずです。ただし、この

ような研究は、分光器の性能を最大限に出さないと達成できない類のものです。つまり、割り当てられたビームタイムのときだけ実験するという形態では、成果を上げる事が難しいと思います。世界的な成果を挙げるために研究者としてUVSORでどういう環境を作っていくか、日々のユーザー支援だけに埋没してしまわないようにして、考えていかねばなりません。

UVSORの放射光利用が始まってから既に16年、設備の老朽化対策に費やされるお金とスタッフのエネルギーは年々増加しているようです。明らかにリングの更新計画を検討し始める時期に来ていると思いますし、実際に、小杉施設長の指示を受けて、検討を開始しています。しかし、国の厳しい財政事情を考えると更新と言えども実現するのは並大抵のことではありません。他の施設では真似の出来ないUVSORならではの研究テーマは何か、オリジナリティーを追求することがこれまで以上に重要になってくると思います。このことを常に頭に置きながら、微力を尽くす所存ですので、UVSORのユーザーの皆様、また、UVSORスタッフを始め、分子研の皆様、宜しくお願い申し上げます。

最後にちょっと余談ですが、Super-ACOとUVSORやPFを比べて、決定的に違うのは、実験ホールの明るさだと思っています。UVSORの実験ホールは地下にあり、採光用の窓がありません。PFの実験ホールは地上にありますが、側室があるためか、採光用の窓はここにもありません。一方、LUREは地上の実験ホールの外側壁は勿論のこと、一部天井にも採光用の窓があります。私のLURE滞

在中のボスであり、現在とん挫しかかっているフランス独自の第3世代放射光建設設計画「SOLEIL」プロジェクトのリーダーの一人、Paul Morin博士は、Super-ACOの実験ホールで、得意そうに天井を指さしながら、「SOLEILの実験ホールにも採光窓を作るつもりなんだ。」とその重要性を熱く語ってくれました。採光窓に関しては、日本では法律での規制があるのかもしれません、実験ホールの明るさとそこで働く人の性格には多少の相関関係があるような気もします（単なる国民性の違いという説もあります。また、性格の明るさ暗さはあくまで相対的なものです。PFやUVSORのスタッフがみんな根暗だと言っているわけではありません）。UVSORの次期計画と言う話題が出る度に、実験ホールには是非採光用の窓の導入を提案しようと密かに思っています。そう遠くない将来、明るい光源を使って、明るい実験ホールで、明るく働いてゆける、そんな夢を最近思い描いています。Super-ACOのように、シャンパンを片手に実験の成功を実験ホールで祝えるようになれば更に良いのになあなんて。



## 光の時代に生きる

黒澤 宏

「21世紀は光の時代」という言葉に魅せられて、光の世界に足をつっこんだところ、言葉以上に魅惑的な世界で、とても足を抜くことができない状況になってしまっているこの頃です。最初に手を着けたのが、真空紫外波長域の高出力レーザーを作ることでした。当所の目的は、プラズマ中の水素や炭素などの軽元素をレーザー誘起蛍光法で測定することになり、アルゴンエキシマを用いた126 nm レーザーの発振でした。1トンのオイルで絶縁されたコンデンサーで高電圧を発生させ、1トンの純水を誘電体として利用したパルス成形回路で高電圧パルスを作り、電子ビームを発生させて40気圧のアルゴンガスを励起する形式です。こんな大がかりな装置ですが、直径5 mmのレーザー光が出てきます。発明当所のレーザー装置の面影を残しているレーザーとしては、最も短い波長で発振します。ガスをクリプトンに変えれば、146 nmで発振しますし、キセノンを使えば172 nmの光を出します。波長が長くなればなるほどレーザー発振が容易になりますが、ガスの価格は順調に上がってきます。光としては、波長が短い方が魅力的ですし、157 nmには市販のフッ素レーザーもあることから、もっぱらアルゴンエキシマレーザーの高出力発振を目指しました。ところが、ある日、共振器反射鏡として用いていた石英ガラス板に薄く色づいた損傷が見られ、それを詳しく調べると、シリコン単結晶ができていることがわかったのです。光を当てるだけで、石英ガラスからマクロに酸素が抜けていき、後にシリコンが析出してました。レーザーパルスは高々5 nsで50 mJのエネルギーを持っていますが、こんな短い時間内に

目に見える変化が生じる現象が起こったのです。レーザーが強力なだけでなく、波長が短いために生じた現象です。石英ガラスの真のバンドギャップエネルギーが9.5 eVですので、9.8 eV (126 nm) の光エネルギーで電子遷移を起こし、その結果としてマクロな原子移動が生じたのでしょう。励起子が関係することはわかったのですが、それ以上の詳しいメカニズムの解明にまでは至っていません。X線光電子分光、原子間力顯微鏡、軟X線発光分析、電子顯微鏡などが観測手段ですが、その場観察ができなかつたことがその主たる原因かと思っています。

真空紫外レーザーは、希ガスエキシマで実現できましたが、電子ビーム励起方式を取っているために、繰り返しのきわめて遅い動作しかできません。レーザーの開発をしているときには、さして不自由は感じなかったのですが、応用に目を向け始めると、レーザーそのものは単なる道具にしか過ぎず、ボタンを押すだけで光が得られるような道具に生まれ変わってほしいとの切なる願いがふつふつとわき上がっていました。時に、トロント大学のストイチエフ先生が、放電によって希ガスエキシマレーザーができるとの報告が世界中を駆けめぐりました。分光の世界では、世界的に有名な先生ですので、間違いのない事実として受けとめられました。世界中の研究者達が、こぞって追試を試みましたが、うまくいきません。数年が過ぎる頃には、何かの間違いであった、との評判が立ちはじめ、研究者達も手を引き始めていました。佐々木亘先生と一緒にになって、それでもあの手この手を使って放電励起による希ガスエキシマレーザーの発振を目指していました。その内、超

音速ジェットで作った希ガスクラスターを放電で励起すると、効率よく希ガスエキシマができるのでは無からうかとのアイデアの下に、実験を再開したのです。すると、案外と簡単に希ガスエキシマ発光は観測できたのですが、なかなかレーザーとまで行きません。そんなこんなで、希ガスエキシマレーザーの発振実験は終了したわけではありませんが、ちょっと横目で見ながらの研究体勢に入ってしまったのが現状です。佐々木亘先生は、高気圧の放電で希ガスエキシマレーザー発振を目指して、実験を継続中でありますので、近い将来には朗報が聞かれるものと期待しています。

このような真空紫外光との出会いがあって、光の世界に入ったのですが、レーザーは光の作用と同時に熱作用を与えてします。定量的に測定したことはありませんが、ほとんどの固体の吸収係数が非常に大きい波長域ですので、熱作用の方がはるかに大きいものと考えられます。すると、次は光のエネルギーだけでは何が起こるのかに興味を持ち始めました。温度を上げることなく光だけを照射して、先ほどのような現象が起こるのかどうか。ところが、真空紫外域の光源としては、当然のことながらシンクロトロン放射光を除いては、なかなか良いものはありませんでした。研究の究極的な目的が、現象を解明すると同時に、世の中の産業に貢献することにおいていますので、放射光でしかできないことよりもむしろ、放射光でもできるけれども、もっとみんなの手近にある光源でもできることにより強い興味を持つています。そこで、登場するのが、同じ希ガスを使うのですが、ちょっとした工夫でエキシマ

発光が実現できることです。誘電体バリア放電を利用すれば、希ガスエキシマ発光がかなり高い効率で得られます。市販もされていますので、簡単に手にはいるのも魅力です。まさに、ボタン一つで出てくる光です。光の強度はレーザーとは比べものにはなりませんが、シンクロトロン放射光の分光ラインから出てくる強度と遜色はありません。しかも、希ガスの種類を変えれば、波長を変えることができます。希ガスハライドエキシマ発光も可能ですので、真空紫外から紫外波長域を、飛び飛びではありますが、カバーしている光源だといえるでしょう。この希ガスエキシマランプ（レーザーではないので、“ランプ”と呼んでいます）を使って、新しい研究を始めました。一つは、高エネルギー光の特長を生かして、プラスティックや有機結晶の表面研磨・表面処理で、もう一つは有機珪酸の光分解反応を利用した石英ガラス薄膜の室温形成です。有機結晶は、非線形光学にとって重要な材料ですが、表面の光学研磨が難しく、コーティングと相まって、真空紫外光を利用すれば、研磨とコーティングが可能であることを実証しました。これによって、レーザー耐性も向上し、高品質の波長変換デバイスを作ることができるでしょう。現在のところ、有機材料の光分解過程を調べる実験を行っているところです。一方、有機珪酸の光分解の研究では、半導体LSI製造に使用されている、テトラエトキシオルソシリケート ( $\text{Si}(\text{O}-\text{C}_2\text{H}_5)_4$ ) の真空紫外光分解によって、 $\text{SiO}_2$ 薄膜が室温で形成されることを実証しました。半導体の集積度が上がるにしたがって、LSI製造プロセスの低温化が望まれる中にあって、キャパシタ、層間



絶縁膜、酸化防止保護膜などに利用される  $\text{SiO}_2$  を室温で作成する技術は、一步先行した形となりました。現在のところ、半導体製造過程に導入を図るべく、実用化へ向けての検討を行っている最中です。一方、光反応メカニズムについては、全くと言っていいほどわかっておらず、光反応過程の解明が今後の課題だと思っています。この様な基礎実験には、エキシマランプよりも、波長可変範囲が広く、平行ビームに近いシンクロトロン放射光の方が使いやすいから、分子科学研究所に滞在中、そのメリットを生かし、放射光施設を利用して進めていきたいと思っています。

ところで、このように書いてくると、極端紫外光科学実験系の言葉には合致した研究経歴と計画であると思うのですが、放射光をもっと積極的に利用するテーマを実施したいとも考えています。九州にも放射光施設の設置が計画されている中、分子研滞在中に、新しい研究に着手し、新しい放射光施設を有效地に利用できればこれに越したことはありません。UVSOR の 4A と 4B のラインには、宇理須先生が半導体加工および観測用のユニークな装置を立ち上げておられます。機会あって、宇理須先生と共同でこれらのビームラインを使うとともに、新しいラインの立ち上げも実施できることになりました。目指すは、微細加工技術を利用してフォトニック結晶の製作です。フォトニック結晶とは、半導体結晶の中で電子がバンド構造を取るのと同じ原理で、フォトンが誘電体規則構造の中でバンド構造を取るもので、エレクトロニクスが 20 世紀の世界を作り上げてきたのと同様、フォトニクスが 21 世紀を作ると

したら、そのキーコンポーネントになるのがフォトニック結晶でしょう。世界中でフォトニック結晶の製作技術が開発されていますが、いずれもデバイスにはほど遠いほど、小さな構造物しかありません。デバイスとして考えるならば、mm から cm の大きさの構造体を作る必要があるでしょう。その製作技術の一つが、LSI 製作技術の基本となっている光リソグラフィーにあると思っています。放射光リソグラフィーがその最たるもので、放射光リソグラフィーを使ったフォトニクス技術の開発を、流動部門に滞在中に着手できればと願っているところです。1 年やそこらで完成するものではありませんが、手を着けなければ手に入らないのは、宝くじと同じことですので、できるだけ早期に、しかも全力に近い力を投入して実施したいと考えています。

分子科学研究所では、基礎研究に力を注いでおられる方がほとんどのような印象を持っていますが、私の研究は工学寄りです。原理原則を明らかにすることよりも、世の中に寄与する技術開発が、私に課せられている使命だと思っています。とはいえ、原理原則ないしは新しい現象にも心をときめかせる気持ちは十二分に持っていますので、大いなる刺激を受けて、いつでも新しいことを目指した研究生活を送ることを願っています。

# 極端紫外光科学研究所 界面分子科学研究所（長岡グループ）

長 岡 伸 一

平成 11 年 4 月に愛媛大学理学部化学科から転任して参りまして、平成 13 年 3 月まで流動部門に在任いたします。転任に当たりましては、分子研並びに愛媛大学の皆様に大変お世話になりました。特に、伊藤前所長、茅所長には格別のご配慮をいただき、この場をお借りして厚く御礼申し上げます。

興味を持っております研究課題は、

- ①光のナイフの創成—内殻準位励起後のサイト選択的解離の研究
- ②励起状態分子内プロトン移動における節面モデル
- ③ビタミン E の抗酸化反応の機構

などですが、本流動期間中は主として①の研究を行いますので、本稿では①の研究について、現状と今後の計画について述べます。

一辺が 10 cm である正方形の紙の一つの頂点から一辺 1 cm の正方形を切り取るには、はさみが使われます。一辺が 1 cm である正方形の紙の一つの頂点から一辺 1 mm の正方形を切り取るには、ナイフを使うと便利です。それでは、さらに対象が小さくなつて、分子から原子もしくは原子団を切り取ろうとすればどうすればよいでしょうか？ 現在は切り取られる原子や原子団の性質に基づいた化学反応によって、こうした切り取りが行われていますが、ナイフに相当する便利な手法は未だ開発されていません。私たちのグループでは、シンクロトロン放射光を光のナイフとして用い、内殻準位励起後のサイト選択的解離に基づいて、こうした切り取りを行うことを研究いたしております。

分子全体に非局在化している価電子と異なり、内殻電子は元々属していた原子付近に局在化していま

す。一つの分子中の同じ元素の同じ内殻の準位でも、その原子の周囲の結合などの環境によって内殻電子の励起エネルギーは変化します（例えば、 $\text{CF}_3\text{CH}_3$ ）。そこで、照射光のエネルギーを厳密に選ぶと、分子を構成する原子のうち特定のもののみを選択的に励起することが可能であると考えられます。その結果、その原子との結合だけが選択的に切れるようなサイト選択的解離反応を起こすことができるでしょう。このような発想に基づいて、私たちのグループは、放射光と同時計数法を用いて、内殻電子励起後の励起サイトに選択的な解離反応を検討し、分子中の原子の位置によって反応がどのように変化するかを研究してきました。こうした内殻の性質を利用すると、放射光を光のナイフとして用いた全く新しいタイプの材料加工技術を開発することができます。有機金属分子の内殻準位からの光イオン化後の解離反応は、半導体製造プロセスにおける光化学気相蒸着の観点からも興味深い反応です。

私たちのグループがサイト選択的解離の研究対象に選んだのは、 $\text{Si}(\text{CH}_3)_3(\text{CH}_2)_n\text{SiF}_3$ 、 $\text{CF}_3\text{CH}_3$ 、 $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OH}$ 、 $\text{CF}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CF}_3$ などであり、実験方法は主として光電子—光イオン同時計数法です。また、実験結果を解釈するために *ab initio* 分子軌道法を用いた理論計算も行っています。本稿では特に、金表面に凝縮させた  $\text{Si}(\text{CH}_3)_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SiF}_3$  の研究を例として、これまでの研究成果について説明いたします。

$\text{Si}(\text{CH}_3)_4$  や  $\text{SiF}_4$  の光電子スペクトルは  $\text{Si}:2p$  の領域に 1 個しかピークを示さないにも関わらず、 $\text{Si}(\text{CH}_3)_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SiF}_3$  の光電子スペクトルには 2 個のピークが観測されました（図 1）。 $\text{Si}(\text{CH}_3)_4$  や  $\text{SiF}_4$

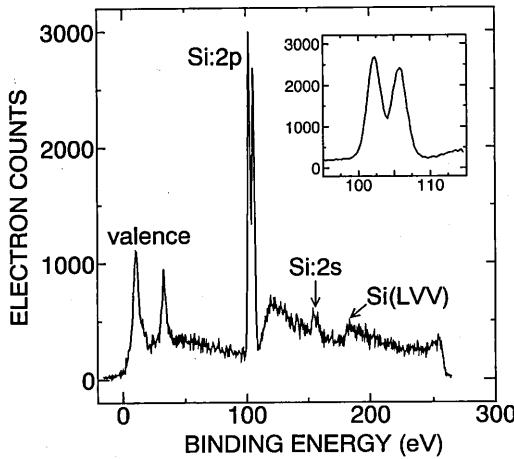


図1 金表面  $\text{Si}(\text{CH}_3)_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SiF}_3$  の光電子スペクトル

Si:2p領域に2個のピークが観測されている

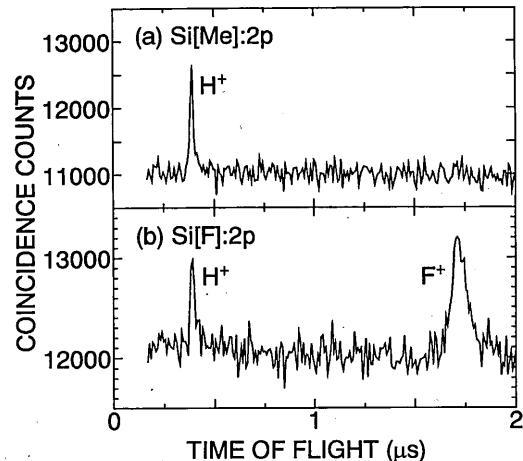


図2 光電子と共に生成する脱離イオンの質量スペクトル

(a) Si[Me]:2p光電子の場合

(b) Si[F]:2p光電子の場合

の光電子スペクトルとの比較から、低エネルギー側のピークはメチル基が結合したケイ素 (Si[Me]) の2p内殻電子の放出によるピークであり、高エネルギー側のピークはフッ素原子が結合したケイ素 (Si[F]) のピークであると同定されました。Si[Me]:2p光電子と共に生成する脱離イオンの質量スペクトルを図2aに、Si[F]:2p光電子の場合のスペクトルを図2bに示します。Si[Me]:2p電子の放出とともに  $\text{H}^+$  が表面から脱離し、Si[F]:2pの場合には  $\text{F}^+$  が脱離しています。このように、 $\text{Si}(\text{CH}_3)_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{SiF}_3$  ではサイト選択的な解離が  $\text{Si[Me]:2p} \rightarrow \text{H}^+$ 、 $\text{Si[F]:2p} \rightarrow \text{F}^+$  というように、光励起が起こったサイト付近で選択的に起こっています。このような金表面上のサイト選択的な解離のパターンは、気相の場合と大きく異なっています。本研究から、内殻励起を分子中の局在化した反応を引き起こすために用いることができる事が分かりました。こうした結果は、非常に局在化した反応のコントロールが重要である将来の分子素

子の創成に直接応用することができるでしょう。

サイト選択的な解離の研究を試みた研究者は、これまでに私たちのグループ以外にも居ました。しかし、彼らの実験結果は、図1、2ほど明瞭ではありませんでした。今回このような明瞭な結果が得られた理由の一つは、私たちのグループが「サイト選択的な解離が明瞭に観測されるためには、サイト間距離がある程度離れてなければならない」という発想をしたためです。実際、サイト間のメチレン基数が減少すると、明瞭なサイト選択性が得られなくなることが実験的に示されました。また、もう一つの理由は、従来の研究が気相での実験であったのに対して、私たちのグループが表面の実験を試みたことがあります。気相では、サイト選択的な解離のみならず、競合する全ての過程が観測されるのに対して、表面上ではエネルギーの高いイオンが生じるサイト選択的な反応のみが選択的に観測されるため、気相より明瞭な結果が得られることが分かりました。

今後は、UVSORのBL2B1、BL8B1ビームラインを用いて、放射光励起による表面および気相におけるサイト選択的解離反応を研究することを計画しています。また、電子線励起の実験装置を実験室で製作いたします。具体的には

- ①表面用および気相用高感度高分解能の Siegbahn型電子エネルギー分析器を開発します。
- ②気相実験のためのイオン運動エネルギー分析用CMAを開発して電子エネルギー分析器の対面に置いて、エネルギー分解光電子とエネルギー分解光イオンの同時計数測定を行ないます。この方法の特徴は、内殻電子励起状態、あるいはオージェ終状態を選別して、エネルギー選別したイオンの収量を定量的に測定できる点であり、本研究に最も適しているとともに世界的に前例が無い装置です。
- ③気相実験のための高分解能イオン質量分析用リフレクトロンを開発します。高分解能イオン質量測定を必要とする研究では②のCMAの代わりにリフレクトロンを使用します。
- ④実験室で電子線励起による気相分子実験装置を作成し、電子線励起による散乱電子、オージェ電子、解離イオンの三重同時計数測定を目指します。①～③の装置は、UVSORと実験室のいずれでも利用できるように設計します。
- ⑤UVSORおよび④の装置を用いて、表面および気相におけるサイト選択的な解離の研究を進めます。対象としては、Si(100)上の $\text{CF}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$ や $\text{N}_2\text{O}$ 、 $\text{CF}_3\text{CH}_3$ 気体、 $\text{F}_3\text{Si}(\text{CH})_n\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ 気体などを予定しています。特に、表面の研究では基板が

サイト選択的な解離に与える影響、気相の実験ではイオンの運動エネルギーとサイト選択性の関係などについて検討します。さらに、分子動力学的計算などを行い、実験結果と比較することも計画しています。

分子研に転任して、これまでに漠然と構想していたものが具体的な形になりつつあるのを感じております。これも分子研の職員の皆様のご協力と優れた研究環境によるものと心から感謝いたします。在任期間中に少しでも多くの成果を上げられるように努力いたしますので、今後ともどうかよろしくお願ひいたします。



## 近況報告

木村克美

私が分子研を停年退職したとき本誌に「分子研を去るにあたって」の記事を書いて七年になりますが（分子研レターズ 27 (1992)）、もう原稿を頼まれる機会はないだろうと思っていました。今回、本誌の編集委員の方から何か書いてほしいといわれ、うっかりお引き受けてしまった次第です。何を書いたらよいか迷っていたのですが、丁度最近（この10月1日から）再就職することになりましたので、この機会にここで近況報告させていただきます。

昨年三月先端科学技術大学院大学を停年になって岡崎の自宅に戻ってきたのですが、それ以来最近まで一年半近く、分子研の名誉教授室か図書館の個室をお借りして、仕事を続けることができました。私が分子研でしたことは、主にレビューを書くことでした。一つは *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* (Elsevier) Vol. 100 記念特集号 (1999) の出版に当って依頼されたレーザー光電子分光に関するレビューで、もう一つはアイオワ大学の Cheuk-Yin Ng 教授編集の *Advanced Series in Physical Chemistry—Review Volume on “Photoionization and Photodetachment”* (World Scientific, 2000) の一章にファン・デル・ワールス分子錯体のゼロエネルギー光電子分光について書く仕事でした。その他、北陸先端大での未発表の結果を二、三論文にまとめてみました（分子研佐藤信一郎助教授と共に）。岡崎に戻ってから、分子研で何か共同研究をしたいと思って、所内グループの研究に関心をもっていたのですが、再就職の可能性がありましたので共同研究が中途半端になつてはまずいと思い、結局何もできずに終わってしまいました。

ところで、私は10月から通信総合研究所（郵政省）に所属し、新設の「ナノ分子フォトニックス共同実験施設」に特別研究員として勤務することになりました。場所は名古屋市内の志段味ヒューマンサイエンスパークに建設された先端技術連携リサーチセンターの中です。これは科学技術庁の予算で始まった単一分子に関する研究プロジェクト（五年間）の一環ですが、金属材料技術研究所（科学技術庁）との共同研究施設です。また新しい研究に取り組んでいますが、これまでの私の経験が生かせればと思っている次第です。分子科学と関係があるプロジェクトですので、これからも分子研の方々にお世話になることもあるかと思っています。

以上、近況報告をさせていただきました。

## 第9回分子科学研究所オープンハウス

岡 本 祐 幸

1999年4月24日(土)、第9回分子科学研究所オープンハウスが開催された。この行事は、全国の大学院学生、学部学生及び社会人を対象とする見学会であり、各教官が自分の研究内容を外部の人に分かりやすく説明する数少ない行事のひとつである。分子科学研究所は全国共同利用の研究機関であると共に、総合研究大学院大学の基盤研究機関のひとつとして、博士後期課程の大学院教育に参加している。普段、比較的強調されることの少ない教育機関としての分子研の側面を広く知って頂くことも、この見学会の重要な目的のひとつである。

本年度は、日本化学会、日本物理学会、及び日本生物物理学会の学会誌に広告を掲載させていただくとともに、電子メールで分子科学関連分野の研究室や掲示板に案内を送って、参加者を募集した。その結果、参加者は43名であった。その内訳は、学部学生8人、修士課程大学院生27人、博士課程大学院生5人、大学教員1人、会社員2人であった。参加者の所属・出身大学の内訳は年によってばらつきがあるが、本年は、愛知教育大学、お茶の水女子大学、学習院大学、京都大学、群馬大学、慶應義塾大学、神戸大学、国際基督教大学、電気通信大学、東京学芸大学、東京工業大学、名古屋大学、奈良女子大学、三重大学及び龍谷大学であった。旅費や宿泊費を援助しないことを考えると、参加者の熱意を感じられた。

当日は、映画「分子科学」等を上映のち、茅幸二所長には分子科学研究所の説明を、田中晃二教授には総合研究大学院大学の概要を話して頂いた。その後、3時間40分の間、参加者は研究室と研究施

設を自由に見学した。最後に所員と所内の総合研究大学院大学の学生達を交えて、大変賑やかな懇親会を開催して終了した。

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



## 岡崎を去るにあたって

東京大学大学院理学系研究科 塩谷光彦  
(前錯体化学実験施設錯体触媒研究部門教授)

岡崎を去るのは2回目になります。以前の錯体合成研究部門（2年間）を加えますと、5年と10か月の間、分子研にお世話になり岡崎に住んだことになります。博士を中退し東京を離れたのは、約12年前（その間に、引越は8回）。広島大学、テキサス大学での滞在も含め様々なことがありましたが、やはり最後の分子研での滞在は、自分にとって最も大きな転機でした。

初めて独立することになって最初に考えたのは、研究テーマをどうするかということでした。結局、赴任してしばらくの後、研究テーマを100%一新しました。新しいことに挑戦することへの意気込みと、不安な気持ちとが入り交じり、また、なかなか結果が出ないことに苛立ちを覚えることもありました。外部の先生方からは、励ましのお言葉や、時には厳しい評価もいただきました。安易な方向に流されないよう新しい研究を進めてきたつもりですが、最近は、積み重ねてきたものから少しづつエキサイティングな結果が出てきており、毎日スタッフとディスカッションするのが楽しみです。スタッフや学生も私以上に不安であったとは思いますが、根をあげずに本当によく頑張ってくれたと思います。彼らは田中健太郎君（助手）を中心に、6月には分子研を引き上げ、新任地で新たに実験室を立ち上げてくれました。今回、分子研で苦楽と共にした田中助手、Bu教授、総研大院生5名（田坂君、茂森君、森下君、幡野君、曹さん）全員が快く東京に移動してくれたことが、研究を進める上で大きな心の支えになっています。東京にきて、「金属錯体の集積化による動的不齊空間の構築」というさらに新しい研究の

柱を立てましたが、こちらはすぐに成果が出て、投稿の結果を待っているところです。テーマの内容により、時間のかかるものも、短期間で芽が出るものもあり様々ですが、タイムスケールにとらわれることなく新しいコンセプトを打ち出すことが重要だと確信しています。

12年前にリュックサックと布団袋一つで東京を出ましたが、各地を転々としているうちに、ついに岡崎を去るときには家内と子供3人、そして家財も10トントラック分にまで増えていました。（片）田舎で穏やかな岡崎の街が、自分の性には合っていたので、どっしりと落ち着こうかとも思っていましたが、東京に移る機会を得て、再び激動の時期が始まることになりました。

最後になりましたが、常に公私両面でしっかりと支えて下さり、いつも安心して研究ができるよう最高の環境を作つて下さいました伊藤光男所長（現機構長）と田中晃二施設長に深く感謝申し上げます。また、多くのご指導をいただきました分子研の諸先生方、錯体化学実験施設の皆様（特に、山口さん、神谷さん）、研究所の技術向上、環境整備、安全確保にご尽力をいただきました酒井課長はじめ技術課の皆様、いろいろ無理を聞いていただきました管理局の皆様に、大変お世話になりましたことを心から御礼申し上げます。

もともと薬学出身ですので、新任地は空気も若干異なるような気がしますが、皆様に支えていただきながらしっかりと足場を作りたいと思います。

今後ともご指導の程、何卒宜しくお願ひ申し上げます。

## 新しい食品を作るために

宮島醤油株式会社 宮 島 清 一  
(前 分子集団研究系分子集団動力学研究部門助教授)

物理化学の専門家としての研究生活に区切りをつけ、1999年4月から、食品工業に身を置くことにしました。分子研で過した6年半のあいだ、沢山の方々に教えられ、助けられて、身に余る恵まれた日々を送りました。皆さんありがとうございました。

私の就職した会社では、明治時代から醤油、味噌を作っています。醸造学について、初めて勉強して感じることは、醸造工場というのは、全体が大きな生物化学実験室だということです。醸造過程における重要な化学反応はすべて微生物によって行われます。つまり工場全体で微生物の飼育をしているだけとも言えます。コウジカビ、乳酸菌、酵母など複数の種類の微生物が関与するので、醤油、味噌の醸造はかなり複雑です。それらの微生物が順を追って盛んに活動するように、塩分濃度、水素イオン濃度、温度、及び栄養（穀物と水と空気）を時間を追って制御、管理していきます。工場廃水もすべて微生物に食べさせて分解し、排泄物として沈殿させ、上澄みを海に還します。排泄された沈殿物は畑の肥料に、醤油の絞り粕は牛のえさにします。

雑菌の繁殖できない厳しい環境下で生きる、良質の好酸好塩性微生物を昔の日本人が発見し、大切に育てたことが、世界に誇る万能調味料を生み出した基礎であり、ここに優れた技術開発の典型を見る思いがします。新しい有用微生物を見出すことと、それらが元気に育つ条件を工夫することが、今後の革新の鍵なのですが、新しい工夫が可能だと感じています。

いっぽうで、新しい食品を作ろうとしています。

私にとって最初の開発的な仕事は、即席の野菜炒め（あるいはチャーメン）の新しい製造法の開発に参加することでした。部分的に凍結破壊した野菜に高浸透圧液を吸わせて、組織に水素結合した水を引き剥がし、1 Torrくらいの高真空状態に置いたところに、加熱したパーム油を噴射して、残存水の爆発的な沸騰を起こします。10数分かけて真空中で油揚げをすると、水分含量が1～2%程度の、からからに乾いたフライが出来あがります。この方法で作ったフライは色鮮やかで、お湯をかけると2分で野菜炒めとなります。小規模の実験ではうまくいっていたのですが、工業生産規模での実験が必要でした。これはタイの工場で行いました。北緯7度、マレー半島の照りつける太陽の下で、真空と油加熱等の実験をするので、ものすごい暑さです。タイの人々も暑さで頭がクラクラすると言っていました。実験を終えてシャワーを浴び、夕陽を見ながらテラスで飲むビールは最高です。熱帯の夕暮れは感動的ですよ……。

今回の実験にはかまぼこ屋さんの研究室も関心を寄せてくれ、開発研究者を派遣してくれたので、いく種類のかまぼこを真空フライテストしました。機械会社の技術者も来てくれ、工場の設計も同時に進行できました。タイの大きな魚処理会社が一つの建物をそっくり貸してくれたので、そこに工場を作ります。こうして、いよいよマレー半島に小さいながらも真空フライの生産拠点が作れそうです。人口4万人の町の郊外、広大なゴム園の中、熱帯の魅惑あふれるところです。

これから新しい食品をいろいろ作ろうと思いますので、試食など、どうぞご協力をお願いします。



## 流動四方山話

千葉大学工学部物質工学科 上野信雄  
(前 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門教授)

平成9年4月から2年間、界面分子科学研究部門で研究を行う機会をいただいた。分子研およびUV SOR施設の方々の多くの支援のおかげで我々の研究分野にとって今後の発展を支える基盤を形成することができ、心から感謝している。また、多くの情報を仕入れることができたが、この点はある意味では研究業績以上に貴重と思う。しかし一方では流動元の大学が抱える流動制度に関連した諸問題をいやというほど体験できる機会でもあった。分子研での研究状況・経験については十分満足しているが、以下に、流動中の経験について二三述べてみたい。

### 分子研でのダメージ

(分子研に及ぼしたダメージもあるが……)

UVSOR-BL8B2でのビームラインにおける角度分解光電子分光装置の老朽化のため、将来の研究に即する目的で新たな装置の製作を目指した。伊藤所長(当時)や小杉極端紫外光実験施設長、研究系の宇理須主幹をはじめ所内の多くの方々に多様なバックアップを受けることができ、結果として新装置を製作することができた。しかし、計画スタート直後にUVSORでの新規計画の見送りなど、研究所の予算削減問題の影響をまともに受ける第一号になった。いまではこれも良い経験と思っているが、実はかなり痛かった。

### こんなはずじゃあなかったのに

#### —流動中の大学での問題—

○流動中は大学から完全に席がなくなるので、流動前に手を染めていた学内計画が流動中に大学で立ち上がりてしまい予算上大きな損失を受けてしま

う羽目になった。研究所の予算削減問題の影響をより痛く感じる所以である。

- 大学の研究室運営を継続する必要上、研究室の諸業務を行わざるを得ないが、事務的に(書類上)は大学院生の指導教官になれないこと、オフィシャルの会議に出席できないことなどがあり、学生の指導上「危うい橋」を渡ることを余儀なくされた。
- 流動中も流動前と変わることなく授業を担当した。非常勤講師の枠に制限があるため、書類上一部の講義を他の教官の開講にし、「もぐり」で講義するという方法をとった。
- 大学側で余分のポストを利用し併任になることができればこれらのような問題はないが、一般的に殆ど不可能といってよい。
- いわゆる17才飛び入学を推進していた少数教官の1人であったので、多くの会議に出席する必要があった。このため、分子研の火曜会に出席できなかったのは極めて残念であった。
- 流動期間中は単身赴任であるため、千葉と岡崎で計2つの公務員宿舎を確保する必要があった。これにはややこしい(厳格な)規定があり、子供の1人がたまたま高校生であったため2年間は2つの公務員住宅を借用できた。家族構成によっては、このようなわけには行かないと思われる。

流動制度をより良くするために「たった一つだけ」何をしてほしいか、と問われたら即座に以下のように答える。「流動元大学に‘併任専用’ポストをつけるようにできるとありがたい……予算措置をしなくても良いから國の腹は痛まないだろう。」

## 岡崎を去るにあたって

神戸大学理学部 櫻井 誠  
(前 極端紫外光科学研究系界面分子科学研究部門助教授)

界面分子科学研究系の流動部門の任期を終えて、神戸大学に戻りました。2年間の間、伊藤前所長や、宇理須主幹をはじめ分子研の方々に大変お世話になりました（というか、御迷惑をおかけしました）。ここで改めてお礼とお詫びを申し上げます。

分子研と私との関係は、1988年に東大生研から名大プラズマ研に転任し、UVSORのプラズマ研ビームラインを担当したときからの長い付き合いですが、流動部門に赴任するまでは、ずっと外から分子研を眺めていました。今回（念願が適つて？）ようやく中に入ってみて、外から見たのとは違った風景を観察できました。特に、教授会議には都合がつく限り出席させて頂きました。大学学部の教授会とは違って、学術活動に関する国レベルの様々な情報が流れてくるのを目の当たりにできましたことは、私にとって大変有意義であったと思います。

私は流動期間中の研究テーマとして、赤外放射光を用いた表面振動分光を掲げていました。残念ながら、実験装置を立ち上げるのが精一杯で研究成果を挙げるまでには至りませんでしたが、（皮肉なことに？）2年目の終わりに降って沸いたようにSPring-8の赤外ビームライン建設の話が持ち上がり、分子研で日の目を見なかったことがひょんなところから実現できることになりました。しかし、これにも分子研での蓄積が多く反映されていることは間違ひ無く、流動の機会に恵まれたことに感謝しています。

在任中に流動制度のレビューがあったように、この制度はなかなか厄介なものだと思いますが、よく人選をして頂いて、実のあるものにして頂きたいと

思います。

最後に、一言（こういうトラブルも起こり得ますよという意味で）愚痴を言わせて下さい。流動で転出中に、神戸大学で大学院の改組があり、戻ってみると大学院の後期課程の担当から外されました。改組の時点では籍がなく、改組後3年間は担当教官の追加ができないのが理由だそうです。まあ、戻ってみたら机がなかった、というのに比べればマシですが……



## MY WORK AND LIVING IN OKAZAKI

PAVLOV, Lubomir Iordanov  
(外国人客員教授)

I came from Bulgaria, Sofia. I was for the first time in Okazaki last 1998 year for 10 days from October 21. I conducted two open seminars at the Department of Electronic Structure. First my seminar was entitled "Pump-probe laser spectroscopy of molecules." The second seminar was: "Femtosecond optical parametric oscillator and difference-frequency generation."

My second arrival in Japan was on February 12, 1999 for a period of two months.

Currently, I am working in Prof. Toshinori Suzuki's group at the Department of Electronic Structure for seven months-term, as a visiting professor. I am very grateful for the opportunity to work here in the field of laser spectroscopy of molecules and molecular dynamics, using femtosecond nonlinear optical converters, which is of great scientific interest and it corresponds at the same time to my professional experience. Herewith I would like to acknowledge the Dean of Electronic Structure Department Prof. N. Nishi, the President of National Research Institutes Prof. M. Ito, and the Director of IMS Prof. Kaya, for a giving me such opportunity to work in IMS. I am very much indebted to Prof. T. Suzuki, who especially made a lot of efforts to realize my visit here. It is of great pleasure to work with him and to work with his group in IMS. Moreover, I appreciate very good knowledge of Prof. T. Suzuki about the modern and contemporary techniques for ultrafast phenomena study in molecules, which allows to him to predict a delivering of most appropriate apparatus and experimental arrangements for performing the prestigious research

work in IMS. Thus, it is possible to cover most perspective scientific topics in this area. I much appreciate his politeness and wonderful atmosphere to work in Prof. T. Suzuki's group.

I think, it is important that Okazaki National Research Institutes (N. R. I.) offer good conditions for a fruitful scientific work as well as for living. I came this Autumn, 1999, together with my wife, who will stay for three months in Japan. We are much satisfied from the furnished apartment and from all living facilities arranged in IMS, Okazaki. Thus, all mode domestic problems are solved, and therefore, every visiting scientist is able to carry out his work in the best way.

If we look for both living and research facilities in IMS, Okazaki, I can conclude that here is one of the best places to work hard and to get new interesting results in science. During my carrier, I had already opportunity to work for seven months in Blackett Laboratory of Imperial College, London; also I worked for a period of one year in Quantum Optics Laboratory, Ecole Polytechnique, Paris, France; I worked for some time in Russia *etc.* But I consider, that Okazaki in Japan gives the best living facilities and most perspective research work, when comparing with all other countries. IMS has good traditions to keep strong interest for most contemporary fields of science, to maintain good atmosphere for the work and perfect relations between colleagues in the group, in the IMS. You pass all the day in the Institute and it is a pleasure to use all our efforts and to do our best in order to get a success and new

original results in science. It is quite substantial, that we have very good Library in N. R. I., one of the best in the area. This is a Library, which is equiped with reach scientific literature with the most important scientific Journals from USA, UK, Holland etc. The exchange between Japanese libraries allows us to be acquainted and to use a lot of new books and scientific monographies in English, appeared recently. At the beginning, the Japanese language is a great challenge for us, since it takes a lot of time to learn it. That is why we use to read in English. But gradually, when some visitor is acquainted with your country, the Japanese people and the language here become closer, your guest likes and loves the country of Japan more and more.

In Okazaki, it is possible to participate in some scientific forums, since quite often various International conferences are organized on the theritory of N. R. I. and of IMS especially. In this way, we can contact with eminent scientists from USA, France and from other countries. But at the same time, we could attend the National Japanese conferences in order to contact with most advanced scientific centers or with the Applied research centers in Japan.

Good tradition is the organizing of regular weekly English seminars in the group, which we call group-meetings. This is a way to exchange scientific information between the colleagues who are involved into the problems which are in one and the same field of research work, and very close each to other. This helps to look more carefully in details, to predict the best

development in right direction, and to get faster good results. Such discussions between collaborators in our international group on the English seminars keep our strong interest on new topics and our enthusiasm to speed up the solution of the problem.

I know, that the Okazaki N. R. I. is popular among the scientists from other countries. I have personnal impressions of the great experience of N. R. I. staff when working mutually with foreign visitors. I think, that the good atmosphere in the group and in Laboratories, and our current mutual work during these months in IMS will create a good basis for future and longer scientific collaboration.

When considering the topics of the research work here in IMS, I think that there are a few Institutes in the world and there are a few scientists, who work successfully onto similar perspective problems. It will give us the hopeness that the results will be new and they would be of enough priority.

My impression is, that N. R. I. and IMS use much efforts and strong scientific potential in the research work for many past years, which allows them to achieve here results of very high level. Okazaki N. R. I. is one of the best scientific centers in Japan. But, by my opinion, we could even tell that the N. R. I. become one of the first priority scientific centers in all over the world.

## レーザー研究論文賞

平等 拓範 助教授

## 日本化学会化学技術有功賞

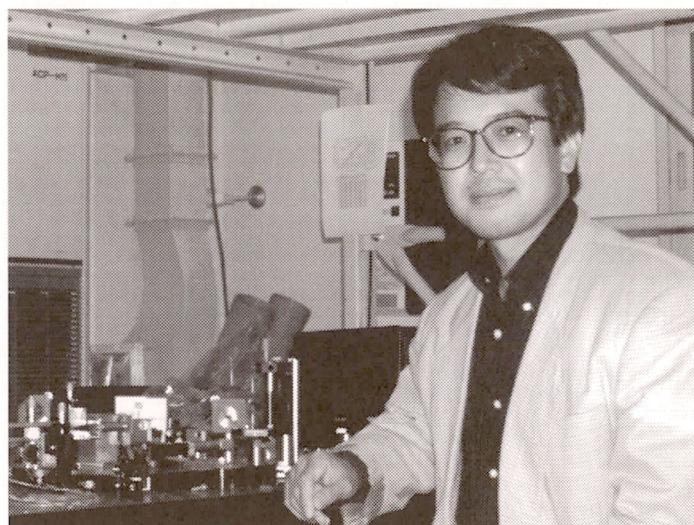
西本 史雄 氏



## 平等拓範助教授に レーザー研究論文賞

第23回レーザー研究論文賞（Medal for Review Paper）が分子制御レーザー開発研究センターの平等拓範助教授に授与されました。本賞は「会誌『レーザー研究』に発表された優秀なオリジナル論文及び解説論文の著者に贈呈する賞」であり、レーザー分野におけるパイオニア的研究が対象となっています。受賞論文のタイトルは「マイクロチップ固体レーザー（レーザー研究 26, 847-854 (1998)）」であり、平等助教授の多年にわたるマイクロチップレーザーの業績が改めて評価されたものともいえます。なお「マイクロチップレーザー」は平等助教授の造語ですが、この言葉が今日世界的にこれだけの市民権を得たことが十分な証明にもなっています。

実質的な体積が $1\text{ mm}^3$ 程度と、半導体レーザーに匹敵するマイクロチップレーザーは、半導体レーザーの高効率、長寿命特性を引き継いだうえ低次の縦、横モード特性が得られ易く、低雑音、高安定動作が期待できる。またマイクロチップレーザーはエネルギー蓄積効果に優れているためQスイッチ発振やモードロックによる短パルス化も容易となる。半導体レーザー励起固体レーザーとして、Nd:YAGを用いた研究が主流であった1990年当時、平等助教授は同時期のレーザー材料見直しの流れの中で材料評価の特性指数を比較検討し、結晶成長技術がまだ確立



していなかったNd:YVO<sub>4</sub>に着目した。この材料をマイクロチップ固体レーザーへ初めて適用し、半導体レーザー励起による高効率単一縦モード発振に成功した。さらに、低雑音高精度計測等の応用に非常に重要なモードホップフリーの広帯域波長可変性も最初に実証した。またこの時期に、新材料開発の指針となるマイクロチップレーザーモデルの提案も行っている。加えて、Nd:YVO<sub>4</sub>の蛍光特性が、Nd:YAGに近いことを利用した光注入同期の可能性に着目し、多重縦モード発振ではあるが高出力なNd:YAGレーザーを、マイクロチップNd:YVO<sub>4</sub>レーザーでインジェクションシーディングすることにより、発振周波数特性が制御できることを最初に実証した。さらに、マイクロチップレーザーの低雑音化、高安定化を図るとともに、光通信に重要とされる $1.3\text{ }\mu\text{m}$ 帯の発振特性の検討なども行った。このように、平等助教授は、提案したNd:YVO<sub>4</sub>マイクロチ

ツプレーザーの高性能化や応用を積極的に推進してきた。論文ではこれらの経緯と開発指針として提案してきたモデルについて詳しく記述されている。最近では安価で成型性に優れたセラミックレーザー材料の開発も行っており、レーザー特性とプロセスパラメータの関係を明らかにしつつある。この材料は組成可変範囲が広いことや多機能素子の集積化が可能であることから国内外を問わず注目されており、材料分野への貢献も大きい。

平等先生は飽くなき好奇心をもち、レーザー材料の開発、非線形波長変換の効率化、レーザー応用分野の開拓、等活発に境界領域へ進出しており、従来分野の強化をはかりつつ新規分野への展開を行っています。氏の今後ますますの活躍をお祈り申し上げます。

(栗村 直 記)

## 西本史雄氏に 日本化学会化学技術有効賞

平成11年度、日本化学会化学技術有効賞が技術課、西本史雄氏の“分子科学研究のためのスーパーコンピュータセンター運用管理技術の構築”に対して授与された。分子科学研究所の一員として誠に喜ばしい限りであり、ここに西本氏の略歴と業績内容を紹介する。

西本史雄氏は、昭和53年に名古屋大学大型計算機センターから分子科学研究所電子計算機センター

に転任し、初代センター長の諸熊教授、柏木助教授とともに昭和52年に設置された電子計算機センターの立ち上げに参加した。昭和54年、最初の汎用大型計算機の導入、その後の数回にわたるハードウェア、ソフトウェアの更新を経て、昭和61年にはセンター初のスーパーコンピュータの導入を行うなど、運用管理技術の開発に中心的な役割を果たしてきた。さらに昭和63年、平成6年とスーパーコンピュータの更新にも携わった。

### ①大型汎用計算機の導入と運用管理技術

同センターには昭和54年1月 HITACH M180 2台からなる大型汎用計算機が導入された。分子科学の大型計算を可能にする大学共同利用のセンターとして役割を果たすため、西本氏は日立製作所の協力を得て長期にわたる連続無人運転を世界で初めて可能とする運転管理システムを新たに開発した。このような運転管理システムは、当時の汎用計算機には付属しておらず、西本氏らの開発したシステムが、東大・北大をはじめ国内の大型計算機センターにも導入されるようになった。また当初数年間は職員数がきわめて少ないためシステム及び運用管理のソフトウェアは人手を要しない工夫が求められ、西本氏は計算機の利用者登録データベースの開発と運用管理に必要なプログラムを開発整備し、我が国の分子科学・計算化学研究に対する寄与は絶大である。

### ②スーパーコンピュータの導入と運用管理技術

昭和61年1月、かねてから分子科学研究者の夢であったスーパーコンピュータが同センターに導入



された。同センターのCPU使用効率は極めて高水準であり、大学計算機センターでは実行が困難な分子科学の大規模理論計算などを行うために、メモリ等の計算機資源を効率的に利用することはきわめて重要で、そのためOSの機能であるジョブスケジュールの新方式が開発された。

西本氏はジョブ及びジョブスケジュールに関する情報を研究者がすべて把握できるようなプログラムを開発し、メモリも含めた総合処理性能をさらに向上させた。また、ジョブの処理性能にファイルの入出力処理及びCPUの時間分割単位が影響を与えるが、その動作を解析し最適な連続処理単位を求め、総合処理性能をさらに向上させた。

### ③専門的技術による研究支援、研究のしやすい環境の整備

同センターでは専用回線及び一般電話回線を用いた研究所外からの計算機利用を早期に実現させたが、日立製作所の協力を得て西本氏は計算結果の出力検索、編集システム（SOM）を開発した。このシステムの完成により計算結果の確認が簡単にできるだけでなく、検索、編集、整理、格納を行う作業の面で研究所内外を問わず研究能率を大幅に向上させた。西本氏はその後、ネットワークが発達途上の当時の計算機遠隔利用のための統合システムとして、研究上最も有用な編集システムとして発展させた。

以上のように西本史雄氏は長年にわたって電算機技術の向上に向けて研鑽をつみ、電子計算機技術を

化学の分野に普及する事に努めると共に、計算機の有効利用に多くの実績をあげた。西本氏が研究所内外の研究者が文字通り、1年中24時間、安心して最高性能の計算機を利用できる環境を20年以上にわたって維持してきた業績は、高く評価されている。そしてその成果をもって分子科学・計算化学の研究等を支援し、化学研究の推進に大きく貢献した。ここで、西本氏の今後のますますのご発展を祈願し、お祝いの言葉とさせていただきます

(青柳 瞳 記)

## 電子状態動力学研究部門 MÜLLER-DETHLEFS, Klaus教授

Klaus Müller-Dethlefs 教授（英国 York 大物理化学主幹教授）は ZEKE 光電子分光法（ZEro Kinetic Energy Photoelectron Spectroscopy）を開拓した研究者として著名な研究者である。この ZEKE 光電子分光法はイオン化光照射と光電子抽出電場の間に大幅な遅延時間を置くことでしきい光電子（運動エネルギーゼロの電子）を選択的に検出するユニークな発想に基づき生まれた方法であり、サブ meV の分解能を有する唯一の光電子分光法である。同教授はこの方法を用いたベンゼン、アンモニア、水素結合クラスターなど多岐にわたるカチオンの振動回転分光を行っており、また、ZEKE 光電子分光法のメカニズム解明として多原子分子の高励起リュードベリ状態の電場イオン化に関する詳細な研究を行っている。

Müller-Dethlefs 先生が開拓した ZEKE 光電子分光法はこの方法に関する単独の国際会議（International Conference On Very High Resolution Spectroscopy with Photoelectron）が継続的に開催されており、世界的にも益々盛んになりつつある。また同教授は ZEKE 光電子分光法にのみならずクラスターや多光子イオン化に関する国際会議で指導的な役割を果たしている。分子科学研究所の外国人客員教授として本年 7 月から 10 月まで滞在され、ZEKE 光電子分光に留まらず、時間分解 Raman 分光、赤外-紫外二重共鳴分光に関する共同研究を行っている。

Müller-Dethlefs 先生はドイツ国籍であるが、Ph.D は英国で取得し、パリ大で博士研究員、ZEKE 光電子分光法を見出した時はミュンヘン工科大の研究員、そして現職は英国というように、EU 時代を象

徴するような御経歴である。また、Müller-Dethlefs 先生は大変ユーモアは大変ユーモアにあふれたお話をされる先生であり、分子研コロキウムや分子構造討論会の招待講演でも、英語講演にもかかわらず聴衆が大爆笑するなど、魅力的なご講演を記憶されている方も多い。お酒や料理に関する造詣も深く、若手研究者を食事にさそっては研究に限らず楽しいお話を聞かせて下さっている。特に“ギネス・コンファレンス”と称する私設パーティーは国際会議の夜の名物となりつつあるが、分子研滞在中にも「第 1 回日本ギネスコンファレンス」と称して英国から持参されたビールによりグラス形状によってはビールの泡が沈む事を実証し、愉快な頭の体操を披露された。研究の活力の源を垣間見ることができ、大いに刺激された次第である。

（藤井正明 記）



## MARKOSYAN, Ashot S.

電子構造研究系分子エネルギー変換研究部門 客員教授  
(相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 井上グループ)

Graduated from the Erevan State University, Armenia (1970). Ph.D. in physics of magnetic phenomena from M.V. Lomonosov Moscow State University (1975). Sci. D. in physics of magnetic phenomena from M.V. Lomonosov Moscow State University (1989). Presidential stipend for outstanding Russian scientists (1992-1995).

Staff member at the Laboratory of Magnetism, Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University (since 1977). Deputy head of the laboratory (1991-1997). Leading Researcher at the Laboratory of Magnetism and Senior Scientific Researcher at the Institute of Physics of the Czech Academy of Science (since 1998). Scientific work in France (L. Neel Laboratory of Magnetism, 1990-1991), Austria (Technical University of Vienna, 1995), Japan (IMS, Okazaki, 1997-1998). Visiting Professor of IMS (group of Prof. K. Inoue) since April 1999.

Research interests: magnetism of metallic systems, rare earth and 3d-magnetism, molecular magnetism, low-dimensional systems, magnetic structure. Research in IMS concerns the magnetic properties of one-dimensional and two-dimensional metal-radical self-assembled complexes and chiral molecular magnets.



## GHALSASI, Prasanna Shridhar

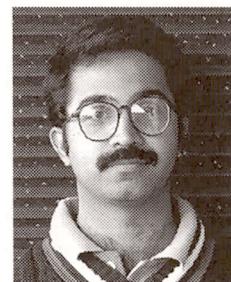
相関領域研究系相関分子科学第一研究部門 特別協力研究員

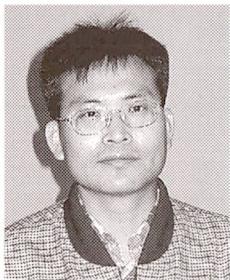
I am basically from PUNE, India. Studying for my doctoral course in MUMBAI (formally BOMBAY). The topic of my research is SYNTHESIS AND CHARACTERISATION OF NOVEL MOLECULAR MATERIALS, basically Ferromagnetic Property.

From April 1999 I started working with Prof. K. Inoue, Applied Molecular Science (I) as a Visiting Scientist.

**Present Work:** Higher Dimensionality and Supra molecular architecture are the requirements for the next Millenia in the growing materialistic world. Chirality in Biological assemblies work on similar principle is the foundation for the topic. We are trying to develop chiral molecule based radical compounds which may lead to novel properties.

**Aphorisms:** Being a stage artist, I enjoyed writing and directing the dramas. I play traditional Indian sports like KABBADI, and off course cricket.





### KIM, Younkyoo

分子構造研究系分子動力学研究部門 文部省外国人研究員

I was graduated from the chemistry department of Seoul National University, Korea, in 1981 and subsequently obtained M.S. in 1983 from the same University. In 1992, I received my Ph.D. degree in physical chemistry from Michigan State University, USA, under the guidance of Prof. G. T. Babcock and I also worked as a research associate in Michigan State University (1992 ~ 1993). Since 1993 I have been working as assistant professor (1993~1997) and associate professor (1997~ present) in the department of chemistry, Hankuk University of Foreign Studies, Korea. My research interests are the kinetics and dynamics for heme containing enzymes and the vibrational properties for metalloporphyrins.



### CHOI, Jong-Ho

電子構造研究系電子状態動力学研究部門 文部省外国人研究員

In 1995 I obtained a Ph. D. in chemical physics under the direction of Prof. M. Okumura at California Institute of Technology, Pasadena, U.S.A. and from 1995 to 1997 I worked with Prof. H. Reisler as a postdoctoral fellow at University of Southern California, L.A., U.S.A. I have been professor of chemistry at Korea University since 1997.

My research areas are focused on three areas: Gas-Phase Reaction Dynamics, Nanochemistry, and Fabrication of Thin Films.

- Dynamics research is carried out in the crossed molecular beam chamber. We apply the state-of-the-art laser spectroscopy and ab initio and statistical theories to the gas-phase reactions between atoms and molecules or radicals to probe reaction mechanisms at the microscopic level.
- We adopt a pulsed laser deposition (PLD) technique to synthesize nanocrystals such as nanowires and nanotubes under inert condition and characterize their structural properties through a variety of physical methods.
- An ionized cluster beam deposition (ICBD) method is utilized to deposit ultrapure luminescing organic and polymeric materials on substrates under high vacuum condition and their physical and chemical properties are investigated.



## OSHEROV, Vladimir

電子構造研究系分子エネルギー変換研究部門 客員教授

(理論研究系分子基礎理論第二研究部門 中村グループ)

### Scientific background, experience and positions:

1961- Institute of Chemical Physics, Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow Region, Ph.D, 1972-present time, Head of the Elementary Processes Theory Group, 1977-present time, Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Professor, 1980-1995 Institute of Physics and Technology, Moscow Region, Professor.1995, Institute for Molecular Science, Okazaki, Japan, Invited Professor.



### Fields of activity:

Radiationless transitions in molecules, vibronic relaxation. Electronic potentials in the vicinity of a degenerated molecular configuration. Classification of potential crossing types. Multidimensional nonadiabatic dynamics, conic and Renner crossing. Vibronic levels and spectra of symmetric molecule, semiclassical quantization of a nonadiabatic system. Dynamics of nonadiabatic ion-molecular and atom-molecular reactions, general surface hopping method. Dynamic symmetry. Tunneling linear reactions, selection rules for trajectories. Molecular reactions near thresholds and resonances, diffraction and tunneling. Exact analytical dynamics of nonadiabatic transitions.

### Permanent Professional Affiliation:

Institute of Problems of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka  
Moscow region, Russia.

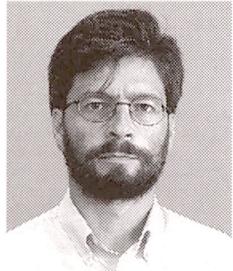
Research at IMS with Prof. H.Nakamura group concerns the nonadiabatic transitions theory and the dynamics of molecular nonadiabatic reactions.

## HEIDENHAIN, Sophie Barbara

分子物質開発研究センター 特別協力研究員

I was born in 1970 in Eppstein a small town near Frankfurt/Germany. I finished my studies in chemistry at the University of Konstanz and graduated from the same university in 1995 (Diplom). In 1996 I entered the doctor course in Nagoya University under the supervision of Prof. Yoshihiro Hayakawa working on Oligonucleotide Synthesis holding a Monbusho scholarship. In June 1999 I joined the group of Prof. Toshiyasu Suzuki in this Institute as a visiting research fellow supported by a Fellowship from the European Communion. I am working on the Synthesis of Electron Transporting Materials for Organic EL Devices.





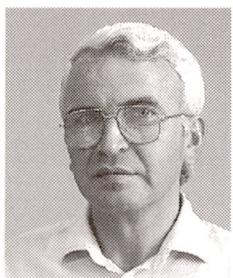
### SEIJO, Luis

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 客員助教授  
(相関領域研究系分子クラスター研究部門 三好グループ)

In 1984 I received my Ph. D. degree in Chemistry from the University of Oviedo, Spain. I specialized in Quantum Chemistry. After that, I enjoyed a two year post-doctoral stay with Prof. S. Huzinaga, at the University of Alberta, Edmonton, Canada. In 1988 I became Associate Professor of the Autonomous University of Madrid.

During the last decade I have been working on the development, monitoring, and application of: (1) reliable spin-free and spin-orbit relativistic Effective Core Potential methods for ab initio calculations on heavy element molecules, and (2) embedded-cluster techniques for the study of transition metal and other heavy element impurities in ionic crystals. In our group we have developed the Ab Initio Model Potential method as a common strategy for ECP and embedded-cluster calculations.

In collaboration with Prof. E. Miyoshi, I am implementing at IMS a two-step spin-orbit configuration interaction method developed in our group, which efficiently decouples the treatment of correlation and of spin-orbit effects. We are applying it to the theoretical study of ground and excited states of transition metal halide diatomic molecules.



### PAVLOV, Lubomir I.

極端紫外光科学研究系極端紫外光研究部門 客員教授  
(電子構造研究系電子状態動力学研究部門 鈴木グループ)

I graduated from the Quantum Electronics Department at Kharkov State University in Ukraine. I got my PhD in Physics in 1973 from the Wave Processes Department of Moscow State University. Since 1973 I worked as Assistant Professor in Faculty of Physics at Sofia University, Bulgaria. Since 1980 I was Associate Professor at Sofia University. I got my Doctor of Science (Dr. Sci.) degree in 1990 in the Institute of Electronics, Bulgarian Academy of Science. Since 1992 I am Professor in the Institute of Electronics. My research interest is on nonlinear laser spectroscopy of atoms, molecules and condensed matter; multiphoton processes in gas media; ultrafast phenomena under laser excitation. In 1983 I was Leverhulme

fellow in Imperial College, UK. In 1992-1993 I was Research Director in Ecole Polytechnique, Paris, France. My present work is in Prof. T. Suzuki's group at the Department of Electronic Structure, IMS.



## WHITHAM, Christopher James

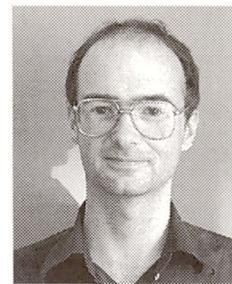
相關領域研究系分子クラスター研究部門 学振外国人招へい研究員

Born in 1962 in Yorkshire, England. Graduated in Chemistry at Oxford University in 1984. Ph.D. in 1988 at the University of Nottingham. From 1992, Research Fellow at the Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, Oxford. Royal Society Visiting Fellow at the IMS from November 1998 to March 1999 with Professor Shuji Saito; studying the rotational spectra of CuOH and AgOH molecules.

I am currently visiting Professor Keiichi Tanaka's research group until May 2000 as an IMS Fellow.

**Research Interests:** The high resolution spectroscopy of free radicals and clusters in molecular beams. In particular, studying the interactions between radicals and closed shell molecules, for example, NO-HF and O<sub>2</sub>-OCS. The aim is to use magnetic effects due to the unpaired electron to probe rearrangements in the electronic structure caused by intermolecular forces.

**Interests outside the lab:** Jazz and classical music. At present, learning Japanese, 実しくお願いします.





しげ まさ えい じ  
繁 政 英 治

極端紫外光実験施設 助教授

平成2年1月東北大学博士課程中退後、同年2月より高エネルギー物理学研究所助手。平成9年7月に東京大学にて博士（理学）の学位取得。5月からUVSORでお世話になっています。この3月まで約1年3ヶ月間、家族と共にフランスで過ごし、ワインと料理にすっかりはまりました。バカンスが懐かしい今日この頃です。運動不足解消のため、誰か昼休みに一緒に球蹴りしませんか？どうぞよろしくお願ひします。



てら だ み わ こ  
寺 田 三和子

分子制御レーザー開発研究センター 事務補佐員

今まで、ご近所のお友達と先生のご自宅でのケーキ教室にパン教室 あとはフラワーアレンジメントのお教室に通い、暇があれば東岡崎のスポーツクラブに通う日々。ところが今や時間に追われ、13年ぶりの仕事復帰に戸惑う毎日。皆様にいろいろご指導いただきながら、一日もはやく仕事に慣れて行きたいと思っております。どうぞ宜しく御願いいたします。



なか むら えい けん  
中 村 永 研

技術課第四技術班極端紫外光実験技術係 技術主任

北陸先端科学技術大学院大学から、1999年6月に転任してきました。次世代を念頭に仕事と私ごとにとりくみます。どうぞ宜しくお願いします。おやつクラブ、夕食クラブ、ケーキクラブ、温泉クラブ、その他ごちゃ混ぜの、五目クラブに所属しています。いろいろとお誘いいただければうれしいです。



いそ がい み ほ  
磯貝美穂

分子集団研究系物性化学研究部門 事務補佐員

平成11年3月に学習院大学を卒業後、生まれ育った岡崎へ帰り、6月からこちらでお世話になっています。大好きな岡崎の地で、大好きな研究所という雰囲気の中でマイペースにのんびりと過ごすことができて、とても幸せに思っています。好奇心旺盛で、研究所内外さまざまな所に出没していますので、お会いした際はどうぞよろしくお願ひします。



かた ぎり いずみ  
片桐泉

分子制御レーザー開発研究センター 部門補助員

平等先生のもとでお世話になっています。20年ぶりに名鉄東岡崎駅に降り立ち、また、10年ぶりにコンピュータに向かい、どちらの発展ぶりにも驚かされています。今はただ、「浦島太郎」のような心境ですが、ここでは幅広い知識が得られそうな気がしています。いろいろとご迷惑おかけしますが、がんばっていきたいと思いますので、よろしくお願ひいたします。



## 平成11年度9月修了学生及び学位論文名

## 平成11年度（10月入学）新入生紹介

## 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
欧阳 建勇	Spectroscopic Study of the Organic Conductors: Charge-Transfer Salts of BDT-TTP and DMTSA	理学	H11. 9.30
劉 振林	Ce <sup>3+</sup> Ion Activated Fluoride Crystals as Prospective Active Media for High-Power All-Solid-State Ultraviolet Tunable Ultrafast Lasers	学術	H11. 9.30

## 数物科学研究科（機能分子科学専攻）[課程博士]

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
岩瀬 正	Investigation of Ligation-Induced Structural Changes of Heme proteins by Mid-Infrared Spectroscopy	理学	H11. 9.30
光武 亜代理	THEORETICAL STUDIES OF CONFORMATIONS OF OLIGOPEPTIDES BY EFFICIENT SIMULATION METHODS	理学	H11. 9.30

## 数物科学研究科（機能分子科学専攻）[論文博士]

氏名	博士論文名	付記する専攻分野	授与年月日
二挺木 克洋	フタロシアニンおよびTCNQを用いたLangmuir-Blodgett膜の作成とその評価に関する研究	理学	H11. 9.30

## 平成11年度（10月入学）新入生

専攻	氏名	所属	研究テーマ
構造分子科学	王志宏	極端紫外光科学研究系	放射光励起Si表面反応のIRRASとSTMによる解析

# ピコ秒・フェムト秒ダブルビーム連続波長可変光源システム

中林孝和、西信之



超高速分光法において、過渡種を作るポンプ光の波長と過渡種からの信号を測定するプローブ光の波長を、一つのレーザーシステムで自由に選択することができれば、その応用範囲が急速に広がることは間違いない。また、時間分解能とエネルギー分解能とは不確定性原理の関係で結ばれているため、ダイナミックスのみを測定する場合は、フェムト秒レーザーが有用であるが、過渡種の振動スペクトルの測定にはピコ秒レーザーが必須となる。今回これらの要求を満たすために、①1 kHzの繰り返し周波数で  $1 \mu\text{J}$  以上の強度を保ち、②紫外から赤外までポンププローブの実験ができるように二色で独立で連続波長可変であり、③ピコ秒レーザーとフェムト秒レーザーとが同期する、新しいレーザーシステムを導入したので以下に報告する。

図1にレーザーシステムのブロック図を示す。二台のフェムト秒モード同期チタンサファイアレーザー (ML Ti:Sapphire) を励起し、それぞれピコ秒およびフェムト秒の再生増幅器 (RGA) のシード光とした。再生増幅器の励起光源には、繰り返し周波数が 1 kHz の Qスイッチ cwNd:YLF レーザー (Q-sw Nd:YLF) を用いた。フェムト秒 RGA は、繰り返し周波数が 10 Hz の Qスイッチパルス Nd:YAG レーザー (Q-sw Nd:YAG) を用いた加段増幅も可能である。ピコ秒 RGA からの出力光は二つに分けられ、光パラメトリック発生・増幅システム (OPA) の励起光源として各々用いた。その際、片方はあらかじめ 2 倍波を発生させ、2 倍波励起の OPA とした。フェムト秒 RGA からの出力光も二つに分けられ、片方は OPA の励起光源に、もう片方は 4 倍波までの高

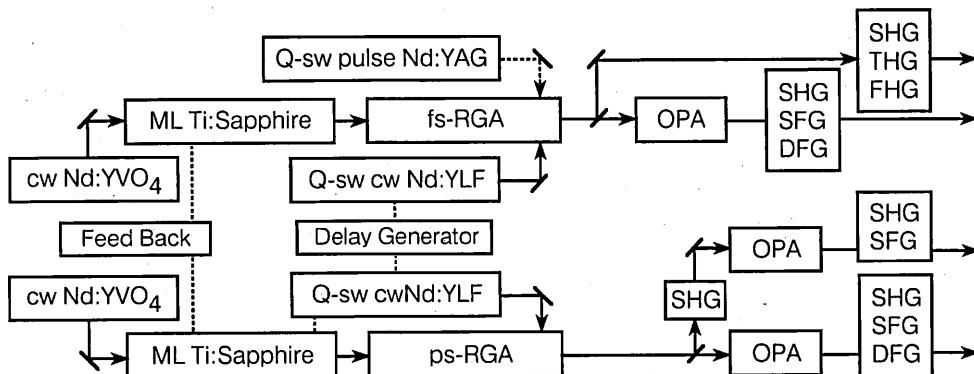


図1 ブロック図

cw Nd:YVO<sub>4</sub>, diode-pumped cw Nd:YVO<sub>4</sub> laser; ML Ti:Sapphire, femtosecond mode-locked Ti:sapphire laser; Q-sw cw Nd:YLF, Q-switched cw Nd:YLF laser; Q-sw pulse Nd:YAG, Q-switched pulse Nd:YAG laser; fs-RGA, femtosecond regenerative amplifier; ps-RGA, picosecond regenerative amplifier; OPA, optical parametric amplifier; SHG, second harmonic generator; THG, third harmonic generator; FHG, fourth harmonic generator; SFG, sum frequency generator; DFG, difference frequency generator

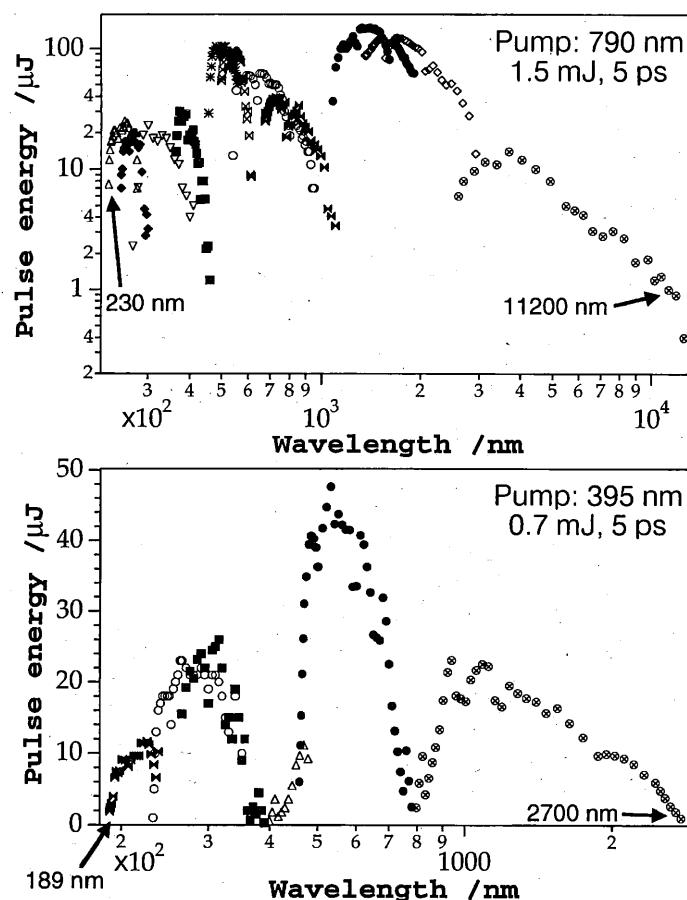


図2 ピコ秒OPAの波長域  
基本波励起(上)、二倍波励起(下)

調波発生に用いてある。位相制御方式のフィードバックシステムを用いて、2台のML Ti:Sapphire間のタイミングのずれを制御し、またML Ti:Sapphireの出力光を2台のRGAの外部トリガとした。

ピコ秒RGAからの出力は、波長790 nm、パルス幅約5 ps、パルスエネルギー約3 mJ、線幅約8 cm<sup>-1</sup>であった。ピコ秒OPAの波長域は、図2に示すように和周波や差周波と組み合わせることによって、基本波励起の方は230 nmから11200 nmまで、2倍波励起の方は189 nmから2700 nmまで、これら全領域において1 μJ以上の強度を保ったままほぼ連続波長可変である。よって、この2つのOPAを用いて、ポンプ光とプローブ光の波長をコンピューターを用いてほぼ自由に選択することができる。赤外光パルスは12600 nmまでの発振を確認している。

フェムト秒RGAからの出力は、波長800 nm、パ

ルス幅約200 fs、パルスエネルギー約2 mJであった。Q-sw Nd:YAGを用いた加段増幅でのパルスエネルギーは、約10 mJである。高調波は、3倍波において約120 μJ、4倍波において10 μJの発生を確認している。フェムト秒OPAは300 nmから10000 nmまで波長可変である。また、約4 ps程度のジッターでピコ秒RGAとフェムト秒RGAとを同期させることができる。

この装置の応用例として、本システムのピコ秒レーザー部分を用いたビフェニルとトランススチルベンのアセトニトリル中におけるピコ秒時間分解ラマンスペクトルを図3に示す。矢印で示してあるのが2光子で生成したカチオンのラマンバンド、その他は1光子で生成した最低励起一重項状態(S<sub>1</sub>)のラマンバンドである。ビフェニルの場合、S<sub>1</sub>とカチオンのラマンバンドがほぼ装置関数で立ち上がるのに

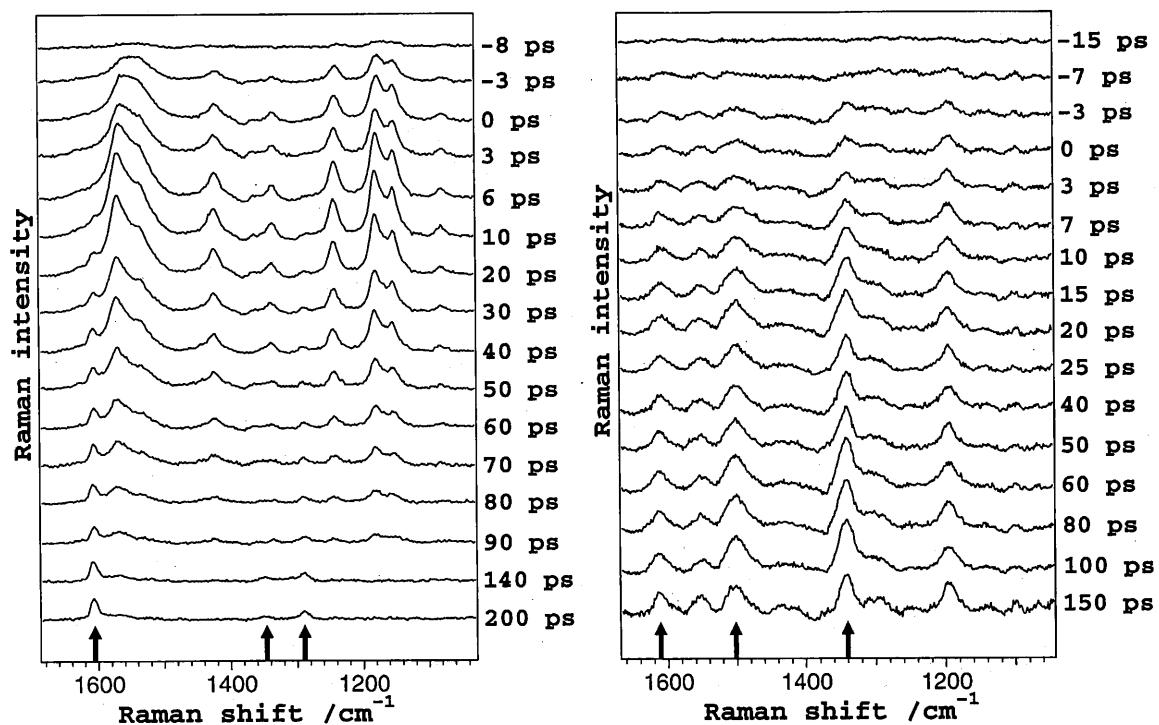


図3 アセトニトリル中におけるトランススチルベン（左）とビフェニル（右）のピコ秒時間分解ラマンスペクトル  
(プローブ光は529 nm (左) と 633 nm (右)、ポンプ光はともに262 nm)

対し、スチルベンではカチオンのラマンバンドの立ち上がりには遅れが観測され、立ち上がり時間は約16 psであった。この結果は、光励起直後の状態から溶媒和したカチオンが生成するまでに、トランススチルベンでは約16 psの時間が必要であることを示しており、溶媒和クラスターが生成するまでに構造変化のような大きな状態変化が起きていることを示唆している。今までには、カチオンの電子吸収帯に一致したプローブ光の波長とイオンを作るポンプ光の波長を充分な強度を保ったまま一つのレーザーでまかなうことが非常に難しいため、このような研究を行うことができなかった。しかし、本システムのピコ秒レーザー部分は、紫外から赤外まで二色で連続波長可変であるため、このような実験を行うことが可能となる。

本システムは分子研内のみならず、広く多くのグループに開放する予定である。パルス幅や波長の問題から今まで行うことのできなかった多くの実験に対して、本システムが有用な光源になることを願っている。

## 多体相互作用系へのアプローチ —ブレインストーミング—

1999年5月14日(金)～5月15日(土)  
岡崎コンファレンスセンター

5月14日(金)

12:30-12:50 受付

12:50 挨拶  
相田美砂子(広大理)

セッション1：生体系を多体相互作用の場として観る

座長： 相田美砂子(広大理)

13:00-13:40 溶液中におけるペプチドの構造  
岡本祐幸(分子研)

13:40-14:20 多体相互作用系における分子分極の効果  
中川節子(金城学院大)

14:20-15:00 トリプシンの活性のメカニズム  
米田照代(北里大薬)

15:00-15:40 医薬・農薬のクラシックおよび三次元  
QSAR  
赤松美紀(京大農)

15:40-16:00 休憩

セッション2：液相は強弱の多体相互作用の宝庫

座長： 鷹野景子(お茶大理)

16:00-16:40 反応の溶媒効果  
平田文男(分子研)

16:40-17:20 水溶液中における置換反応  
相田美砂子(広大理)

セッション3：気相でだって多体相互作用がある

座長： 鷹野景子(お茶大理)

17:20-18:00 イオン-分子衝突における多電子移行  
過程  
山口知子(都立工専)

18:15-20:15 懇親会

5月15日(土)

セッション4：固相における分子間相互作用を考える

座長： 占部久子(東京家政学院大家政)

- 09:00-09:40 結晶相光反応  
関根あき子(東工大理)
- 09:40-10:20 有機結晶の一次相転移  
菅原洋子(北里大理)
- 10:20-11:00 金属表面に吸着した分子間の相互作用  
川合真紀(理研)
- 11:00-11:10 休憩
- 11:10-11:50 種々の蛍光体の発光特性と構造との関係  
原園としえ(三菱化学横浜総研)
- 11:50-12:30 宇宙塵表面での化学反応  
高橋順子(国立天文台)
- 12:30-13:40 昼食
- セッション5：巨大分子はそのものが多体相互作用系
- 座長： 川合真紀(理研)

13:40-14:20 金属内包フラーレンの構造予測  
小林郁(都立大理)
- 14:20-15:00 C<sub>60</sub>の溶液中における運動  
三宅洋子(都立大理)
- 15:00-15:40 かご型シロキサン化合物  
工藤貴子(群馬大工)
- 座長： 菅原洋子(北里大理)

15:40-16:10 総合討論  
講演者以外の話題提供を含む

## 若手分子科学研究者のための 物理化学研究会

平成11年6月7日(月)

- 13:30-13:35 開会の辞  
佐藤信一郎(分子研)
- 13:35-14:05 液相の時間分解振動分光－振動エネルギー緩和過程を中心に－  
水谷泰久(分子研)
- 14:05-14:35 分光学の基礎  
藤井正明(分子研)
- 14:35-15:05 化学反応の動力学とカオス  
戸田幹久(京大院理)



15:05-15:35	休憩	15:30-16:10	フェムト秒コーヒーレント制御 三沢和彦
15:35-16:05	気相化学反応の動力学 藤村 陽 (京大院理)	16:10-16:50	散逸系ダイナミクスの量子最適制御 大槻幸義
16:05-16:35	多参照理論の基礎と現代原子価結合 (Modern Valence-bond) 法 中野晴之 (東大院工)	16:50-17:30	多準位系におけるコーヒーレント分布移動 中島 隆

### 懇親会

6月8日(火)

座長： 高塚和夫

9:00-9:40 周期的に駆動される2準位系の動力学  
萱沼洋輔

9:40-10:20 レーザーによる分子過程制御の新手法  
中村宏樹

10:20-10:40 休憩

座長： 大森賢治

10:40-11:20 コヒーレンスと散逸： 少数分子集団の高速時間分光から何を知るのか？  
大島康裕

11:20-12:00 金属クラスターのダイナミクス  
寺寄亨

12:00-13:30 昼休み

座長： 玉井尚登

13:30-14:10 溶液中の多原子分子における分子振動エネルギーの非平衡挙動  
岡本裕巳

14:10-14:50 僕らが最近見たこと・知ったこと  
田原太平

14:50-15:20 休憩

座長： 岡本裕巳

15:20-16:00 ヘム蛋白質における高速現象  
北川禎三

16:00-16:40 凝縮系の化学反応と分子運動  
玉井尚登

16:40-17:20 Transition state spectroscopy of surface photodesorption: Cs/Cu(111)  
Hrvoje Petek

Concluding Remarks  
寺寄 亨

## 分子及び分子小集団の超高速動力学

1999年6月7日(月)、8日(火)  
岡崎コンファレンスセンター小会議室

6月7日(月)

座長： 鈴木俊法

9:00-9:40 高強度非共鳴レーザー光を用いた中性分子の配向とその観測  
酒井広文

9:40-10:20 強レーザー場中の分子の電子動力学  
河野裕彦

10:20-10:40 休憩

座長： 河野裕彦

10:40-11:20 強光子場の化学  
山内 薫

11:20-12:00 フェムト秒レーザーの高次高調波とその応用  
関川太郎

12:00-13:00 昼休み

座長： 大島康裕

13:00-13:40 光学衝突で探る超高速原子分子ダイナミクス  
大森賢治

13:40-14:20 角度・エネルギー・時間分解光電子分光と振動スペクトル・非断熱過程  
高塚和夫

14:20-15:00 フェムト秒時間分解光電子画像分光  
鈴木俊法

15:00-15:30 休憩

座長： 山内 薫

## 大気イオンクラスターの 化学とその応用

1999年6月16日(水)・17日(木)  
岡崎コンファレンスセンター 小会議室

6月16日(水)

13:00 受付

13:30 開会

座長： 中江 茂

13:35-14:10 対流圏における大気イオンの化学過程  
とその役割  
長門研吉（分子科学研究所）

14:10-14:45 連立発展方程式による多成分大気イオ  
ン種の時空間解析  
飯沼恒一（東北大・院・工）

14:45-15:00 休憩

座長： 長門研吉

15:00-15:35 大気中ナノ粒子の計測とイオン誘発核  
生成の解析  
瀬戸章文（工業技術院・機械技術研究  
所）

15:35-16:10 生成イオンの移動度解析  
原健児（東京理科大・理）

16:10-16:45 気中イオンの分離と測定  
尹 治文（金沢大・工）

16:45-17:00 休憩

座長： 足立元明

17:00-17:35 光電効果で発生した負イオンによる気  
中浮遊微粒子の除去  
島田 学（広島大・工）

17:35-18:10 クラスターの構造と成長速度  
岡田芳樹（理化学研究所）

18:30 懇親会

6月17日(木)

座長： 飯沼恒一

9:00-9:35 水クラスターとその錯体：量子化学計  
算で何ができるか  
岩田末廣（分子科学研究所）

9:35-10:10 超高純度ガス中の水分クラスターの  
測定  
溝上員章（株式会社 日本エイピーアイ）

10:10-10:45 CVD成膜プロセスにおけるイオンの応  
用  
奥山喜久夫（広島大・工）

10:45-11:00 休憩

座長： 奥山喜久夫

11:00-11:35 電子ビームによる揮発性有機物を含む  
モデル排ガスからのエアロゾル生成  
箱田照幸（日本原子力研究所・高崎研  
究所）

11:35-12:10 SO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O系混合ガスにおけるイオン誘  
発核生成  
足立元明（大阪府立大・先端科学研究  
所）

## 分子クラスターの研究に おける分光学の役割： その現状と将来

1999年7月22日(木)・23日(金)  
岡崎コンファレンスセンター

7月22日(木)

13:30 *Opening Remark*  
茅 幸二（分子研）

13:40 Rayleigh wing spectraとクラスター  
西 信之（分子研）

14:00 赤外-紫外二重共鳴分光法による溶媒  
和ナフトールクラスターの振動分光  
藤井正明（分子研）

14:40 水を含むアニリンクラスターの赤外分  
光  
中永泰介（物質研）

15:00 休憩

15:30 金属原子-有機分子系のクラスター内  
電子移動  
美齋津文典（東北大院・理）

15:50 無極性分子の作る分子クラスター  
金森 英人（東工大院・理）



16:10	N <sub>2</sub> …COのマイクロ波スペクトル——一オルトN <sub>2</sub> とパラN <sub>2</sub> 川嶋良章（神奈川工大）・大島康裕・遠藤泰樹（東大院・総合）	15:20	休憩
16:30	芳香族クラスターの溶媒和構造とクラスター内ダイナミックス 大島康裕（京大院・理）	15:30	分子クラスターとテラヘルツ分光 山田耕一（融合研）
17:10	(H <sub>2</sub> O) <sub>n</sub> とM(H <sub>2</sub> O) <sub>n</sub> (M = Li, Na)に見いだされる特異な(OH)-e-(HO)結合と振動スペクトル 鶴沢武士・岩田末広（分子研）	15:50	Van der Waals 振動遷移の測定と分子間ポテンシアル 田中桂一（分子研）
17:30	移動		
18:30-20:30	懇親会		
7月23日（金）			
9:00	分子クラスターの構造と振動緩和ダイナミクス 江幡孝之（東北大院・理）		
9:40	Arクラスターを用いた単分子イオンの赤外振動分光 藤井朱鳥・藤巻英司・江幡孝之・三上直彦（東北大院・理）		
10:20	希ガス-分子イオンクラスターのFTMW分光 関 浩二・遠藤泰樹（東大院・総合）		
10:40	休憩	8:00	Breakfast
11:00	固体水素中の分子クラスターの高分解能分光 百瀬孝昌（京大院・理）	9:00	<i>Opening, Introduction to the symposium:</i> H. Nakamura & K. Mitsuke
11:40	錯体の分光学と励起状態ダイナミクス 渋谷一彦（東工大院・理）	[Session I]	Synchrotron radiation photoionization - Pursuing completeness 1
12:00	NaCl-(H <sub>2</sub> O) <sub>n</sub> の構造と水和課程 溝口麻雄・遠藤泰樹（東大院・総合）	Chairperson: Nobuhiro Kosugi	
12:20	昼食	9:10	Complete photoionization experiments with polarized atoms Peter Zimmermann (TU-Berlin, Germany)
14:00	分子間相互作用が分子内水素結合に及ぼす効果 関谷 博（九大院・理）	9:50	Complete photoionization experiments on atomic calcium Alberto De Fanis (Univ. of Southampton, UK)
14:20	X-(H <sub>2</sub> O) <sub>n</sub> 錯体の理論振動スペクトル：温度効果 佐藤克彦・岩田末広（分子研）	10:30	Coffee & tea break
14:40	ラジカル錯体、Ar-SH、のFTMW分光と分子間相互作用 住吉吉英・遠藤泰樹（東大院・総合）	[Session II]	New fields developed with advanced laser systems
15:00	Ar-HBrのファンデルワールス変角振動バンドのサブミリ波ジェット分光 原田賢介（分子研）	Chairperson: Masahiro Kawasaki	

## 新世代光源を用いた 励起分子ダイナミクス探索の 新たな展開 **Photo-Dynamics and Reaction Dynamics of Molecules**

1999年7月31日（土）～8月2日（月）  
岡崎コンファレンスセンター

Saturday, 31st July

- |                                |  |
|--------------------------------|--|
| 8:00                           | Breakfast  |
| 9:00                           | <i>Opening, Introduction to the symposium:</i><br>H. Nakamura & K. Mitsuke                               |
| [Session I]                    | Synchrotron radiation photoionization - Pursuing completeness 1  |
| Chairperson: Nobuhiro Kosugi   |  |
| 9:10                           | Complete photoionization experiments with polarized atoms<br>Peter Zimmermann (TU-Berlin, Germany)       |
| 9:50                           | Complete photoionization experiments on atomic calcium<br>Alberto De Fanis (Univ. of Southampton, UK)    |
| 10:30                          | Coffee & tea break   |
| [Session II]                   | New fields developed with advanced laser systems   |
| Chairperson: Masahiro Kawasaki |  |
| 10:50                          | Control of time-dependent nonadiabatic processes by an external field<br>Yoshiaki Teranishi (IMS, Japan) |

11:25	Dynamics of light-dressed molecules in intense laser fields Akiyoshi Hishikawa (Tokyo Univ., Japan)	[Session VI] Synchrotron radiation photoionization - Pursuing completeness 2 Chairperson: Kiyoshi Ueda
12:00	Influence of laser coherence on atoms and molecules: The role of the phase of the fields Takashi Nakajima (Kyoto Univ., Japan)	10:35 On recent advances in molecular photoionization studies Nikolai A. Cherepkov (State Univ. Aerospace Instrum., Russia)
12:40-14:00	<i>Lunch</i>	11:15 The complete characterization of photoionization—recent progress in atomic and molecular spin resolved photoionization and Auger electron spectroscopy Ulrich Heinzmann (Univ. Bielefeld, Germany)
14:00-14:10	<i>Symposium Photograph</i>	11:55 Photoelectron scattering and interference effects in molecular photoionization Uwe Becker (Fritz-Haber-Institut, Germany)
[Session III]		12:35-14:00 <i>Lunch</i>
14:10-16:00	<i>Poster Presentations A (with coffee and tea)</i>	[Session VII]
[Session IV]	Photoexcitation and dissociative recombination—Decay of superexcited states Chairperson: Masatoshi Ukai	14:00-15:50 <i>Poster Presentations B (with coffee and tea)</i>
16:00	Spectator- and participant-like behavior of a Rydberg electron on predissociation of molecular superexcited states Yasumasa Hikosaka (KEK-PF, Japan)	[Session VIII] Wells and basins - Their effects on dissociation and reaction dynamics Chairperson: Koichiro Mitsuke
16:35	Branching ratios in dissociative recombination of polyatomic molecular ions Mats Larsson (Stockholm Univ., Sweden)	15:50 Double photoionisation at threshold Pascal Lablanquie (LURE, Orsay, France)
17:15	Dissociation of neutral doubly excited diatomic molecules above their ionization potential Wim J. van der Zande (FOM-Institute, The Netherlands)	16:30 van der Waals wells in chemical reaction dynamics David E. Manolopoulos (Oxford Univ., UK)
18:30	<i>Dinner</i>	17:10 Chemical reaction dynamics beyond the transition-state concept Kazuo Takatsuka (Tokyo Univ., Japan)
<b>Sunday 1st August</b>		
8:00	<i>Breakfast</i>	18:30 <i>Symposium Banquet</i>
[Session V]	Radical & transition-metal chemistry - Competing reaction channels Chairperson: Kenji Honma	<b>Monday 2nd August</b>
9:00	New directions in radical photochemistry and reaction dynamics Musahid Ahmed (Lawrence Berkeley National Lab., USA)	8:00 <i>Breakfast</i>
9:35	Transition metal chemistry in crossed beams: Reaction dynamics with unsaturated hydrocarbons H. Floyd Davis (Cornell Univ., USA)	[Session IX] Ultrafast intramolecular dynamics Chairperson: Satoshi Yabushita
10:15	<i>Coffee &amp; tea break</i>	9:00 Theoretical study of the dissociation reaction of HFCO Takeshi Yamamoto (Kyoto Univ., Japan)



- 9:35 Time-resolved photoelectron imaging spectroscopy on ultrafast excited state dynamics  
Toshinori Suzuki (IMS, Japan)
- 10:10 *Coffee & tea break*
- [Session X] Recent developments in the studies on bimolecular reactions
- Chairperson: Koichi Yamashita
- 10:30 Ab initio SOFA quantum dynamics for chemical reaction  
John Z. H. Zhang (New York Univ., USA)
- 11:10 State-specific differential cross section measurements for bimolecular reactions: Is the effort worth?  
Kopin Liu (IAMS in Taipei, Taiwan)
- 11:50 On use of the semiclassical initial value representation to include quantum effects in molecular dynamics simulations  
William H. Miller (UC Berkeley, USA)
- 12:30 *Conclusion, Summary of the symposium*
- 13:00 *Lunch*
- Saturday 31st July, 14:10 - 16:00
- [Session III] Poster Presentations A
- A-1 A high resolution angle resolved electron spectroscopy study of the 5dnp Rydberg series in Ba  
K. Ohmori, H. Chiba, K. Amano, K. Ueda, Y. Sato, John B. West, K. J. Ross, and M. Aymar
- A-2 Laser Photoionization electron spectroscopy of polarized rare gas atoms excited with synchrotron radiation  
Kota Iwasaki, Y. Hikosaka, and K. Mitsuke
- A-3 The gerade-ungerade symmetry breaking and keeping in the K-shell excited states of CO<sub>2</sub> and C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>  
Jun-ichi Adachi, Y. Takata, E. Shigemasa, N. Kosugi, and A. Yagishita
- A-4 Photodissociation of ozone in the K-edge region  
Tatsuo Gejo, K. Okada, T. Ibuki, and N. Saito
- A-5 Formation of positive ion pairs from acetone photoexcited in inner-shell hole states  
Isao H. Suzuki and N. Saito
- A-6 Quadruple coincidence study of all four particles in the photon induced complete fragmentation of D<sub>2</sub> molecules  
Horst Schmidt-Boecking et al.
- A-7 High resolution pulsed field ionization photoelectron spectroscopy using third generation undulator synchrotron radiation  
Yang Song, G. Jarvis, M. Evans, and C. Y. Ng
- A-8 Zero-pressure lifetime and self-quenching studies of NO<sub>2</sub> at 399 - 416 nm.  
V. Sivakumaran, K. P. Subramanian, and Vijay Kumar
- A-9 Photofragment emission yield spectroscopy of acetylene in the D, E, and F states by VUV and IR-VUV double resonance laser excitations  
Mitsuhiko Kono, K. Hoshina, A. Iwasaki, and K. Yamanouchi
- A-10 Determination of the heat of formation of O<sub>3</sub>,  $\Delta_f H^0$   
Nori Taniguchi, Kenshi Takahashi, Y. Matsumi, S. M. Dylewski, J. D. Geiser, and P. L. Houston
- A-11 Theoretical study on the non-adiabatic transitions in the photodissociation processes of Cl<sub>2</sub> and HCl, and the orientation of the fragment Cl by the spin-orbit CI method  
Yukako Asano and S. Yabushita
- A-12 Theoretical study on the transition state spectroscopy of Xe + I<sub>2</sub> by the spin-orbit CI calculations  
M. Kimura and Satoshi Yabushita
- A-13 Reaction dynamics of ground state and electronically excited neutral transition metal atoms with alkanes  
H. Stauffer, R. Hinrichs, P. Willis, and Floyd Davis
- A-14 Dynamics of the reaction between N<sub>2</sub>O and X(<sup>1</sup>D) (X = O or S) - Vibrational state distribution of the product NO  
Hiroshi Akagi, Y. Fujimura, and O. Kajimoto
- A-15 Control of photofragment velocity anisotropy by optical alignment of CH<sub>3</sub>I  
A. Sugita, M. Mashino, Masahiro Kawasaki, Y. Matsumi, R. J. Gordon, and R. Bersohn
- A-16 Angular distributions of Auger electrons from fixed-in-space CO molecules  
Eiji Shigemasa, R. Guillemin, K. LeGuen, N. Leclercq, C. Miron, M. Simon, and P. Morin
- Sunday 1st August, 14:00 - 15:50
- [Session VII] Poster Presentations B
- B-1 Partial electron yield spectrum of N<sub>2</sub>: Doubly excited states at the K-shell threshold  
M. Neeb, A. Kivimaki, B. Kempgens, H. M. Koeppe, K. Maier, A. M. Bradshaw, and Nobuhiro Kosugi

- B-2 Nuclear motion in the core-excited state of  $\text{BCl}_3$  probed by resonant Auger electron spectroscopy  
Kiyoshi Ueda, Y. Muramatsu, Y. Shimizu, H. Chiba, Y. Sato, T. Hayaishi, M. Kitajima, H. Tanaka, and S. Tanaka
- B-3 Laser-induced fluorescence excitation spectroscopy of  $\text{N}_2^+$  ( $\text{X}^2\Sigma_g^+, v = 0$ ) produced from  $\text{N}_2$  and  $\text{N}_2\text{O}$  by VUV excitation  
Masakazu Mizutani, H. Niikura, and K. Mitsuke
- B-4 State selective investigation of the threshold behavior of the neutral dissociation with excitation (NDE) of  $\text{O}_2$   
H. Liebel, Arno Ehresmann, S. Lauer, F. Vollweiler, H. Schmoranzer, G. Mentzel, K.-H. Schartner, O. Wilhelmi, and B. Zimmermann
- B-5 Formation and decay processes of superexcited hydrocarbons in the VUV range  
Kosei Kameta, K. Takeda, Noriyuki Kouchi, and Yoshihiko Hatano
- B-6 Photoionization and superexcited state of acetylene with the complex coordinate method  
Tomokazu Yasuike and S. Yabushita
- B-7 Multiple-PEPICO with COLTRIMS: A unique tool for complete analysis of molecular photo-fragmentation processes  
Ottmar Jagutzki, L. Spielberger, R. Doerner, V. Mergel, H. Schmidt-Boecking, A. Lafosse, J. C. Brenot, P. M. Guyon, J. C. Houver, M. Lebech, and D. Dowek
- B-8 Three-body coulomb explosion dynamics of  $\text{H}_2\text{O}$  in intense laser fields  
Shilin Liu, A. Hishikawa, A. Iwamae, and K. Yamanouchi
- B-9 Calculation of photoionization cross section of atoms in parallel electric and magnetic fields by using the complex coordinate method and Lanczos algorithm  
Hiroya Suno, L. Andric, T. P. Grozdanov, and Ronald McCarroll
- B-10 Application of statistical theories to photodissociation of benzene cluster ions  
Kazuhiko Ohashi and H. Sekiya
- B-11 Excited state dynamics of transition metal atom-rare gas atom clusters  
Y. Kawamoto and Kenji Honma
- B-12 Translational relaxation and electronic quenching of hot  $\text{O}(^1\text{D})$  by collisions with  $\text{O}_2$   
Nori Taniguchi, K. Hirai, Kenshi Takahashi, and Y. Matsumi
- B-13 Study of  $\text{He}^* + \text{F}_2$  reaction  
S. V. K. Kumar
- B-14 New way of controlling molecular processes by lasers  
Kuninobu Nagaya, Y. Teranishi, and H. Nakamura
- B-15 Angle resolved photoelectron spectroscopy of  $\text{O}_2$  ( $\text{a}^1\Delta_g$ ) with synchrotron radiation  
L. Beeching, A. De Fanis, J. M. Dyke, S. D. Gamblin, N. Hooper, A. Morris, and John B. West
- B-16 The semiclassical theory of scattering map systems  
Takaaki Onishi, A. Shudo, K. S. Ikeda, and K. Takahashi

平成11年度（前期）  
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703回		99年4月14日	アモルファス性有機電子輸送材料の開発	鈴木 敏泰
第704回		4月28日	慶應義塾大学でのクラスター化学	茅 幸二
第705回		5月19日	微視的な観点による分子性導体の金属－非金属転移：電荷局在とスピニ励起	中村 敏和
第706回		6月 2日	Femtosecond Electron Dynamics in Solid Surfaces	Yongli Gao
第707回		6月 9日	Organometallic Chemistry in the Gas Phase: High Resolution Spectroscopy of Metal Alkyl Compounds	L. M. Ziurys
第708回		6月16日	低配位高周期元素化合物の化学の新展開－「夢の高周期元素化合物」合成への挑戦－	時任 宣博
第709回		6月30日	ピコ秒指紋領域赤外分光法－電子励起状態の構造化学－	岡本 裕巳
	第19回	7月14日	数学的発想について－代数多様体とは	森 重文
第710回		9月 8日	Molecular Clusters: The New Chemistry of Non-Covalent Bonds	Klaus Müller-Dethlefs
第711回		9月22日	フェムト秒レーザー・電子ライナックによる極短量子ビームポンプ&プロープ分析	上坂 充

# 平成11年度（前期）共同研究

## 課題研究

化学反応に対する溶媒効果の分子論

分子科学研究所

平田 文男

## 協力研究

Protein Gの $\beta$ -シート構造に関する研究

奈良女子大学理学部

中沢 隆  
奥田 有香

OHCl系一重項状態に対する正確な量子力学的理論研究

北海道大学大学院理学研究科

田中 皓  
信定 克幸

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

金沢大学医学部

置塙 信行

紫外共鳴ラマンスペクトルによる銅蛋白質の局所構造解析

茨城大学理学部

高妻 孝光

ヘム分解酵素の共鳴ラマン分光

東北大学反応化学研究所

富田 肇

分子内振動励起によるクラスターイオンの光蒸発ダイナミックス

九州大学理学部

大橋 和彦  
岩橋 邦彦

トリフルオロ酢酸-水二成分溶液中に形成するクラスターの構造

佐賀大学理工学部

高椋 利幸  
松尾 大輔

ジメチルスルホキシド-水二成分溶液のクラスター構造

福岡大学理学部

吉田 亨次  
山口 敏男

赤外紫外二重共鳴分光によるアゾ芳香族水和クラスターの構造決定

京都大学大学院理学研究科

大島 康裕  
三井 正明

トルエン誘導体のPFI-ZEKEスペクトルの測定

東京工業大学大学院理工学研究科

市村 横二郎  
木下 真一

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

 $M_xPS_3(bipy)_y$  ( $M = Mn, Fe$ )系強磁性体のXPS

熊本大学大学院自然科学研究科

市村 憲司

高圧下におけるヨードアニルの絶縁体-金属転移の電子スペクトルによる研究

室蘭工業大学

城谷 一民  
林 純一

C60及びTTF系ドナー分子を用いた有機超伝導体の電子状態

京都大学大学院理学研究科

斎藤 軍治  
近藤 哲生

有機伝導体における電子転移の電気的磁気的解析

大阪大学理学部ミクロ熱研究センター

斎藤 一弥  
坏 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

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

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 卓三  
松井 元

二核金属錯体による酸素活性化機構の解明

金沢大学理学部

鈴木 正樹  
林 秀樹

1,3-ジイミン構造を有する複核鉄(II)錯体による二本鎖DNA同時切断

熊本大学薬学部

黒崎 博雅  
小池 審之

電子供与/受容性ビラジカルの電子状態制御

名古屋大学大学院工学研究科

石黒 勝也

遷移金属錯体をビルディングブロックとする層間化合物の構築

静岡大学理学部

川田 知京  
安立 一

有機強磁性体の研究

山口東京理科大学基礎工学部

木下 實

原子の電子状態の精密計算

青森大学経営学部

長内 有



Fe(CO) <sub>3</sub> の電子状態	北海道大学大学院理学研究科	野呂 武司
金属カルボニル陽イオン錯体の触媒作用に関する理論的研究	九州大学大学院総合理工学研究科	酒井 嘉子 茂木 孝一
分子クラスター・ファンデルクールス振動遷移の直接観測	九州大学理学部	田中 武彦 石黒 正純 今城 尚志
ドリフトチューブ内におけるイオン-分子反応の解析	東北大学大学院工学研究科	飯沼 恒一
ガス中で生成されるイオンの計測と評価	広島大学工学部	島田 学
ドリフトチューブ型イオン再結合チャンバーの性能評価	高知工業高等専門学校	高野 弘
亜鉛(II)ポルフィリンのS <sub>2</sub> 状態のフェムト秒時間分解発光・吸収	東京工業大学大学院理工学研究科	浅野 素子
ピコ秒時間分解ラマン分光法によるジベンゾ7員環化合物の電子励起状態の構造とダイナミックスの研究	早稲田大学理工学部	高橋 博彰 上田 敦弘
放射光とレーザーを併用した分子の真空紫外域の励起状態の研究	物質構造科学研究所	伊藤 健二 彦坂 泰正
有機イオン結晶DASTによるテラヘルツ波発生	東北大学電気通信研究所	伊藤 弘昌 四方 潤一
可視光ポンプ・遠赤外光プロープ分光法による化学反応ダイナミクスの研究	神戸大学理学部	富永 圭介
テラヘルツ光源用光学素子の開発	石川工業高等専門学校	瀬戸 悟
気体の遠赤外吸収スペクトルの測定 -圧力依存性-	千葉大学大学院自然科学研究科	齊藤 健一 西川 恵子
テラヘルツ電磁波透過測定による半導体ウェハにおけるキャリヤ密度分布の非接触測定	大阪大学超伝導エレクトロニクス研究センター	萩行 正憲 菜嶋 茂喜
フェムト秒光パルス励起テラヘルツ電磁波のスペクトル制御に関する研究	慶應義塾大学理工学部	神成 文彦
ZEKE光電子分光法による分子クラスターの光解離ダイナミクスに関する研究	九州大学理学部	関谷 博西 香織
Yb:YAGレーザーとMIMダイオードを用いたテラヘルツ光発生	富山大学理学部	松島 房和 小田島仁司
複素芳香環を用いた新しいπ共役系化合物に関する研究	姫路工業大学工学部	北村 千寿
ポルフィリン環の非平面化に伴なうヘムの物性変化	東邦大学医学部	中村 幹夫 大胡 恵樹
C <sub>60</sub> 錯体化合物の構造・物性・組成の解析	法政大学工学部	丸山 有成 鈴木 研二
ビス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	菊地 耕一 兒玉 健
パルスレーザーを用いたμ-アルコキソ鉄二核錯体パーオキソ付加体の光活性化	名古屋大学大学院理学研究科	廣田 俊貴士 奥野 貴士
生体金属集積場における小分子の変換	金沢大学大学院自然科学研究科	櫻井 武
生体内NOドナーとして機能可能なオキシム類の金属イオンへの導入	福島大学教育学部	大山 大

## 研究会

新世代光源を用いた励起分子ダイナミクス探索の新たな展開 東北大学科学計測研究所 上田 潔

分子会合体の研究における分光学の役割：その現状と将来  
若手分子科学研究者のための物理化学研究会  
多体相互作用系へのアプローチ－ブレインストーミング－  
分子及び小集団の超高速反応ダイナミクスに関する研究会  
大気イオンクラスターの化学とその応用

工業技術院産業技術融合領域研究所	山田 耕一
東京大学大学院理学系研究科	山内 薫
広島大学理学部	相田美砂子
分子科学研究所	鈴木 俊法
分子科学研究所	長門 研吉

## 施設利用 (I) 分子制御レーザー開発研究センター

波長可変レーザー蒸発法による超微粒子生成過程の研究  
強力赤外光による新材料の光耐力の測定  
不純物をドープした半導体の結晶構造相転移の研究  
Cuカルコバライト型化合物半導体薄膜を用いた太陽電池化の研究  
極超音速流の吸収分光計を開発するため、窒素などの気体の発光スペクトル

東北大学大学院理学研究科	美齊津文典
石川工業高等専門学校	瀬戸 悟
大阪大学大学院基礎工学研究科	半沢 弘昌
東京理科大学理学部第一学部	安藤 静敏
名古屋大学大学院工学研究科	張 凤遠

## 施設利用 (I) 分子物質開発研究センター

金属錯体の構造と物性および反応性  
半導体薄膜の評価  
機能性膜の表面状態  
コバルト超微粒子の磁性  
分子性導体の光電子分光  
金属酵素モデルの精密設計と反応制御  
アモルファス合金の磁気特性と電子構造  
鉄基DO<sub>3</sub>型規則合金の電気的・磁性的性質  
電子スピノ共鳴法によるアモルファスカーボン膜の研究  
ナノチューブ状物質の構造、磁性  
準結晶の磁性  
(Nd, Sr)<sub>2</sub>NiO<sub>4</sub>の低温結晶構造  
LPE法により作製した磁性ガーネット薄膜の磁気特性  
K型 BEDT-TTF有機伝導体の金属-絶縁体転移の研究  
ESCAを用いた半導体表面層の元素分析

愛知教育大学	中島 清彦
豊橋技術科学大学	吉田 明
豊橋技術科学大学	角田 篤義
三重大学教育学部	佐光三四郎
北陸先端科学技術大学院大学	北川 宏
名古屋工業大学	増田 秀樹
名古屋工業大学	山田 正明
名古屋工業大学	加藤 雅章
大阪大学大学院基礎工学研究科	半沢 弘昌
科学技術振興事業団	坂東 俊治
名古屋大学情報文化学部	松尾 進
名古屋大学大学院工学研究科	野崎 洋
名古屋工業大学	安達 信泰
東京大学大学院工学系研究科	谷口 弘三
石川工業高等専門学校	山田 健二

## 施設利用 (I) 装置開発室

希土類マンガナイトの相転位とその物性の研究  
次世代量子デバイスのための微細構造形成

豊橋技術科学大学	亀頭 直樹
名古屋大学工学部	堀 勝

## 施設利用 (II)

電子計算機リポートを参照してください。



### UVSOR 課題研究

角度分解紫外光電子分光法による有機薄膜の電子状態研究

分子科学研究所（千葉大）

上野 信雄

### UVSOR 協力研究

SRによるナノ構造形成と評価のビームライン建設  
赤外放射吸収分光法を用いたダイヤモンド表面反応の観察  
長残光性物質SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>の光電子分光  
フラーレン類の光電子分光  
層状複合酸化物の角度分解光電子分光  
ARUPSによる有機高分子Poly薄膜の表面構造の解析  
光電子分光による水素終端化シリコン上の銅フタロシアニンの研究  
有機／金属界面の電子構造制御の研究

姫路工業大学高度産業科学技術研究所  
名城大学理工学部  
京都大学大学院理学研究科  
千葉大学工学部  
富山大学理学部  
千葉大学大学院自然科学研究科  
筑波大学物質工学系  
名古屋大学大学院理学研究科

松井 真二  
繩田 正人  
田中耕一郎  
日野 照純  
宮崎 隆文  
奥平 幸司  
丸山 隆浩  
石井 久夫

### UVSOR 招へい協力研究

高分解能斜入射分光器の高性能化

広島大学理学部

吉田 啓晃

### UVSOR 施設利用

遷移金属酸化物の真空紫外反射分光  
ワイドバンドギャップを有する無機および有機絶縁材料の吸光・発光特性  
放射光とレーザーを組み合わせた内殻励起子の2光子分光  
水素結合型強誘電体PbHPO<sub>4</sub>とその重水素化物のVUVスペクトル  
内殻励起子2光子反射分光  
タンゲステン酸塩の光物性  
ポリエチルフィルムの反射および蛍光励起スペクトル  
真空紫外レーザー用光学素子の光学特性評価  
アルカリ土類弗化物の多層膜におけるS TE発光  
LiCAF系結晶の紫外域光学特性  
BL1Bの整備  
イオン性結晶表面に特有の電子状態の解明  
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  
コインシデンス分光研究の新展開2  
TiO<sub>2</sub>表面からのイオン脱離機構の研究(III)  
BL2B1の整備  
真空紫外光照射による、半導体薄膜成長初期過程の原子レベルでの観察  
一酸化鉛の光誘起吸収と光・熱刺激発光～共有結合性物質の欠

東京大学大学院工学系研究科  
早稲田大学理工学部  
大阪歯科大学  
大阪電気通信大学工学部  
岡山大学理学部  
海上保安大学校  
徳島文理大学工学部  
宮崎大学工学部  
琉球大学教育学部  
分子科学研究所  
分子科学研究所  
東京工業大学大学院理工学研究科  
愛媛大学理学部  
分子科学研究所  
分子科学研究所  
分子科学研究所  
豊橋技術科学大学  
福井工業高等専門学校

十倉 好紀  
大木 義路  
辻林 徹  
大野 宣人  
有本 收  
藤田 正実  
大内 伊助  
黒澤 宏  
江尻 有郷  
猿倉 信彦  
鎌田 雅夫  
枝元 一之  
長岡 伸一  
間瀬 一彦  
田中慎一郎  
田中慎一郎  
吉田 明  
北浦 守

## 陥生成過程～

## BL3A1 の整備

1, 2 倍分子陽イオンの生成と解離過程

メタロセンの浅い内殻励起に起因する解離過程の研究

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

二次元画像観測法による分子の光解離の研究

## BL3A2 の整備

シリコン=有機分子ハイブリッド構造の電子状態

Zn-Mg-Ho および Al-Ni-Co 準結晶の高分解能光電子分光 II

Cs/GaAs における光誘起現象

半導体表面に吸着した Xe 原子の共鳴オージェスペクトルの研究

## BL5A の整備

HeI, HeII 用 2 色多層膜の反射率測定

衛星搭載用極端紫外光撮像器の量子効率測定

SOLAR-B 衛星搭載 X 線望遠鏡の開発

真空紫外光励起による希ガス固体からの可視発光

アモルファス半導体の光黒化現象に関する研究

軟 X 線反射型マスクのコントラスト測定

## BL5B の整備

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

希土類リン化合物の赤外-遠赤外反射スペクトル

量子スピン系  $Y_2BaNiO_5$  と  $Nd_2BaNiO_5$  の遠赤外分光

希土類モノブニクタイトの赤外磁気円偏光二色性

## BL6A1 の整備

BL7A の集光ミラーの性能評価

軟 X 線照射によるシリカの損傷効果

Pd 触媒の電子状態に対する担体効果の L殻 XAFS による解析

ホランダイトイ型酸化物の XAFS による構造解析

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

p 型窒化物半導体の NEXAFS

担持 4d-metal の L 殻 XANES による局所構造解析

リチウム 2 次電池用遷移金属酸化物正極の電子状態

Al K-XAFS および Fe L-XANES による Fe/AlN 界面の研究

全電子収量 XAFS によるアルミニ腐食生成物の構造解析

硫化物ガラス中における S 周りの局所構造

金属臭化物の Br-L 吸収スペクトル測定

二次電子収量法を用いた Al,Si KXAFS 測定による含ゲルマニウムライトの局所構造解析

分子科学研究所

鎌田 雅夫

大阪市立大学工学部

増岡 俊夫

姫路工業大学理学部

小谷野猪之助

分子科学研究所

見附孝一郎

分子科学研究所

下條 竜夫

分子科学研究所

下條 竜夫

東京大学物性研究所

吉信 淳

名古屋大学大学院工学研究科

曾田 一雄

分子科学研究所

鎌田 雅夫

分子科学研究所

田中慎一郎

分子科学研究所

鎌田 雅夫

東北大学科学計測研究所

江島 丈雄

東京大学大学院理学系研究科

中村 正人

国立天文台

常田 佐久

学習院大学理学部

荒川 一郎

岐阜大学工学部

林 浩司

姫路工業大学高度産業科学技術研究所

新部 正人

分子科学研究所

鎌田 雅夫

福井大学工学部

中川 英之

神戸大学理学部

難波 孝夫

神戸大学理学部

太田 仁

神戸大学大学院自然科学研究科

木村 真一

分子科学研究所

鎌田 雅夫

東京大学物性研究所

木下 豊彦

名古屋大学大学院工学研究科

吉田 朋子

名古屋大学大学院工学研究科

吉田 寿雄

名古屋大学難処理人工物研究センター

服部 忠

名古屋大学理工科学総合研究センター

田辺 哲朗

福井大学工学部

福井 一俊

京都工芸繊維大学工芸学部

有谷 博文

京都大学大学院エネルギー科学研究所

八尾 健

大阪大学産業科学研究所

高橋 昌男

工業技術院大阪工業技術研究所

梅咲 則正

神戸大学理学部

河本 洋二

鳴戸教育大学

松川 徳雄

福岡大学理学部

脇田 久伸



層状ペロブスカイト物質の光学スペクトル	山形大学理学部	大西 彰正
強相関電子系の近赤外-真空紫外領域における光反射分光	神戸大学理学部	岡村 英一
超臨界キセノン中の臭素置換芳香族炭化水素のイオン化ポテンシャル	神戸大学発達科学部	中川 和道
アミノ酸蒸着膜の真空紫外吸収スペクトル	神戸大学発達学部	蛇名 邦楨
窒化物半導体のVIS-VUV反射スペクトル	佐賀大学理工学部	郭 其新
BL7Bの整備	分子科学研究所	鎌田 雅夫
SRを用いた量子構造体形成プロセス	名古屋大学大学院工学研究科	後藤 俊夫
シンクロトロン放射光励起エピタキシーによるテルル化亜鉛への不純物ドーピング	佐賀大学理工学部	小川 博司
磁性多層膜の軟X線ファラデー回転	東北大学科学計測研究所	渡辺 誠
O K-edge XANESによるメタン酸化カップリング触媒のキャラクタリゼーション	東京工業大学工学部	大塚 潔
窒化物半導体混晶の窒素K内殻吸収測定(III)	福井大学工学部	山本 篤勇
K殻電子励起による多原子分子の反応制御	京都教育大学	伊吹 紀男
リチウムマンガンスピネル型酸化物の電子状態	京都大学大学院エネルギー科学研究所	内本 喜晴
有機酸などの内殻励起による光解離過程の研究(2)	広島大学理学部	平谷 篤也
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スペクトルの測定	分子科学研究所	下條 竜夫
BL8B1の整備(偏光度の調整)	分子科学研究所	下條 竜夫
BL8B1の整備(アライメントの校正)	分子科学研究所	下條 竜夫
放射光を利用した素子加工に関する研究	名古屋大学工学部	森田 慎三

中村宏樹	理 論 研 究 系 教 授	11.5.3 ～11.5.9	中 国	第5回日中理論化学シンポジウムで招待講演
三好永作	相 関 領 域 研 究 系 教 授	11.5.3 ～11.5.10	中 国	第5回中日理論化学シンポジウムに出席・資料収集のため
加藤立久	分 子 構 造 研 究 系 助 教	11.5.4 ～11.5.11	ア メ リ カ	米国電気学会・フーレンシンポジウムにて招待講演のため
GAO, Yongli	極端紫外光科学研究系 客員助教授	11.5.5 ～11.5.11	中 国	Asia Pacific Symposium に出席し招待講演を行うため
岡本祐幸	理 論 研 究 系 助 教	11.5.5 ～11.5.11	ア メ リ カ	Princeton University における招待講演
北川禎三	分 子 構 造 研 究 系 教 授	11.5.15 ～11.5.23	ア メ リ カ	日本科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギー転換」分野による研究成果発表及び研究打ち合わせのため
田原太平	極端紫外光科学研究系 助 教	11.5.15 ～11.5.23	ア メ リ カ	「時間分解振動分光に関する国際会議（TRVS）」に出席・発表のため
水谷泰久	分 子 構 造 研 究 系 助 手	11.5.15 ～11.5.23	ア メ リ カ	日本科学技術協力事業「光合成による太陽エネルギー転換」分野による研究成果発表及び研究打ち合わせのため
岩田末廣	理 論 研 究 系 教 授	11.5.20 ～11.5.24	ア メ リ カ	シンポジウム In the Frontiers of Quantum Chemistry and Chemical Reactions に参加のため
中村宏樹	理 論 研 究 系 教 授	11.5.20 ～11.5.24	ア メ リ カ	会議「量子化学と化学反応のフロンティア」にて招待講演
酒井雅弘	分子物質開発研究センター 技 官	11.5.22 ～11.6.6	ア メ リ カ	CLEO/QELS '99 に参加・講演発表及び、スタンフォード大学で共同研究打ち合わせ・実験
猿倉信彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	11.5.22 ～11.6.4	ア メ リ カ	CLEO/QELS '99 に出席発表のため
平等拓範	分子制御レーザー開発研究センター 助 教 授	11.5.22 ～11.6.5	ア メ リ カ	新型固体レーザー、非線型波長変換関連の国際会議 CLEO99 への参加及び発表及びスタンフォード大学で共同研究打ち合わせ
栗村直	分子制御レーザー開発研究センター 助 手	11.5.22 ～11.6.6	ア メ リ カ	新型固体レーザー、非線型波長変換関連の国際会議 CLEO99 への参加及び発表・スタンフォード大学においては共同研究打ち合わせ及び実験のため
黒澤宏	極端紫外光科学研究系 教 授	11.5.23 ～11.5.23	ア メ リ カ	レーザー及び電気光学に関する国際会議に出席し、講演するため
西信之	電 子 構 造 研 究 系 教 授	11.5.23 ～11.6.2	ド イ ツ	分子クラスター国際会議で招待講演マックスボルン研究所で講演のため
藤井正明	電 子 構 造 研 究 系 教 授	11.5.24 ～11.5.30	ド イ ツ	二重共鳴分光法の研究に関する研究討議
岩田末廣	理 論 研 究 系 教 授	11.5.30 ～11.6.4	チ エ コ	日本・チェコジョイントセミナー「分子科学」に参加成果発表、討論のため
北川禎三	分 子 構 造 研 究 系 教 授	11.5.30 ～11.6.4	チ エ コ	日本—チェコジョイントセミナーに出席のため
中村宏樹	理 論 研 究 系 教 授	11.5.30 ～11.6.4	チ エ コ	日・チェコ共同研究「気相及び凝縮相における電子移動、プロトン輸送及びエネルギー変換過程」に係わるシンポジウムに参加のため
茅幸二	分 子 科 学 研 究 所 所 長	11.5.30 ～11.6.4	チ エ コ	国際セミナー「分子科学：気相及び凝縮相における電子移動、プロトン輸送及びエネルギー変換過程」に出席のため
薬師久彌	分 子 集 団 研 究 系 教 授	11.5.31 ～11.6.4	チ エ コ	日本・チェコ共同研究セミナーにおいて講演のため
GAO, Yongli	極端紫外光科学研究系 客員助教授	11.6.5 ～11.6.11	香 港	Asia Pacific Symposium に出席し招待講演を行うため



濱 広 幸	極端紫外光実験施設 助 教	11.6.7 ～11.6.12	韓 国	第4回アジア自由電子レーザーシンポジウムに出席
江 田 茂	極端紫外光実験施設 助 手	11.6.7 ～11.6.12	韓 国	第4回アジア自由電子レーザーシンポジウムに出席
田 中 桂 一	相関領域研究系 助 教	11.6.12 ～11.6.25	アメリカ	第54回国際分子光会議に出席発表及び研究打ち合わせのため
原 田 賢 介	相関領域研究系 助 手	11.6.12 ～11.6.20	アメリカ	第54回国際分子光会議に出席発表及び研究打ち合わせのため
北 川 穎 三	分子構造研究系 教 授	11.6.15 ～11.6.24	アメリカ ギリシア	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」分野グループ共同研究及び末端酸化酵素の構造ダイナミクス国際シンポジウム出席発表及び研究打ち合わせ
鈴 木 俊 法	電子構造研究系 助 教	11.6.18 ～11.7.9	イタリア・ラ ンス・イギリス	第16回分子エネルギー移動に関する国際会議ならびに第113回Faraday会議にて招待講演のため
中 村 宏 樹	理論研究系 教 授	11.6.20 ～11.7.6	イタリア	化学極端紫外光科学研究系理論に関する討議と講演
薬 師 久 彌	分子集団研究系 教 授	11.6.24 ～11.7.5	チエコ ポーランド	分子科学：気相及び凝縮相における電子移動、プロトン輸送及びエネルギー変換過程に関する共同研究
間瀬 一彦	極端紫外光科学研究系 助 手	11.6.25 ～11.7.3	スペイン	アセバサマースクール1999にて講演及び研究打ち合わせ
宇理須 恒 雄	極端紫外光科学研究系 教 授	11.6.26 ～11.6.28	中 国	研究打ち合わせのため
岩 田 末 廣	理論研究系 教 授	11.6.27 ～11.7.7	ポーランド	Jagiellonian UniversityでRoman教授と研究に関する討論、研究資料収集、5-th International Conference COMPUTERS IN CHEMISTRY'99に参加発表研究資料収集のため
南 部 伸 孝	電子計算機センター 助 手	11.6.28 ～11.12.25	アメリカ	アルゴンヌ国立研究所の理論化学グループと共同研究を行うため
加 藤 立 久	分子構造研究系 助 教	11.7.4 ～11.7.16	ドイ ツ	フラー・レン・金属フラー・レンの磁気共鳴分光に関する研究連絡、打ち合わせ、協力研究のため
小 澤 智 宏	錯体化学実験施設 助 手	11.7.10 ～11.7.18	アメリカ	Ninth International Conference on Biological Inorganic Chemistry(ICBIC)への出席のため
北 川 穎 三	分子構造研究系 教 授	11.7.11 ～11.7.18	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実施及び研究成果発表のため
渡 辺 芳 人	相関領域研究系 教 授	11.7.11 ～11.7.18	アメリカ	第9回国際生物無機化学学会にて招待講演
藤 井 浩	分子物質開発研究センター 助 教	11.7.11 ～11.7.23	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のため
小 杉 信 博	極端紫外光科学研究系 教 授	11.7.17 ～11.7.25	アメリカ	光イオン、光イオン化、光離脱に関するゴードン会議出席
田 原 太 平	極端紫外光科学研究系 助 教	11.7.17 ～11.7.26	ベルギー スイス	「フェムト化学第4回 (Femtochemistry IV)」に出席、発表及びスイスETHを訪問、講演
繁 政 英 治	極端紫外光実験施設 教 授	11.7.17 ～11.7.25	アメリカ	光イオン、光イオン化、光離脱に関するゴードン会議出席
宇理須 恒 雄	極端紫外光科学研究系 教 授	11.7.18 ～11.7.23	アメリカ	The International Symposium on Optical Science, Engineering, and Instrumentation出席し、招待講演を行うため
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター 助 教	11.7.24 ～11.8.1	アメリカ	ゴードン会議に座長、発表のため出席のため
北 川 穎 三	分子構造研究系 教 授	11.7.25 ～11.8.7	アメリカ	第19回国際光化学会議及びTelluride Workshop "Protein Dynamics" に参加のため

細 越 裕 子	相 関 領 域 研 究 系 手	11.7.25 ～11.8.1	ア メ リ カ	第 17 回高圧力科学と技術に関する国際会議に出席し、研究成果発表を行うため
岡 本 祐 幸	理 論 研 究 系 授	11.7.26 ～11.8.1	ア メ リ カ	日米科学協力事業セミナー招待講演のため「計算機シミュレーションダイナミックスにおける長時間スケール問題の解決」
米 満 賢 治	理 論 研 究 系 授	11.7.27 ～11.8.12	ス ウ ェ 丹 芬 莱 兰 律	分子性及び酸化物超伝導の物理と科学に関する国際会議 (MOS99) (於ヘルシンキ) に出席し、研究発表を行うため
竹 内 佐 年	極 端 紫 外 光 科 学 研 究 系 手	11.7.31 ～11.8.8	ア メ リ カ	第 19 回国際光化学会議出席のため
岸 根 順 一 郎	理 論 研 究 系 手	11.8.3 ～11.8.13	芬 莱 兰 律	第 22 回低温物理学国際会議に出席し、ポスター発表及び討論のため
MÜLLER- DETHLEFS, Klaus	電 子 構 造 研 究 系 手	11.8.13 ～11.8.29	イ ギ リ ス	二重共鳴分光法の研究に関する研究討議のため
濱 広 幸	極 端 紫 外 光 実 験 施 設 教 授	11.8.20 ～11.8.28	ド イ ツ	第 21 回国際自由電子レーザー会議に出席のため
中 村 宏 樹	理 論 研 究 系 授	11.8.21 ～11.8.28	ア メ リ カ	アメリカ化学会シンポジウム「電子的非断熱過程」にて講演のため
鈴 木 俊 法	電 子 構 造 研 究 系 授	11.8.21 ～11.8.27	ア メ リ カ	米国化学会年会にて招待講演及び研究打ち合わせ
伊 藤 正 勝	電 子 計 算 機 セン タ ー リ サ チ ア ソ シ エ イ ト	11.8.21 ～11.8.28	ア メ リ カ	アメリカ化学会会議にて発表及び研究に関する資料収集のため
保 坂 将 人	極 端 紫 外 光 実 験 施 設 手	11.8.22 ～11.8.30	ド イ ツ	第 21 回国際自由電子レーザー会議にて発表のため
猿 倉 信 彦	分子制御レーザー開発研究センター助 教 授	11.8.29 ～11.9.4	韓 国	CLEO/PR'99 に出席のため
栗 村 直	分子制御レーザー開発研究センター助 教 手	11.8.30 ～11.9.4	韓 国	「CLEO Pacific Rimへの参加及び発表」また Sogang University にて、非線型波長材料・波長変換法に関する情報交換・打ち合わせのため
平 田 文 男	理 論 研 究 系 授	11.9.2 ～11.9.10	スペイン	ヨーロッパ研究会議 (European Reserch Conference) シンポジウムにおける招待講演
田 中 晃 二	錯 体 化 学 実 験 施 設 教 授	11.9.4 ～11.9.22	ド イ ツ フ ラ ン ス	第 5 回二酸化炭素の有効利用に関する国際会議での講演並びにルイ・パスツール大学での講演と講義のため
奥 村 刚	理 論 研 究 系 手	11.9.4 ～12.3.2	フ ラ ン ス	文部省在外研究員として柔らかい物質（ソフト・マター）の物理化学的性質に関する研究に従事するため
岸 根 順 一 郎	理 論 研 究 系 手	11.9.9 ～11.9.20	ア メ リ カ	第 10 回多体問題の進歩についての国際会議において 3 件のポスター発表を行い、討論を行う
岩 田 末 廣	理 論 研 究 系 授	11.9.10 ～11.9.16	中 国	北京国際会議（光電子・分光：分子イオンとクラスター）に参加研究発表・研究資料収集
藤 井 正 明	電 子 構 造 研 究 系 授	11.9.11 ～11.9.18	中 国	北京国際光電子分光会議：分子、イオン及びクラスターに出席のため
鎌 田 雅 夫	極 端 紫 外 光 実 験 施 設 教 授	11.9.11 ～11.9.24	エ 斯 ト ニ ア オーストリア	欠陥生成と脱離についてセミナー並びにヨーロッパ表面科学国際会議に出席し発表を行うため
長 門 研 吉	相 関 領 域 研 究 系 授	11.9.12 ～11.9.19	イ タ リ ア	第 6 回国際グローバル大気科学プロジェクト会議に出席、情報収集及び研究打ち合わせのため
渡 邊 一 雄	分子制御レーザー開発研究センター助 手	11.9.16 ～11.9.27	オーストラリア	学会発表（学会名：ECOSS-18）
平 等 拓 範	分子制御レーザー開発研究センター助 教 授	11.9.22 ～11.10.3	ア メ リ カ	CNOM ミーティング、OSA アニュアルミーティングへの参加を通じてスタンフォード大学との共同研究を遂行する

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	11.9.22 ～11.10.3	アメリカ	CNOM Annual Meeting 及び OSA Annual Meeting 出席
小林 速男	分子集団研究系 教	11.9.23 ～11.10.1	イギリス	有機分子性金属、超伝導体、強磁性体国際シンポジウムに出席し、講演する
岡本 祐幸	理論研究系 助教	11.9.24 ～11.10.1	フランス	CECAM（欧州原子力分子研究センター）Workshop にて講演のため
薬師 久 弥	分子集団研究系 教	11.9.25 ～11.10.1	イギリス	ISCOM'99に出席・発表
田中 慎一郎	極端紫外光実験施設 助 手	11.9.25 ～11.10.4	アメリカ	電子遷移誘起脱離に関する国際会議（DIET-8）の研究発表のため
谷村 吉隆	理論研究系 助教	11.9.26 ～11.10.8	アメリカ	アメリカ分光学年会に出席及びコロラド大学にて招待講演と討議をする為
田中 晃二	錯体化学実験施設 教	11.9.28 ～11.10.13	フランス	ルイ・パスツール大学での講演と講義のため

11. 4.30	藤 原 英 夫	辞 職	東京大学大学院工学系研究科リサーチ・アソシエイト(未来開拓)	分子構造研究系分子構造学第一研究部門助手
11. 4.30	小 林 かおり	辞 職	米国ブルックヘブン国立研究所博士研究員	技術課第一技術班分子構造研究系技術係員
11. 5. 1	繁 政 英 治	転 入	極端紫外光実験施設助教授	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所物質科学第一研究系助手
11. 5. 1	今 枝 健 一	配 置 換	分子集団研究系物性化学研究部門助手	技術課第二技術班分子集団研究系技術係長
11. 5. 1	小 崎 紳 一	転 出	山形大学教育学部助教授	相関領域研究系相関分子科学第一研究部門助手
11. 5.16	渡 邊 一 雄	併 任	総合研究大学院大学先導科学研究科助手	(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)
11. 5.16	大 竹 秀 幸	併 任	総合研究大学院大学先導科学研究科助手	(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手)
11. 5.17	寺 田 三 和 子	採 用	分子制御レーザー開発研究センター事務補佐員	
11. 6. 1	水 谷 文 保	昇 任	技術課第三技術班電子計算機技術係長	技術課第三技術班電子計算機技術係技術主任
11. 6. 1	中 村 永 研	転 入	技術課第四技術班極端紫外光実験技術係技術主任	北陸先端科学技術大学院大学研究協力部研究協力課技術官
11. 6. 1	林 憲 志	所 属 換	技術課第三技術班装置開発技術係員	技術課第四技術班極端紫外光実験技術係員
11. 6. 1	磯 貝 美 穂	採 用	分子集団研究系事務補佐員	
11. 6. 1	岡 田 一 俊	採 用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	大 塚 博 史	採 用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	神 坂 英 幸	採 用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	長 屋 州 宣	採 用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	日 野 理	採 用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	今 井 隆 志	採 用	理論研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	木 下 朋 子	採 用	電子計算機センターリサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	齊 川 次 郎	採 用	分子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	春 田 奈 美	採 用	分子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	和 泉 田 真 司	採 用	電子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)
11. 6. 1	小 杉 健 太 郎	採 用	電子構造研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学研究科院生)

11. 6. 1	小 島 絵美子	採 用	分子集団研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	岩 堀 史 靖	採 用	相関領域研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	原 功	採 用	相関領域研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	牧 原 伸 征	採 用	相関領域研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	鈴 木 健太郎	採 用	相関領域研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	野 田 英 之	採 用	極端紫外光科学研究系リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	伊 藤 博 一	採 用	錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	梅 本 和 彦	採 用	錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	和 田 亨	採 用	錯体化学実験施設リサーチ・アシスタント	(総合研究大学院大学数物科学 研究科院生)
11. 6. 1	田 中 健太郎	転 出	東京大学大学院理学系研究科化 学専攻助手	錯体化学実験施設錯体触媒研究 部門助手
11. 6. 4	幡 野 香代子	退 職		分子集団研究系事務補佐員
11. 8. 1	北 川 権 三	配 置 換	基礎生物学研究所生命環境科学 研究センター教授	分子構造研究系分子動力学研究 部門教授
11. 8. 1	北 川 権 三	併 任	分子構造研究系分子動力学研究 部門教授	(基礎生物学研究所生命環境科 学研究センター教授) 12. 3. 31 まで
11. 8. 1	間 瀬 一 彦	転 出	高エネルギー加速器研究機構物質構造 科学研究所物質科学第一研究系助教授	極端紫外光科学研究系反応動力 学研究部門助手
11. 8.16	天 能 精一郎	転 出	名古屋大学情報文化学部自然情 報学科助教授	理論研究系分子基礎理論第三研 究部門助手
11. 8.16	今 枝 健 一	転 出	豊橋技術科学大学工学部助教授	分子集団研究系物性化学研究部 門助手
11. 9. 1	濱 広 幸	転 出	東北大学大学院理学研究科助教 授	極端紫外光実験施設助教授
11. 9. 1	濱 広 幸	併 任	極端紫外光実験施設助教授	(東北大学大学院理学研究科助 教授) 12. 3. 31 まで
11. 9.30	和泉田 真 司	辞 職		電子構造研究系リサーチ・アシ スタント

分子研レターズ41号も無事発刊の運びとなりました。御多忙中にもかかわらず御執筆いただいた皆様には編集委員一同心から御礼申し上げます。

1999年4月に茅幸二新所長をお迎えし、新しい分子研の活動をお伝えする第1号です。研究所をとりまく諸情勢は大きく変化していこうとしておりますが、今後ともこの分子研レターズが所内外のコミュニケーションの媒体となるようにと願っております。最後に企画調査係の桑原博明氏・杉江左知江女史と分子研広報担当の佐藤敦子女史には原稿の整理校正等実務を担当していただきました。

分子研レターズ編集委員

藤井正明（委員長）

加藤立久（本号編集担当）

小澤智宏

谷村吉隆

中村敏和

見附孝一郎

分子研レターズ No. 41

発行年月	平成 12 年 1 月
印刷年月	平成 12 年 1 月
発 行	岡崎国立共同研究機構 分子科学研究所
編 集	分子研レターズ編集委員会
印 刷	プリ・テック株式会社

(FSC100%再生紙使用)

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/>